



**FAKULTA
CHEMICKO-INŽENÝRSKÁ
VŠCHT PRAHA**

Sborník anotací



Fakulta chemicko-inženýrská

Organizační tým

FAKULTNÍ KOORDINÁTOR

doc. Ing. Jitka Čejková, Ph.D.

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOŘI

402 [Ústav analytické chemie](#)

Ing. Martin Člupek, Ph.D.

403 [Ústav fyzikální chemie](#)

doc. Ing. Ondřej Vopička, Ph.D.

409 [Ústav chemického inženýrství](#)

doc. Dr. Ing. Pavlína Basařová

444 [Ústav fyziky a měřicí techniky](#)

RNDr. Pavel Galář, Ph.D.

446 [Ústav matematiky, informatiky a kybernetiky](#)

Ing. Iva Nachtigalová, Ph.D.



28/11 2024

STUDENTSKÁ VĚDECKÁ KONFERENCE FCHI VŠCHT PRAHA

Zlatí sponzoři



Stříbrní sponzoři



Bronzoví sponzoři



KDO JSME?

PRO.MED.CS
Praha a. s.

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

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

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

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

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

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

ČESKÁ FARMACEUTICKÁ SPOLEČNOST

SÍDLO NA PRAZE 4

VÍCE NEŽ 900 ZAMĚSTNANCŮ

PŮSOBNOST VE VÍCE NEŽ 30 ZEMÍCH

VLASTNÍ VĚDECKÝ VÝZKUM A VÝVOJ

VLASTNÍ VÝROBA V PRAZE

ZAJÍMÁŠ SE O SVĚT FARMACIE?

**CHCEŠ BÝT SOUČÁSTÍ SPOLEČNOSTI,
KTERÁ NA TRH UVÁDÍ NOVÁ
INOVATIVNÍ LÉČIVA?**



**PAK SE PŘIDEJ K NÁM
A OBJEV NÁŠ SVĚT!**

**Absolventi VŠCHT u nás nacházejí uplatnění
nejčastěji na těchto odděleních:**



Vývoj lékových forem



Výroba léčiv



Farmakovigilance



Registrace léčiv



CO TI NABÍDNEME?



Práci na projektech, které vedou ke zlepšení kvality života pacientů



Prostředí firmy, které podporuje inovativní léčebné metody



Atraktivní mzdu i bez předchozí praxe



Mnoho prostoru pro odborné vzdělávání a kariérní rozvoj



Lákavé benefity



Přátelský tým, který jde za společným cílem – přispívat ke zdraví našich pacientů



Designové kanceláře na Brumlovce

www.promedcs.com

Rafinérská a petrochemická skupina ORLEN Unipetrol

Přidejte se do našeho týmu!

Víte, jaké produkty
s námi budete vyrábět?

polypropylen (PP)

na vnitřky helem, chráničů, ...

polyvinylchlorid (PVC)

na chrániče holení, loktů, stehen, ...

polyetylen (PE)

na boty bruslí, chrániče zubů, ...



Více informací na orlenunipetrol.cz

Svůj životopis nám pošlete na: kariera@orlenunipetrol.cz



Ústav analytické chemie (402)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Martin Člupek, Ph.D.

SEZNAM SEKČÍ

1. [Analytická chemie I](#)
2. [Analytická chemie II](#)

SEZNAM SOUTĚŽÍCÍCH

1. Bc. **Marek Beneš**, M1, doc. RNDr. Romana Sokolová, Ph.D., *Vývoj metodiky pro měření fluorescenční spektroelektrochemie*
2. **Monika Felcmanová**, B3, Ing. Lucie Kolesniková, Ph.D., *Pyrolýza anhydridu kyseliny butanové z pohledu rotační spektroskopie*
3. Bc. **Lada Fialová**, M2, doc. RNDr. Ing. Řezanka Pavel, Ph.D., *Vývoj metody pro chirální separaci mandlové kyseliny pomocí kapilární elektroforézy s využitím kationického cyklodextrinu*
4. **Zuzana Frková**, B3, Ing. Magdaléna Vágnerová, *Stanovení nové psychoaktivní látky 25E-NBOH v potkaních tkáních metodou LC-MS*
5. Bc. **Barbora Holubková**, M2, Ing. Adéla Jenišťová, Ph.D., *Stanovení forenzních parametrů pomocí vibrační spektroskopie rohovek*
6. **Petr Kalina**, B3, Ing. Magdalena Vágnerová, *Stanovení nové psychoaktivní látky 25E-NBOH v potkaním séru metodou LC-MS*
7. Bc. **Jana Knytllová**, M2, PharmDr. Alžběta Nemeškalová, Ph.D., *Ambientní hmotnostní spektrometrie pro analýzu selektivních modulátorů androgenního receptoru (SARM)*
8. Bc. **Jan Kořínek**, M2, prof. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D., *Development of analytical methods for stability profiling of excipients in pharmaceutical amorphous solid dispersion*
9. Bc. **Kristýna Krejčová**, M2, Ing. Marie Švecová, Ph.D., *Vliv experimentálních aspektů na kvantitativní analýzu cysteinu pomocí povrchem zesílené Ramanovy spektroskopie*
10. Bc. **Hana Kučerová**, M2, doc. Ing. Antonín Kaňa, Ph.D., *Charakterizace křemíkových materiálů pomocí LA-ICP-MS*
11. **Barbora Mikysková**, B3, doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D., *Studium interakce syntetického geopolymery s Cs-137*
12. **Barbora Poledníková**, B3, Ing. Martin Havlík, Ph.D., *Studium interakce oligo-Trögerových bázi s léčivy pomocí absorpční a emisní spektroskopie*
13. **František Pusch**, B3, doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D., *Studium molekulové struktury a komplexačních schopností kalixfyrinů*

14. Bc. **Gabriela Tůmová**, M2, doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D., *Analýza aromatických látek v iQOS cigaretách plynovou chromatografií*
15. **Kryštof Tupý**, B3, Ing. Martin Havlík, Ph.D., *Nová generace polymethiniových solí a jejich využití v selektivním barvení buněk*
16. **Martin Vančura**, B3, doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D., *Optimalizace podmínek pro chirální separaci modelového léčiva kapilární elektroforézou*

SPONZOŘI ÚSTAVU ANALYTICKÉ CHEMIE

 <p>NICOLET CZ MOLECULAR SPECTROSCOPY</p>	
 <p>PTIK INSTRUMENTS</p>	 <p>PRO.MED.CS Praha a.s.</p>
 <p>ZENTIVA</p>	 <p>LECO EMPOWERING RESULTS</p>
 <p>Altium</p>	 <p>SHIMADZU Excellence in Science</p>
 <p>avantor™</p>	 <p>onsemi.</p>
 <p>Pilsner Urquell.</p>	 <p>vesmír</p>

Analytická chemie I

MÍSTO: A238

KOMISE

Předseda komise: doc. Mgr. Tereza Uhlíková, Ph.D.

Členové komise:

- Ing. Kristýna Kantnerová, Dr. sc. ETH Zürich
- Ing. Lucie Kolesniková, Ph.D.
- RNDr. František Kesner, Ph.D. (NICOLET CZ s.r.o.)

SEZNAM SOUTĚŽÍCÍCH

- Bc. **Marek Beneš**, M1, doc. RNDr. Romana Sokolová, Ph.D., *Vývoj metodiky pro měření fluorescenční spektroelektrochemie*
- Bc. **Lada Fialová**, M2, doc. RNDr. Ing. Řezanka Pavel, Ph.D., *Vývoj metody pro chirální separaci mandlové kyseliny pomocí kapilární elektroforézy s využitím kationického cyklodextrinu*
- Bc. **Barbora Holubková**, M2, Ing. Adéla Jenišťová, Ph.D., *Stanovení forenzních parametrů pomocí vibrační spektroskopie rohovek*
- Bc. **Jana Knytlová**, M2, PharmDr. Alžběta Nemeškalová, Ph.D., *Ambientní hmotnostní spektrometrie pro analýzu selektivních modulátorů androgenního receptoru (SARM)*
- Bc. **Jan Kořínek**, M2, prof. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D., *Development of analytical methods for stability profiling of excipients in pharmaceutical amorphous solid dispersion*
- Bc. **Kristýna Krejčová**, M2, Ing. Marie Švecová, Ph.D., *Vliv experimentálních aspektů na kvantitativní analýzu cysteinu pomocí povrchem zesílené Ramanovy spektroskopie*
- Bc. **Hana Kučerová**, M2, doc. Ing. Antonín Kaňa, Ph.D., *Charakterizace křemíkových materiálů pomocí LA-ICP-MS*
- Bc. **Gabriela Tůmová**, M2, doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D., *Analýza aromatických látek v iQOS cigaretách plynovou chromatografií*

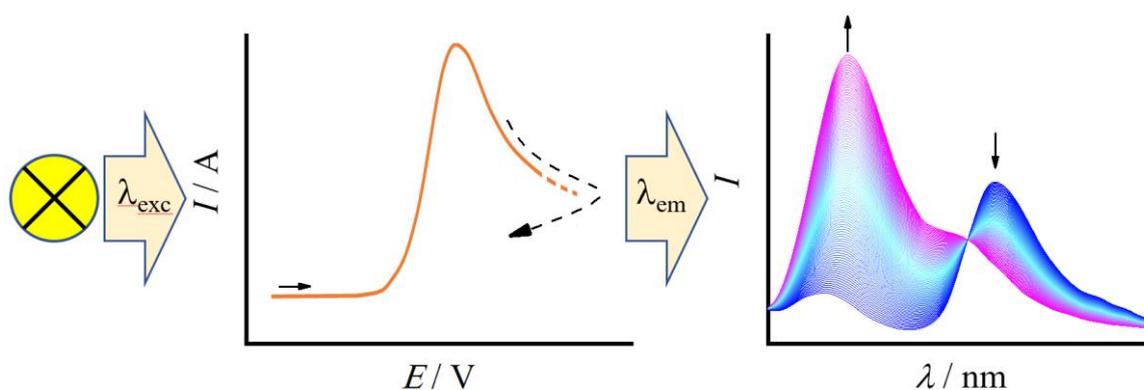
Vývoj metodiky pro měření fluorescenční spektroelektrochemie

Bc. Marek Beneš (M1)

Školitel: doc. RNDr. Romana Sokolová, Ph.D.

Spektroelektrochemické techniky významně přispívají k porozumění spektroskopických vlastností látek v oxidovaném nebo redukovaném stavu. *In situ* spojení elektrochemických a spektroskopických metod je významné pro určení mechanismu redukce nebo oxidace organických sloučenin a je esenciální při studiu molekul reagujících na vložený potenciál změnou svých spektrálních vlastností (změnou barvy atp.). Takové látky mohou nalézat využití například v materiálové chemii, nebo jako součást LCD a potenciálně i OLED panelů.

Cílem této práce bylo rozšířit již zavedenou techniku spektroelektrochemie v ultrafialové, viditelné a infračervené oblasti o sledování fluorescence (FL) v průběhu elektrochemického děje (princip je zobrazen na obrázku níže). Za tímto účelem byly sestaveny a testovány tři různé experimentální sestavy pro FL-spektroelektrochemické experimenty. K ověření použitelnosti a funkčnosti metodiky a experimentálních sestav byly využity látky eosin Y a methylenová modř. Nově vyvinutá metodika měření FL-spektroelektrochemie byla společně s UV-Vis spektroelektrochemií úspěšně využita při studiu redukčních přeměn eosinu Y a methylenové modři v nevodném prostředí.



Vývoj metody pro chirální separaci mandlové kyseliny pomocí kapilární elektroforézy s využitím kationického cyklodextrinu

Bc. Lada Fialová (M2)

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

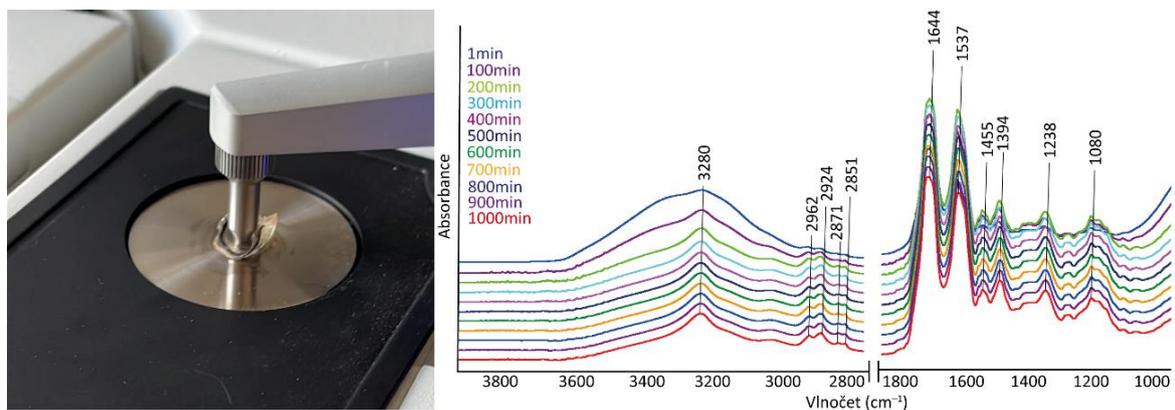
V současnosti jsou všechna nová chirální léčiva uváděná na trh ve formě jediného enantiomeru, z důvodu prevence nežádoucích farmakologických účinků, či zvýšení terapeutické účinnosti. Enantiomerně čistou formu lze získat pomocí chirální syntézy jednoho z enantiomerů nebo chirální separací racemátu. Jednou z možností produkce enantiomerů v průmyslovém měřítku je využití fluidního zařízení s ortogonálně orientovanými hnacími silami. Pro snížení finančních nákladů při optimalizaci separačních podmínek se místo samotných účinných látek používají modelová léčiva, jako je například mandlová kyselina. Pro získání jednotlivých enantiomerů této kyseliny lze využít separaci elektrickým polem v přítomnosti chirálního selektoru. Pro získání optimálních podmínek pro separaci mandlové kyseliny pomocí elektrického pole byla v této práci využita kapilární elektroforéza. Optimalizované parametry pro separaci byly: vhodný chirální selektor (přírodní a substituované cyklodextriny), složení základního elektrolytu a jeho pH. Získané optimální podmínky (fosforečnanový pufr o pH 6,3 obsahující 6-monodeoxy-6-monoamino- β -cyklodextrin jako chirální selektor) budou následně využity v mikrofluidním zařízení pro chirální separaci mandlové kyseliny.

Stanovení forenzních parametrů pomocí vibrační spektroskopie rohovek

Bc. Barbora Holubková (M2)

Školitel: Ing. Adéla Jenišťová, Ph.D.

Tématem této studie je aplikace vibrační spektroskopie při forenzní analýze rohovek s důrazem na určení kriminalistických parametrů, jako je např. vliv délky posmrtného intervalu na optickou odezvu rohovek. K objasnění těchto aspektů byla využita infračervená spektroskopie a Ramanova mikrospektroskopie. Tyto metody strukturní analýzy jsou cenné díky schopnosti poskytnout informace o chemickém složení, ale i sekundární struktuře přítomných látek, např. proteinů, čímž umožňují přímé sledování procesu denaturace tkání. Provedené experimenty zahrnovaly sledování odseparovaných rohovek v určitých časových intervalech, během kterých byly ponechány na vzduchu nebo ve vodě. Dále bylo sledováno stárnutí rohovky v průběhu 24 hodin pomocí infračervené spektroskopie. Cílem těchto experimentů bylo důkladně zkoumat změny v molekulárních a strukturních vlastnostech rohovky, které mohou být klíčové při určování výše zmíněných forenzních parametrů. Tyto metody tedy nejen odhalují forenzně významné změny, ale také přispívají k lepšímu pochopení procesů, které ovlivňují biologické vzorky po smrti. Vzhledem k rostoucímu významu forenzní analýzy v kriminalistice má tato studie potenciál přinést cenné poznatky pro identifikaci a vyšetřování případů, kde je analýza biologických materiálů klíčová.



Ambientní hmotnostní spektrometrie pro analýzu selektivních modulátorů androgenního receptoru (SARM)

Bc. Jana Knytlová (M2)

Školitel: PharmDr. Alžběta Nemeškalová, Ph.D.

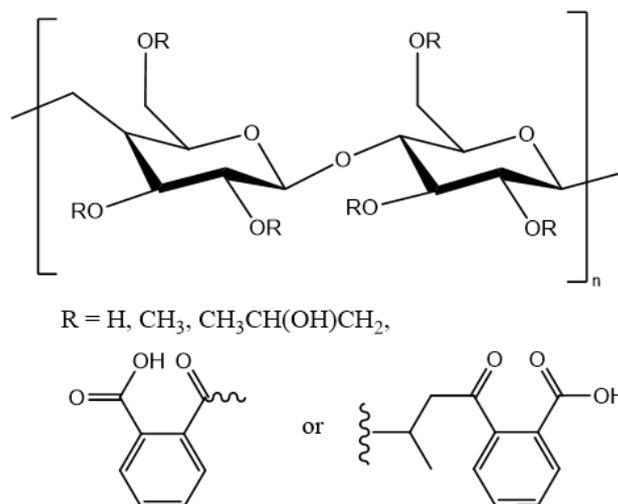
Hmotnostní spektrometrie s ambientní ionizací (AI-MS) umožňuje analýzu vzorků v jejich nativním stavu bez náročné přípravy. V této práci je představena aplikace komerčního iontového zdroje Sicrit na bázi ionizace dielektrickým bariérovým výbojem (DBDI) pro analýzu doplňků stravy obsahujících selektivní modulátory androgenního receptoru (SARM), což jsou látky běžně zneužívané sportovci pro nárůst svalové hmoty. Pro přímou analýzu pomocí zdroje DBDI byly vzorky tablet a kapslí rozpuštěny v methanolu. Vzorek byl dávkován mikrostríkačkou do GC/SPME modulu iontového zdroje Sicrit, který byl ohříván a neustále proplachován dusíkem, aby se systém izoloval od vnějšího prostředí. Iontový zdroj byl spřažen s hmotnostním spektrometrem Orbitrap Exploris 120 pracujícím v pozitivním modu. Pro potvrzení výsledků byly vzorky také analyzovány metodou LC-MS/MS na přístroji Agilent 1290 Infinity II spojeným s hmotnostním spektrometrem Agilent 6470 Triple Quadrupole pracujícím v režimu MRM s elektrosprejovou ionizací. Ačkoliv LC-MS/MS z pohledu kvantitativní analýzy předčilo AI-MS, kvalitativní výsledky obou technik byly v dobré shodě, což naznačuje, že by AI-MS mohla být použita pro rychlé screeniny doplňků stravy na přítomnost nelegálních anabolických látek.

Development of analytical methods for stability profiling of excipients in pharmaceutical amorphous solid dispersion

Bc. Jan Kořínek (M2)

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

Excipients represent a major part of the final drug product and can affect the stability and bioavailability of a drug substance. Hypromellose phthalate is a derivate of hydroxypropyl methylcellulose that is used as a coating agent or polymer matrix for drug release in the upper intestine. One of the preparation methods for formation of dispersed solid systems of API and HPMCP is hot melt extrusion. When the API has a higher melting point, both compounds are exposed to high temperatures, which could lead to undesired changes in the structure of the polymeric matrix. The goal of this project is to develop the UHPLC-MS method for the identification and quantification of impurities produced during the process. First, sample preparation and the UHPLC method have been developed and optimized to identify two peaks of unknown compounds. In the next step, mass spectrometry will be employed for the identification of the impurities.



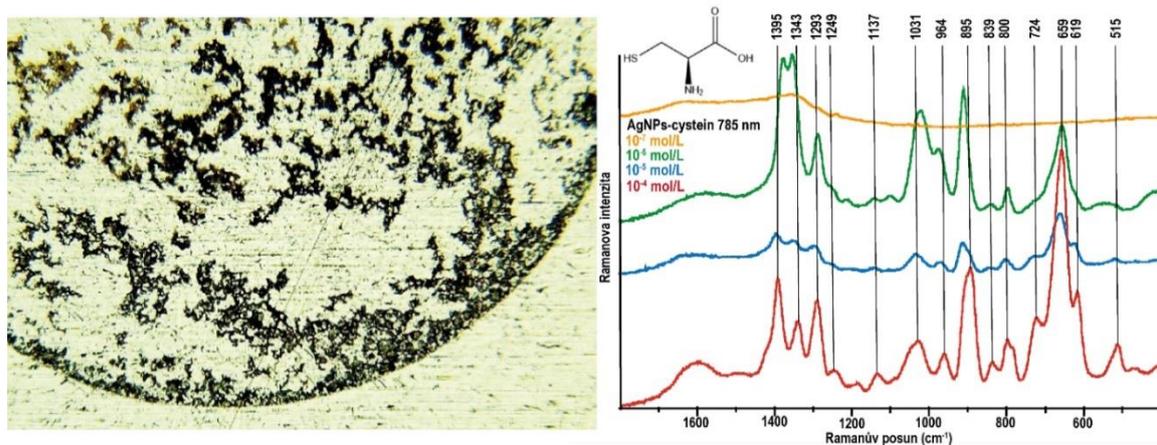
The structure of hypromellose phthalate.

Vliv experimentálních aspektů na kvantitativní analýzu cysteinu pomocí povrchem zesílené Ramanovy spektroskopie

Bc. Kristýna Krejčová (M2)

Školitel: Ing. Marie Švecová, Ph.D.

Spektroskopie povrchem zesíleného Ramanova rozptylu (Surface-enhanced Raman scattering – SERS) je vysoce citlivou technikou, která kromě stopové detekce nabízí možnost studia sorpčních mechanismů a chování biomolekul na rozhraních s plazmonickými kovy. Jednou z takových látek je cystein, neesenciální aminokyselina obsahující thiolovou skupinu klíčovou pro tvorbu disulfidických vazeb v proteinech a regulaci oxidačního stresu, která díky svým redoxním vlastnostem nachází využití ve zdravotnictví a farmacii. Cílem této práce je využití SERS spektroskopie pro kvantitativní analýzu cysteinu a posouzení vlivu jednotlivých experimentálních podmínek na jeho výslednou spektrální odezvu. Jako zesilující substráty byly použity stříbrné nanočástice redukované hydroxylaminem, které byly modifikovány různými koncentracemi cysteinu a následně charakterizovány pomocí UV-VIS spektroskopie. Kromě měření těchto systémů v koloidní formě byly stříbrné nanočástice studovány i pomocí metody kapkově nanášených povrchů, kde byl malý objem modifikovaných nanočástic nanesen na hydrofobní povrch. SERS-aktivita cysteinu byla také zkoumána v závislosti na excitační vlnové délce použitých laserů (532, 633 a 785 nm) a na přídavku soli, který umožňuje částečnou agregaci částic, a tím zvýšení intenzity signálu.



Charakterizace křemíkových materiálů pomocí LA-ICP-MS

Bc. Hana Kučerová (M2)

Školitel: doc. Ing. Antonín Kaňa, Ph.D.

Laserová ablace ve spojení s hmotnostní spektrometrií s indukčně vázaným plazmatem je velmi univerzální technikou pro stanovení plošné distribuce stopových prvků v geologických a biologických vzorcích, a v poslední době také v polovodičových materiálech. V případě polovodičů je ale stále velmi obtížné sledovat homogenitu distribuce stopových prvků na mikroskopické úrovni v celém objemu vzorku. Tato práce je tak zaměřena na charakterizaci dvou materiálů obsahujících ve své struktuře křemík: referenčního materiálu skla (BCR 664) a substrátu z karbidu křemíku. Sledována byla účinnost ablace, a to pomocí optického mikroskopu a profilometru, které umožnili sledovat morfologii a hloubku vytvořených kráterů. Bylo zjištěno, že s rostoucím počtem laserových pulzů se hloubka kráteru lineárně zvětšuje, se zvyšujícím se výkonem laseru však závislost lineární není a projevují se tepelné efekty. Hloubka kráterů se v případě skla pohybovala v rozsahu přibližně 10–46 μm , u karbidu křemíku pak 0,5–30 μm . Tvrdší materiály tak lze ablatovat s výrazně vyšším vertikálním rozlišením. Výsledky této práce slouží jako výchozí data pro trojrozměrné zobrazování („3D imaging“) a analýzu nečistot stopových prvků v definovaném objemovém elementu materiálu.

Analýza aromatických látek v iQOS cigaretách plynovou chromatografií

Bc. Gabriela Tůmová (M2)

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

Tato práce se zaměřuje na problematiku zákazu prodeje zahřívaných tabákových výrobků s charakteristickou příchutí, který nabyl účinnosti v České republice dne 23. října 2023. I přesto, že je zákaz stanoven, konkrétní metodika pro identifikaci aromatických látek pomocí instrumentálních chemických metod dosud neexistuje v rámci Celně technické laboratoře Celní správy České republiky. Cílem této práce je vyvinout metodiku umožňující kontrolu dodržování zákazu prodeje nejprodávanějších zahřívaných tabákových výrobků s charakteristickou příchutí. Vyvinutá metodika je založena na analýze současných metod plynové chromatografie ve spojení s hmotnostní spektrometrií používaných ve světě k identifikaci a kvantifikaci aromatických látek v zahřívaných tabákových výrobcích. V předkládané práci je analyzováno sedm různých příchutí Terrea náplní a dvě beztabákové náplně Levia, všechny od značky iQOS. Náplně jsou zkoumány plynovou chromatografií ve spojení s hmotnostní spektrometrií a vyhodnoceny metodou analýzy hlavních komponent.

Analytická chemie II

MÍSTO: A105

KOMISE

Předseda komise: doc. Ing. Antonín Kaňa, Ph.D.

Členové komise:

- PharmDr. Alžběta Nemeškalová, Ph.D.
- Ing. Karel Vávra, Ph.D.
- Ing. Jan Neuman, Ph.D. (OPTIK INSTRUMENTS s.r.o)

SEZNAM SOUTĚŽÍCÍCH

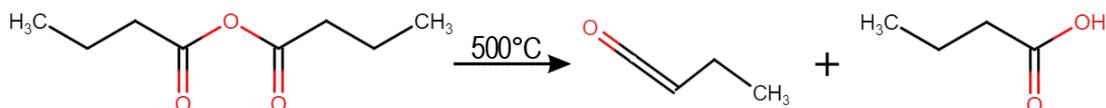
- **Monika Felcmanová**, B3, Ing. Lucie Kolesníková, Ph.D., *Pyrolýza anhydridu kyseliny butanové z pohledu rotační spektroskopie*
- **Zuzana Frková**, B3, Ing. Magdaléna Vágnerová, *Stanovení nové psychoaktivní látky 25E-NBOH v potkaních tkáních metodou LC-MS*
- **Petr Kalina**, B3, Ing. Magdalena Vágnerová, *Stanovení nové psychoaktivní látky 25E-NBOH v potkaním séru metodou LC-MS*
- **Barbora Mikysková**, B3, doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D., *Studium interakce syntetického geopolymeru s Cs-137*
- **Barbora Poledníková**, B3, Ing. Martin Havlík, Ph.D., *Studium interakce oligo-Trögerových bázi s léčivými pomocí absorpční a emisní spektroskopie*
- **František Pusch**, B3, doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D., *Studium molekulové struktury a komplexačních schopností kalixfyrinů*
- **Kryštof Tupý**, B3, Ing. Martin Havlík, Ph.D., *Nová generace polymethiniových solí a jejich využití v selektivním barvení buněk*
- **Martin Vančura**, B3, doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D., *Optimalizace podmínek pro chirální separaci modelového léčiva kapilární elektroforézou*

Pyrolýza anhydridu kyseliny butanové z pohledu rotační spektroskopie

Monika Felcmanová (B3)

Školitel: Ing. Lucie Kolesniková, Ph.D.

Pyrolytické reakce se již dlouhou dobu využívají pro syntézu různých chemických látek, včetně sloučenin, které jsou za běžných podmínek nestabilní a obtížně identifikovatelné. Mezi tyto látky se řadí například iminy, karbeny, radikály nebo také keteny. Po detekci ketenu v mezihvězdném prostředí pomocí rotační spektroskopie se tato molekula a její deriváty staly předmětem astrofyzikálního výzkumu. Identifikace methylketenu v roce 2023 vybízí k hledání následujícího členu homologické řady – ethylketenu. Tato molekula, která dosud postrádá klíčová spektroskopická data, se stává cílem této práce, jejímž účelem je poskytnout přesná referenční spektra pro její jednoznačnou identifikaci v mezihvězdném prostoru. Bude sledována pyrolytická reakce anhydridu kyseliny butanové, přičemž očekávaným produktem je právě ethylketen. K monitorování a identifikaci produktů bude použita rotační spektroskopie.



Stanovení nové psychoaktivní látky 25E-NBOH v potkaních tkáních metodou LC-MS

Zuzana Frková (B3)

Školitel: Ing. Magdaléna Vágnerová

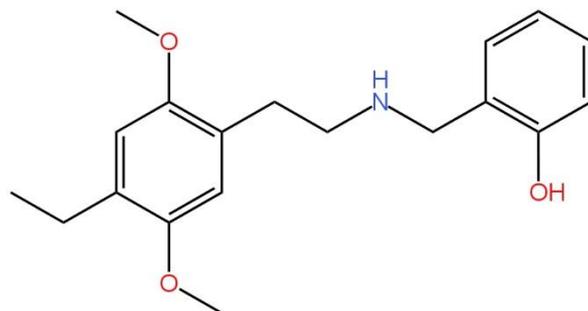
Nové psychoaktivní substance jsou látky, které napodobují účinky obecně známých drog. Mají podobnou, ale odlišnou strukturu a touto modifikací unikají před legislativní kontrolou. Následkem užití těchto látek byla zaznamenána celá řada intoxikací a úmrtí. Je nezbytné zkoumat farmakologické vlastnosti těchto sloučenin kvůli hlubšímu porozumění jejich účinků a rizik spojených s užíváním. Látka 25E-NBOH ze skupiny *N*-benzylphenethylaminů byla poprvé identifikována v Brazílii v roce 2018. Jde o stimulační látku vykazující halucinogenní efekt. Mezi nežádoucí účinky patří například serotoninový syndrom, hypertermie, ztráta vědomí a v některých případech i smrt. Cílem práce je vývoj a validace metody ke stanovení této látky v reálných vzorcích potkaních mozků. K analýze byl využit kapalinový chromatograf s hmotnostní detekcí (LC-MS) s biphenylovou kolonou. Pro přípravu vzorků byla použita rozpouštědlová extrakce s užitím ethylacetátu. Během vývoje metody byl kladen důraz na dostatečnou výtěžnost a minimalizaci matričního efektu. Vyvinutá metoda byla poté úspěšně validována. V další fázi se zaměříme na analýzu reálných vzorků. Výsledná data následně poslouží k doplnění farmakologického profilu 25E-NBOH v rámci probíhající farmakokinetické studie.

Stanovení nové psychoaktivní látky 25E-NBOH v potkaním séru metodou LC-MS

Petr Kalina

Školitel: Ing. Magdaléna Vágnerová

25E-NBOH je nová psychoaktivní látka patřící do skupiny *N*-benzylphenethylaminů. Objevovat se začala v roce 2018 během záchytů na území jižní Ameriky a v současné době je stále dobře dostupná na internetu. Způsobila několik akutních intoxikací, a proto je nutné ji prozkoumat z důvodu poznání jejího mechanismu toxicity. Má práce je zaměřena na stanovení této látky v potkaním séru pomocí kapalinové chromatografie spojené s hmotnostním spektrometrem (LC-MS). Výstupem bude postup stanovení 25E-NBOH ve vzorcích potkaního séra. Během práce v laboratoři byly optimalizovány jednotlivé parametry separační metody. Podařilo se separovat parentní látku, 7 metabolitů a 2 interní standardy na biphenylové koloně za pomoci gradientové eluce. Byla vyvinuta vhodná extrakční metoda, kde bylo cíleno na dostatečnou výtěžnost a minimální matriční efekt. Optimalizovaný postup proteinové precipitace byl úspěšně validován. Následovat bude analýza reálných vzorků potkaního séra obsahujícího 25E-NBOH. Tato data budou sloužit jako základ probíhající farmakokinetické studie.



25E-NBOH

2-(((4-ethyl-2,5-dimethoxyphenethyl)amino)methyl)phenol

Studium interakce syntetického geopolymery s Cs-137

Barbora Mikysková (B3)

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

Rostoucí množství radioaktivního odpadu vyžaduje hledání bezpečných řešení pro jeho hlubinné ukládání. Tento odpad představuje dlouhodobé riziko pro životní prostředí a lidské zdraví, proto je nutné vyvíjet efektivní způsoby jeho izolace. Jednou z možností jsou geopolymery, které jsou inovativními materiály s vysokou chemickou odolností a vhodnými mechanickými vlastnostmi, což z nich činí perspektivní bariéru pro zamezení migrace radioaktivních prvků. Tato práce se zabývá studiem interakce syntetického geopolymery s radionuklidem Cs-137 za účelem posoudit využitelnost geopolymery v hlubinných úložištích radioaktivního odpadu. Práce zkoumá termodynamickou stránku sorpce Cs-137 a hodnotí jejich schopnost zadržovat tento radionuklid v různých podmínkách simulujících prostředí úložiště. Výsledky mohou přispět k vývoji nových materiálů pro efektivní izolaci radioaktivních odpadů a k posouzení dlouhodobé stability geopolymery v kontaktním prostředí hlubinných úložišť.

Studium interakce oligo-Trögerových bází s léčivými pomocí absorpční a emisní spektroskopie

Barbora Poledníková (B3)

Školitel: Ing. Havlík Martin, Ph.D.

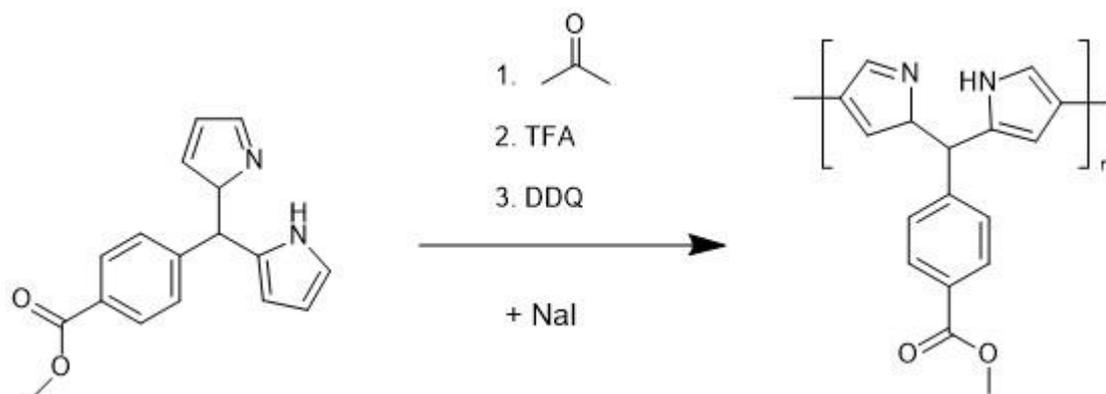
Oligo-Trögerovy báze jsou látky s jedinečnými strukturními vlastnostmi, které nabízejí široké možnosti využití. Jedním z unikátních zástupců této skupiny jsou *calix*-Trogerovy báze. Díky své struktuře obsahující kavitu mohou fungovat jako molekulové receptory schopné hostit jiné molekuly nebo ionty. V medicíně tak mohou být využity jako nosiče léčiv pro cílené doručování a snížení toxicity léčiva. Tento přístup rovněž může zlepšovat účinnost léčby zvýšením stability a bio-dostupnosti léčiva. Tato práce se zaměřuje na syntézu derivátů *calix*-Trogerovy báze a na spektroskopické studium interakcí těchto receptorů s vybranými léčivými.

Studium molekulové struktury a komplexačních schopností kalix[n]fyrinů

František Pusch (B3)

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

Práce je zaměřena na studium málo prozkoumaných kalix[n]fyrinů, které mají potenciální využití jako molekulové receptory pro konstrukci senzorů. Počet dipyrrolymethanových jednotek n v kalix[n]fyrinu řídí počet vazebných míst, velikost kavity a tím i selektivitu vůči iontům. Selektivity kalix[n]fyrinů lze identifikovat již při samotné přípravě, kdy přítomnost potenciálního analytu v reakční směsi zvýší výtěžek komplementárního receptoru (tzv. templátový efekt). Z tohoto důvodu byl sledován vliv různých kationtů, aniontů a koncentrace výchozí látky na výtěžky příprav. Ze série pokusů byla porovnána selektivita kalix[n]fyrinů vůči různým iontům. Pro stanovení molekulové struktury a studium vlastností kalix[n]fyrinů byly využity zejména metody NMR, MS a LC-UV. Na základě poznatků z experimentů bude poté navržen způsob možného využití.



Nová generace polymethiniových solí a jejich využití v selektivním barvení buněk

Kryštof Tupý (B3)

Školitel: Ing. Havlík Martin Ph.D.

Pentamethiniové soli (PMS) jsou organické sloučeniny patřící do skupiny cyaninových barviv, která se vyznačují unikátními spektrálními vlastnostmi a biologickou aktivitou. PMS často nacházejí uplatnění jako intracelulární fluorescenční sondy nebo jako barviva v biologii a medicíně pro zobrazování tkání a sledování biologických procesů. Spektrální vlastnosti a výrazná protinádorová aktivita je také předurčuje k využití v oblasti kombinované protinádorové terapie. Tato práce se věnuje přípravě a studiu nového typu bis-pentamethiniových solí.

Optimalizace podmínek pro chirální separaci modelového léčiva kapilární elektroforézou

Martin Vančura (B3)

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

Současný trend ve farmacii směřuje k využívání jednotlivých enantiomeru chirálních léčiv. Mnohá chirální léčiva totiž vykazují rozdílnou biologickou aktivitu svých enantiomerů. Tento rozdíl může mít klíčový dopad na účinnost léčby, přičemž použití čistého enantiomeru často znamená nejen zvýšení farmakologického účinku, ale i výrazné snížení rizika nežádoucích vedlejších účinků. Tento fakt podtrhuje potřebu spolehlivých analytických metod pro enantioseparaci a analýzu těchto léčiv. Jednou z vhodných metod je kapilární elektroforéza, která umožňuje rychlou separaci enantiomerů za současně velmi dobrého rozlišení. V rámci této práce byly optimalizovány podmínky pro chirální separaci mandlové kyseliny. Tato sloučenina má velký význam v lékařském a chemickém odvětví. (*R*)-mandlová kyselina má klíčovou roli při výrobě semi-syntetických cefalosporinů a penicilinů. Separace byla prováděna pomocí komerčně dostupného γ -cyclodextrinu jako chirálního selektoru. Podmínky pro chirální separaci byly optimalizovány změnou vloženého napětí a složením základního elektrolytu (různé hodnoty pH, koncentrace pufru a množství přídavku organického modifikátoru, v tomto případě methanolu).

Ústav fyzikální chemie (403)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

doc. Ing. Ondřej Vopička, Ph.D.

SEZNAM SEKČÍ

3. [Fyzikální chemie I](#)
4. [Fyzikální chemie II](#)
5. [Fyzikální chemie III](#)
6. [Fyzikální chemie IV](#)
7. [Fyzikální chemie V](#)

SEZNAM SOUTĚŽÍCÍCH

1. **Eliška Arltová**, B3, Ing. Vojtěch Štejska, Ph.D., *Charakterizace alternativních paliv-poly(oxymethylen)dialkyletherů*
2. Bc. **Vladislav Aulich**, M1, doc. Ing. Ctirad Červinka, Ph.D., *Insights on the compatibility of selected active pharmaceutical ingredients with polylactic acid from molecular-dynamics simulations*
3. **Matěj Červenka**, B2, prof. Mgr. Pavel Jungwirth, CSc., DSc., *Revolutionizing Cation- π Modeling in MD: A Step Toward Precision*
4. **Michal Čotek**, B3, Ing. Daniel Ondo, Ph.D., *Popis termodynamických vlastností vodných roztoků thiokyanátu guanidného současnými silovými poli*
5. **Jakub Dubský**, B3, prof. RNDr. Bc. Petr Slavíček, Ph.D., *ICD in liquid water competes with proton transfer and non-adiabatic relaxation*
6. Bc. **Karolína Fárníková**, M2, Mgr. Ing. Eva Krupičková Pluhařová, Ph.D., *Molecular simulations of reaction intermediates of CO₂ reduction aided by cobaltoporphyrin catalyst*
7. **Jakub Ferenčík**, B3, prof. RNDr. Bc. Petr Slavíček, Ph.D., *Non-Classical Structures of Polyprotic Acids with PIMD: The Case of Maleate(-1)*
8. **David Gabaj**, B2, Mgr. Ludmila Šimková Ph. D., *Nejen elektrochemická studie DPIBF, nadějný kandidát pro zvýšení účinnosti solárních článků*
9. **Jakub Havránek**, B3, Ing. Marcela Dendisová, Ph.D., *Studium adsorpčních mechanismů thiolů na plasmonické senzory*
10. Bc. **Aneta Hrádková**, M1, doc. RNDr. Michal Kolář, Ph.D., *Strukturní variabilita peptidových deformyláz*
11. **Jiří Hrubant**, B2, doc. Ing. Ctirad Červinka Ph.D., *Sigma-díry a jejich nekovalentní interakce jako kohezní motiv pro molekulární krystaly*

12. **Zuzana Hybnerová**, B3, prof. Mgr. Pavel Jungwirth, CSc., DSc., *Diving into the Deep Blues and Dark Greens of the Aromatic Radical Anion Ocean*
13. **Jakub Ježek**, B2, prof. Dr. Ing. David Sedmidubský, *Materiály s ionty vzácných zemin: Elektronová struktura a termodynamická analýza*
14. Bc. **Marek Klíma**, M1, prof. RNDr. Bc. Petr Slaviček, Ph.D., *CO release from flavonol: Ab initio Model*
15. **Jan Koreš**, B3, prof. RNDr. Bc. Petr Slaviček, Ph.D., *Molecular dynamics in a diabatic representation: charge transfer with constrained DFT and Landau-Zener method*
16. **Tomáš Kuzma**, B3, doc. RNDr. Michal Kolář Ph.D., *Vývoj simulační analýzy release faktorů v rámci mechanismu translace proteinů*
17. **Rudolf Kvasňovský**, B3, doc. RNDr. Michal Kolář, Ph.D., *Stavba simulačního modelu mitochondriálního ribosomu*
18. Bc. **Anna Lamancová**, M2, RNDr. Dana Nachtigallová, Ph.D., *Predicting Rotational Dynamics in Molecular Rotors: An Ab Initio Study of Substituent Influence on Thermal Isomerization*
19. Bc. **Martin Mašek**, M2, doc. RNDr. Michal Kolář, Ph.D., *Vliv hořečnatých iontů na strukturu a dynamiku protoribozomu*
20. **Anna Mokrý**, B3, prof. RNDr. Bc. Petr Slaviček, Ph.D., *Non-adiabatic Simulations of Benzene and its Isomers*
21. **Daniel Myšák**, B3, Mgr. Ing. Eva Krupičková-Pluhařová, Ph.D., *Computational modeling of Glutamate dehydrogenase in crowded environment with focus on active site.*
22. **Markéta Němcová**, B3, Ing. Ivan Kopal, *Studium povrchem zesíleného Ramanova rozptylu berberinu v systémech s proměnlivou koncentrací nanočástic*
23. Bc. **Elia Pavliš**, M2, Ing. Martin Klajmon, Ph.D., *Kvantově mechanická parametrizace stavových rovnic typu PC-SAFT*
24. Bc. **Lukáš Peterka**, M2, prof. RNDr. Bc. Petr Slaviček, Ph.D., *Investigating Photoinduced Electron Transfer from Bilirubin Model Compound to Oxygen*
25. Bc. **Tereza Šimsová**, M2, prof. Ing. Michal Fulem, Ph.D., *Fyzikální stabilita amorfních lékových formulací: Vliv termodynamických, kinetických a relaxačních faktorů*
26. **Jiří Šnajdr**, B3, Ing. Vojtěch Štejf, Ph.D., *Vývoj protokolů pro state-of-the-art termodynamický popis aktivních farmaceutických složek*
27. Bc. **Veronika Šritterová**, M2, doc. Ing. Ctirad Červinka, Ph.D., *Implementation of Polarizable Simulations for Phase Interfaces in Porous Liquids*
28. **Marie Štrumfová**, B3, Ing. Alena Randová, Ph.D., *Povrchové napětí jako funkce složení pro binární kapalný systém oktan + hexan-1-ol při 25 °C*
29. **Lukáš Tabery**, B1, prof. RNDr. Bc. Petr Slaviček, Ph.D., *Possible mechanism for singlet oxygen quenching: Ab Initio Study*
30. **Vít Turčín**, B2, prof. Mgr. Pavel Jungwirth, CSc., DSc., *Ab initio molecular dynamics of ammonia clusters with an excess electron*
31. **Adéla Ulrichová**, B3, prof. Ing. Karel Friess, Ph.D., *Vývoj a testování nových typů kompozitních separačních membrán na bázi polymerů a MOF nanočástic pro cílenou separaci plynů*

32. Bc. **Katarína Vosovičová**, M1, prof. RNDr. Bc. Petr Slavíček, Ph.D., *Towards Photostability of Astrochemical Glycine: Impact of a Solvent*
33. Bc. **Jakub Žváček**, M2, doc. RNDr. Michal Kolář, Ph.D., *Atomistic simulations of a transfer RNA analogue*

SPONZOŘI ÚSTAVU FYZIKÁLNÍ CHEMIE



ZENTIVA



vesmír

Fyzikální chemie I

MÍSTO: A125

KOMISE:

Předseda komise: prof. Ing. Květoslav Růžička, CSc.

Členové komise:

- doc. Ing. Pavel Izák, Ph.D., DSc.
- Ing. Marcela Tkadlecová, CSc.
- Ing. Tereza-Markéta Durďáková, Ph.D. (Diversey - A Solenis Comany)
- Ing. Martin Růžička (ORLEN Unipetrol RPA)

SEZNAM SOUTĚŽÍCÍCH

- **Eliška Arltová**, B3, Ing. Vojtěch Štejfa, Ph.D., *Charakterizace alternativních paliv-poly(oxymethylen)dialkyletherů*
- **Jakub Havránek**, B3, Ing. Marcela Dendisová, Ph.D., *Studium adsorpčních mechanismů thiolů na plasmonické senzory*
- **Markéta Němcová**, B3, Ing. Ivan Kopal, *Studium povrchem zesíleného Ramanova rozptylu berberinu v systémech s proměnlivou koncentrací nanočástic*
- **Jiří Šnajdr**, B3, Ing. Vojtěch Štejfa, Ph.D., *Vývoj protokolů pro state-of-the-art termodynamický popis aktivních farmaceutických složek*
- **Marie Štrumfová**, B3, Ing. Alena Randová, Ph.D., *Povrchové napětí jako funkce složení pro binární kapalný systém oktan + hexan-1-ol při 25 °C*
- **Adéla Ulrichová**, B3, prof. Ing. Karel Friess, Ph.D., *Vývoj a testování nových typů kompozitních separačních membrán na bázi polymerů a MOF nanočástic pro cílenou separaci plynů*

Charakterizace alternativních paliv – poly(oxymethylen)dialkyletherů

Eliška Arltová (B3)

Školitel: Ing. Vojtěch Štejfa, Ph.D.

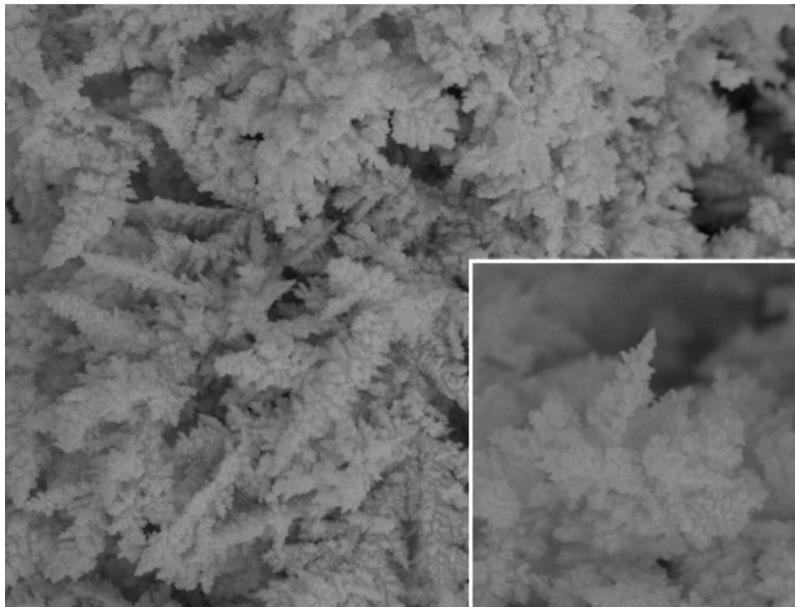
Poly(oxymethylen)dialkylethery, zkráceně OME, jsou homologickou řadou sloučenin se strukturou $\text{CH}_3(\text{OCH}_2)_n\text{OCH}_3$. OME jsou potenciálními aditivami motorové nafty s neomezenou vzájemnou mísitelností. Velkou výhodou je možnost jejich ekologické výroby z obnovitelných zdrojů, která může vést až k nahrazení nafty plně syntetickými palivy. I malé množství OME přidané do nafty navíc významně snižuje tvorbu sazí a NO_x . Práce je zaměřena na zkoumání termodynamických vlastností látek OME_2 až OME_5 potřebných pro jejich širší využití v dopravě. Tepelné kapacity byly měřeny kalorimetrem Tianova-Calvetova typu. Z experimentálních dat byla vyvinuta generální rovnice pro danou homologickou řadu, podle níž lze predikovat teplotní závislost tepelné kapacity pro další členy řady včetně možnosti extrapolace tepelných kapacit mimo původní teplotní rozsah. Při měření tlaků nasycených par byly použity dvě statické aparatury v závislosti na těkavosti každé z látek. Experimentální data byla zpracována metodou simultánní korelace tlaků nasycených par a termálních vlastností a výsledné rovnice byly poté porovnány s různými literárními zdroji. Tato práce významně zpřesňuje termodynamickou charakterizaci OME a může být prekurzorem k podrobnějšímu výzkumu jejich aplikace a zvýšení jejich průmyslového potenciálu.

Studium adsorpčních mechanismů thiolů na plasmonické senzory

Jakub Havránek, B3

Školitel: Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.

Spektroskopie povrchem zesíleného Ramanova rozptylu (SERS – z angl. Surface-Enhanced Raman Scattering) představuje účinnou techniku pro studium molekulárních interakcí na kovových površích, kdy dochází k výraznému zesílení signálu Ramanova rozptylu nejen díky rezonanci povrchových plazmonů na kovových nanostrukturách, ale i přenosu náboje mezi povrchem a molekulou. V tomto výzkumu se zaměřuji na detailní studium adsorpčních mechanismů thiolů, jako jsou 9-merkapt-1-nonanol, 6-merkapt-1-hexanol, *p*-xylen- α -thiol a kyselina 11-merkapt-undekanová, na povrch zlatých substrátů. Thioly vytvářejí samoorganizované monovrstvy vázané kovalentně k povrchu, které umožňují specifickou imobilizaci molekul. Cílem práce je pomocí SERS spektroskopie detailně popsat chování těchto molekul při adsorpci na plasmonické senzory a rozklíčovat interakci thiolů s povrchem substrátu. Důraz je kladen na pochopení chování a porovnání povrchových komplexů, které utváří výše zmíněné látky se zlatým povrchem, což je klíčové pro aplikace v oblasti bio- a analytických senzorů. Na základě spektrální odezvy při různých vlnových délkách, lze odhadnout chování thiolů při jejich adsorpci na povrch zlatého senzoru.



Studium povrchem zesíleného Ramanova rozptylu berberinu v systémech s proměnlivou koncentrací nanočástic

Markéta Němcová (B3)

Školitel: Ing. Ivan Kopal

Nanočástice se v posledních desetiletích staly velice hojně využívaným nástrojem rozličných aplikací nejen ve fyzikální chemii, ale například i v oblasti analytické nebo medicínální chemie. Na druhou stranu, vzhledem ke své malé velikosti jsou schopné snadno pronikat do živých organismů a nepříznivě na ně působit. Ruku v ruce s jejich čím dál častějším výskytem vzrůstá potřeba detekovat tyto částice v životním prostředí, a to v co nejnižší možné koncentraci. V této práci byla ke stanovení nízkých koncentrací a fyzikálně-chemických vlastností nanočástic využita metoda povrchem zesíleného Ramanova rozptylu (Surface-Enhanced Raman Scattering – SERS). Tato technika se standardně využívá pro zesílení signálu organických analytů pomocí jejich depozice do blízkosti plasmonických kovů, nejčastěji zlata, stříbra, nebo mědi. V této práci byl aplikován opačný přístup. Roztoku organické sloučeniny s vhodnými optickými vlastnostmi a o známé koncentraci je využito k měření SERS spekter o různé koncentraci nanočástic. Pro tuto studii byl jakožto modelový rozptylovač zvolen přírodní isochinolinový alkaloid berberin, pomocí kterého byly detekovány stříbrné nanočástice připravené redukcí pomocí hydroxylaminu.

Vývoj protokolů pro state-of-the-art termodynamický popis aktivních farmaceutických složek

Jiří Šnajdr (B3)

Školitel: Ing. Vojtěch Štejfa, Ph.D.

Při posuzování vlastností krystalických látek (stabilita polymorfů, teploty a entalpie fázových přechodů atp.) mnohdy narazíme na nesoulad mezi vypočtenými a experimentálními hodnotami, případně i mezi hodnotami změřenými na různých pracovištích. Který výsledek je přesnější? Je chyba ve výpočtu? Nebo v uspořádání experimentu? Tímto problémem se zabývá akce COST „Best-CSP“, jíž je tato práce součástí. Cílem akce je na několika modelových látkách vykazujících polymorfismus vyzkoušet limity jednotlivých metod určování vzájemné stability polymorfů a získat co nejdůvěryhodnější referenční data pro teoretické výpočty ověřená porovnáním napříč několika zapojenými pracovišti. Práce samotná je zaměřena experimentálně, s důrazem na metodu diferenční skenovací kalorimetrie (DSC). V menší míře byly zapojeny také plynová chromatografie, statická měření tlaků nasycených par, či výpočty termodynamických vlastností ideálního plynu. Zkoumanými látkami jsou pikolinamid, sulfamerazin (zatím pouze okrajově; při tání se rozkládá), (*R*)-fenylpiracetam a 4'-hydroxyacetofenon. Předmětem zkoumání jsou jejich teploty a entalpie fázových přechodů, tepelné kapacity a kde to technické možnosti dovolí, tak také tlaky nasycených par.

Povrchové napětí jako funkce složení pro binární kapalný systém oktan + hexan-1-ol při 25 °C

Marie Štrumfová (B3)

Školitel: Ing. Alena Randová, Ph.D.

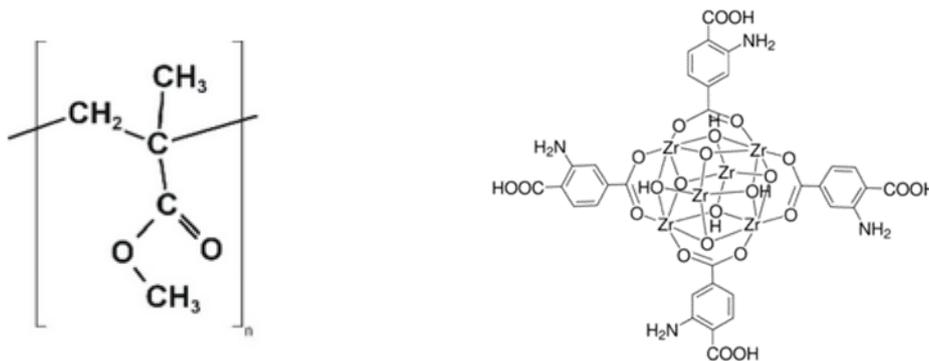
Povrchové napětí představuje důležitou vlastnost pro charakterizaci intermolekulárních interakcí v systému kapalina-plyn (vzduch), čehož se využívá hlavně v chemickém inženýrství a farmacii. Tato práce se zabývá závislostí povrchového napětí na složení směsi oktan + hexan-1-ol. Měření byla provedena Du Noüyho metodou při 25 °C. Experimentálně získaná data byla analyzována pomocí Redlich-Kisterovy rovnice, která umožňuje popsat odklon od ideálního povrchového napětí směsí. Výsledné dodatkové povrchové napětí vykazuje v celém rozsahu složení záporné hodnoty.

Vývoj a testování nových typů kompozitních separačních membrán na bázi polymerů a MOF nanočástic pro cílenou separaci plynů

Adéla Ulrichová (B3)

Školitel: prof. Ing. Karel Friess, Ph.D.

Kompozitní membrány na bázi polymerů a nanoaditiv, tzv. mixed matrix membranes (MMM), vykazují výrazný potenciál pro selektivní ovlivnění transportu, respektive propustnosti jednotlivých složek separované plyné směsí, čímž se dosáhne lepšího separačního výkonu (selektivity) těchto materiálů. Nicméně s přípravou MMM materiálů jsou často spojené komplikace, jako například sedimentace nebo agregace použitého aditiva, fázová separace mezi aditivem a polymerem, mechanická nestabilita atd., které vedou k nereprodukovatelným výsledkům a zhoršení separačních vlastností v porovnání s neplněnými polymery. Vývoj nových MMM materiálů s kontrolovanou depozicí nanočástic je proto důležitým krokem v materiálovém výzkumu zaměřeném na vysoce selektivní membránové materiály. Tato práce se zabývá přípravou MMM materiálů na bázi polymethylmethakrylátu (PMMA) a MOF (tzv. metal-organic frameworks) nanočástic UiO-66-NH₂ (Obr. 1). V první fázi budou studovány vlastnosti polymerních membrán (propustnost pro H₂, CO₂, N₂, O₂ a CH₄ při 25°C) bez aditiva a následně se zabudovaným aditivem (1-10 hm. %), které bude v dané membráně náhodně a kontrolovaně dispergováno.



Strukturální vzorce PMMA (vlevo) a UiO-66-NH₂ (vpravo).

Fyzikální chemie II

MÍSTO: B08

KOMISE:

Předseda komise: prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka

Členové komise:

- Ing. Daniel Bím, Ph.D.
- prof. Mgr. Alexandr Malijevský, Ph.D., DSc.

SEZNAM SOUTĚŽÍCÍCH

- **Matěj Červenka**, B2, prof. Mgr. Pavel Jungwirth, CSc., DSc., *Revolutionizing Cation- π Modeling in MD: A Step Toward Precision*
- **Michal Čotek**, B3, Ing. Daniel Ondo, Ph.D., *Popis termodynamických vlastností vodných roztoků thiokyanátu guanidného současnými silovými poli*
- **David Gabaj**, B2, Mgr. Ludmila Šimková Ph. D., *Nejen elektrochemická studie DPIBF, nadějného kandidáta pro zvýšení účinnosti solárních článků*
- **Jiří Hrubant**, B2, doc. Ing. Ctirad Červinka Ph.D., *Sigma-díry a jejich nekovalentní interakce jako kohezní motiv pro molekulární krystaly*
- **Jakub Ježek**, B2, prof. Dr. Ing. David Sedmidubský, *Materiály s ionty vzácných zemin: Elektronová struktura a termodynamická analýza*
- **Lukáš Tabery**, B1, prof. RNDr. Bc. Petr Slaviček, Ph.D., *Possible mechanism for singlet oxygen quenching: Ab Initio Study*
- **Vít Turčín**, B2, prof. Mgr. Pavel Jungwirth, CSc., DSc., *Ab initio molecular dynamics of ammonia clusters with an excess electron*

Improving Cation- π Modeling in MD: A Step Toward Higher Accuracy

Matěj Červenka (B2)

Školitel: Prof. Mgr. Pavel Jungwirth Csc., Dsc.

Cation- π interactions are ubiquitous in biological systems, playing essential roles in membrane protein function, receptor activity, protein folding, and various other biochemical processes. However, accurately capturing these interactions in molecular dynamics (MD) simulations presents a significant challenge, as accurate methods incur substantial computational costs. In this study, we implement a physically justified Electronic Continuum Correction (ECC) that scales the charge of ion species by a factor of 0.75, enabling an effective representation of electronic polarization without added computational overhead. Built on the Charmm36 force field, our Prosecco75 model incorporates ECC to account for polarizability effects, which, although not specifically designed for cation- π interactions, leads to an improved accuracy. This rather surprising success highlights the potential universality of the ECC approach for enhancing various interaction types in biomolecular simulations.

Popis termodynamických vlastností vodných roztoků thiokyanátu guanidného současnými silovými poli

Michal Čotek (B3)

Školitel: Ing. Daniel Ondo, Ph.D.

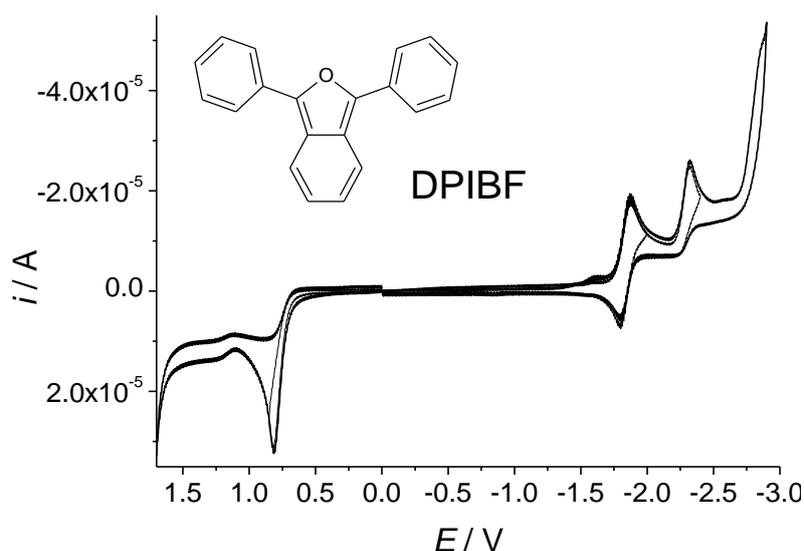
Thiokyanát guanidný (GdmSCN) je jeden z nejsilnějších denaturantů proteinů. Správná molekulární interpretace účinku GdmSCN vyžaduje použití simulačních modelů, které kvantitativně popisují termodynamické chování vodných roztoků GdmSCN. Cílem práce je kriticky zhodnotit, tedy porovnat s experimentálními daty v širokém rozsahu koncentrací, kvalitu termodynamického popisu vodných roztoků GdmSCN současnými silovými poli, která jsou používána v molekulárně dynamických (MD) simulacích. Budou porovnány nejen makroskopické aktivní a volumetrické vlastnosti roztoků, ale v rámci Kirkwoodovy-Buffovy (KB) teorie také KB integrály, které mají přímý vztah k mikroskopické struktuře roztoku získané z počítačových simulací. Výsledky práce poslouží jako základ pro vývoj zpřesněného modelu GdmSCN, který umožní kvantitativní studium mechanismu denaturace biomolekul.

Nejen elektrochemická studie DPIBF, nadějného kandidáta pro zvýšení účinnosti solárních článků

David Gabaj (B2)

Školitel: Mgr. Ludmila Šimková, Ph.D.

1,3-Difenylišobenzofurany (DPIBFs) jsou reaktivní dieny hojně používané u Dielsových-Alderových reakcí nebo jako standardní reagenty pro stanovení singletového kyslíku. Molekuly DPIBF však mohou sloužit i jako chromofory. Organický fotovoltaický článek je založený na absorpci světla chromoforem. Po absorpci fotonu dojde k excitaci singletového elektronu, který svojí deexcitací do tripletového stavu část energie ztratí. Tuto disipovanou energii lze využít pomocí procesu singletového štěpení, vygenerovat 2 elektrony místo jednoho, a tak zvýšit efektivitu přeměny elektromagnetického záření v elektrický proud. Požadavky singletového štěpení splňuje molekula DPIBF. Pro její využití v solárním článku jsou klíčové její optické a redoxní vlastnosti. Zaměřili jsme se proto na detailní vyhodnocení vlastností DPIBF a srovnání s jeho dimerními analogy. Vedle klasických elektrochemických (dc-polarografie, CV a RDE) a optických (UV-Vis-NIR) metod byla použita i jejich kombinace. Mechanismus přenosu prvního elektronu byl podpořen *in-situ* EPR spektroskopií. V neposlední řadě byla studována stabilita zkoumaných molekul (pomocí UV-Vis, NMR a MS).

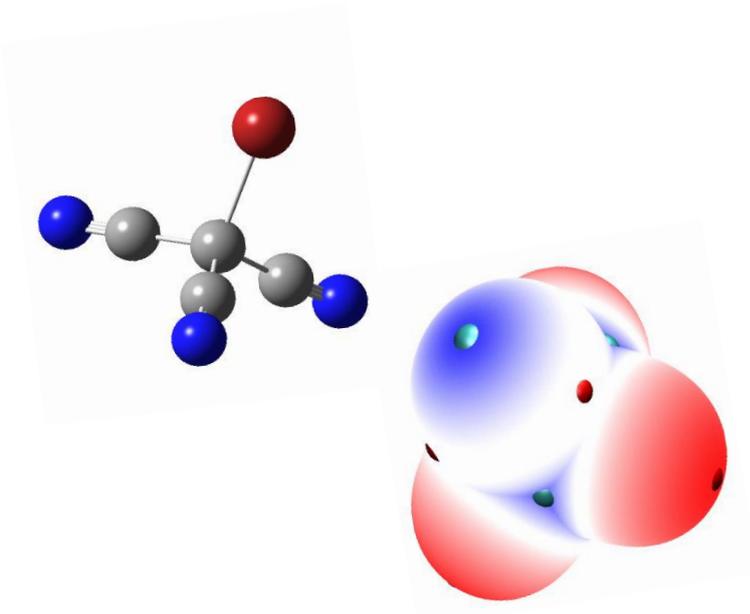


Sigma-díry a jejich nekovalentní interakce jako kohezní motiv pro molekulární krystaly

Jiří Hrubant (B2)

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

Nevazebné interakce hrají velkou roli v molekulárních krystalech a ovlivňují přitom jejich fyzikálně-chemické vlastnosti. K nevazebným interakcím patří i nepříliš známé interakce sigma-děř, jejichž výzkum je obsahem této práce. Vliv sigma-děř na kohezi molekulárních krystalů může být zkoumán chemickými výpočetními metodami na vybraných organických molekulách, které obsahují skupiny odčerpávající elektrony schopné v krystalové mřížce významně interagovat se sigma-dírou vhodného nekovového prvku. Tato interakce je v této práci zkoumána nejprve z pohledu map elektrostatického potenciálu jednotlivých molekul, následně z pohledu mřížkových energií krystalů, a nakonec posunů jejich významných vibračních frekvencí v závislosti na přítomnosti těchto interakcí. Ze struktur krystalů vybraných molekul mohou navíc být separovány dimery podezřelé z tvorby těchto typů interakcí a pomocí ab initio metod vyčísleny jejich interakční energie a její mechanistické komponenty. Síla těchto interakcí je zkoumána a diskutována i s ohledem na substituce atomů v krystalické mřížce svými analogy z téže skupiny periodické tabulky.

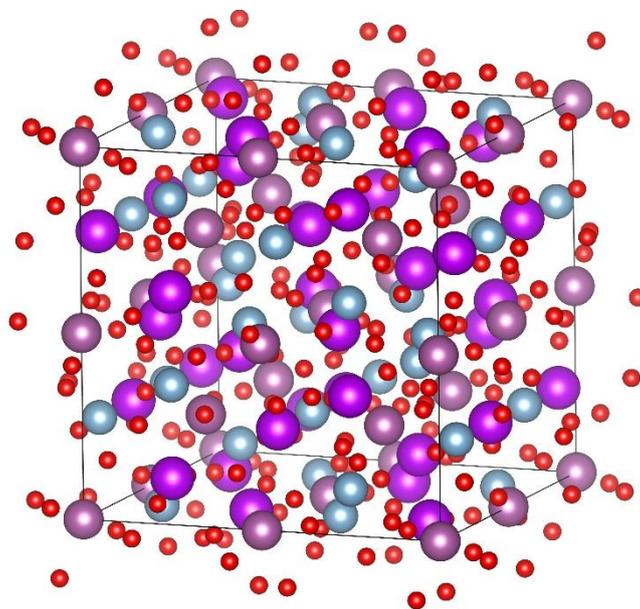


Materiály s ionty vzácných zemin: Elektronová struktura a termodynamická analýza

Jakub Ježek (B2)

Školitel: prof. Dr. Ing. David Sedmidubský

Jak zlepšit vlastnosti scintilátorů, materiálů svítících při expozici ionizujícím zářením? Zkoumali jsme elektronovou strukturu a termodynamické chování gadolinito-skandito-hlinitých granátů, užitečných pro jejich scintilační vlastnosti. Výpočty s využitím funkcionálu elektronové hustoty (DFT-GGA) byly provedeny pomocí software MedeA a programu VASP. Nejprve jsme pro dané složení provedli optimalizaci struktury a následně aplikovali funkcionál GGA+U na stavy Gd-4f, abychom popsali rozštěpení těchto valenčních pásů. Zaměřili jsme se na chování iontů skandia, které mohou vstupovat do oktaedrických i dodekaedrických poloh granátu. Právě obsazení dodekaedrických pozic způsobuje vznik stavů Sc-3d uvnitř zakázaného pásu, které působí jako elektronové pasti a zhoršují scintilační vlastnosti. Pro potlačení Sc v těchto polohách jsme zkoumali termodynamické chování tuhého roztoku $(\text{Gd,Sc})_3(\text{Al,Sc})_2\text{Al}_3\text{O}_{12}$ a jeho rovnovah s dalšími fázemi, využívajíc software FactSage pro návrh tentativního fázového diagramu systému $\text{Gd}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-Sc}_2\text{O}_3$ s akcentem na oblast stability granátu a pole jeho primární krystalizace z taveniny. Díky této práci přispíváme ke zdokonalování scintilátorů, které mohou být stabilnější, výkonnější a uplatní se při detekci záření v medicíně, průmyslu i ve výzkumu.



Possible mechanism for singlet oxygen quenching: Ab Initio Study

Lukáš Tabery (B1)

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

Singlet oxygen, a reactive oxygen species (ROS), is frequently generated in photochemical processes. Its quenching mechanism was for a long time subject of many disputes. Only recently has the discussion tended to consider solvent-induced intersystem crossing as the main mechanism, explaining also the pronounced isotopic effect. However, alternative pathways may still exist. This study proposes a novel mechanism for singlet oxygen quenching in water, exploring the feasibility of electron transfer from the hydroxide anion (OH^-) as a relevant route. In contrast to the commonly accepted mechanism, the proposed pathway involves electron transfer, forming intermediate complexes, $[\text{}^1\text{O}_2\cdots\text{OH}^-]$ and $[\text{O}_2^-\cdots\text{OH}]$. Using computational chemistry methods, this work aims to assess the energy profiles, solvation effects, and transition dynamics of these intermediates in order to evaluate the viability of this mechanism.

Ab initio molecular dynamics of ammonia clusters with an excess electron

Vít Turčín (B2)

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

In this study, ab initio molecular dynamics simulations were carried out on negatively charged clusters composed of 2–48 ammonia molecules to investigate how cluster size impacts the electronic stability of an excess electron. Our findings reveal that electronic stability at finite temperatures enhances with an increase in cluster size. Notably, clusters with as few as 5–7 ammonia molecules can stably bind an excess electron, achieving a vertical binding energy that approaches nearly half the bulk value observed in the largest simulated clusters. Our results align well with previous research, allowing us to explore binding characteristics through the electron's radius of gyration and shape anisotropy. Additionally, we offer a qualitative interpretation of the binding mechanism using a particle-in-a-spherical-well model, shedding light on how electronic stability emerges in these finite-sized ammonia clusters.

Fyzikální chemie III

MÍSTO: B24

KOMISE:

Předseda komise: doc. Ing. Ctirad Červinka, Ph.D.

Členové komise:

- Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.
- Ing. Prokop Hapala, Ph.D.
- doc. RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.

SEZNAM SOUTĚŽÍCÍCH

- **Jakub Dubský**, B3, prof. RNDr. Bc. Petr Slaviček, Ph.D., *ICD in liquid water competes with proton transfer and non-adiabatic relaxation*
- **Jakub Ferenčík**, B3, prof. RNDr. Bc. Petr Slaviček, Ph.D., *Non-Classical Structures of Polyprotic Acids with PIMD: The Case of Maleate(-1)*
- **Zuzana Hybnerová**, B3, prof. Mgr. Pavel Jungwirth, CSc., DSc., *Diving into the Deep Blues and Dark Greens of the Aromatic Radical Anion Ocean*
- **Jan Koreš**, B3, prof. RNDr. Bc. Petr Slaviček, Ph.D., *Molecular dynamics in a diabatic representation: charge transfer with constrained DFT and Landau-Zener method*
- **Tomáš Kuzma**, B3, doc. RNDr. Michal Kolář Ph.D., *Vývoj simulační analýzy release faktorů v rámci mechanismu translace proteinů*
- **Rudolf Kvasňovský**, B3, doc. RNDr. Michal Kolář, Ph.D., *Stavba simulačního modelu mitochondriálního ribosomu*
- **Anna Mokrá**, B3, prof. RNDr. Bc. Petr Slaviček, Ph.D., *Non-adiabatic Simulations of Benzene and its Isomers*
- **Daniel Myšák**, B3, Mgr. Ing. Eva Krupičková-Pluhařová, Ph.D., *Computational modeling of Glutamate dehydrogenase in crowded environment with focus on active site.*

ICD in liquid water competes with proton transfer and non-adiabatic relaxation

Jakub Dubský (B3)

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

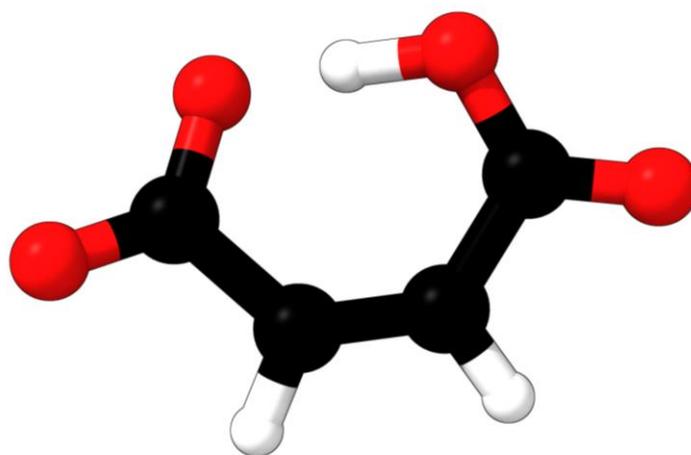
Intermolecular Coulombic Decay (ICD) is a non-local relaxation process that occurs in atoms or molecules following inner-valence or core ionization. When an electron vacancy forms, an electron from a higher orbital within the same atom or molecule can fill the vacancy, releasing excess energy that can then eject an electron from a neighboring species. Various studies suggest that this ejected electron could potentially damage biomolecules. The present work investigates this phenomenon in large water clusters, where experimental data revealed that the efficiency of this relaxation pathway is well below unity. To model this efficiency, I have developed a multi-scale stochastic model that simulates the kinetics of ICD electrons and compares the efficiency of H₂O and D₂O. The model is based on a combination of QM:QM *ab initio* technique, molecular dynamics simulations and Monte-Carlo processing. The model aligns well with experimental results and indicates a competition of ICD between proton transfer, and non-adiabatic interactions. These findings contribute new insights into ICD as a relaxation pathway within radiation chemistry and related fields, where ICD processes remain incompletely understood.

Non-Classical Structures of Polyprotic Acids with PIMD: The Case of Maleate(-1)

Jakub Ferenčík (B3)

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

In chemistry, the term “structure” is typically associated with the minimum on potential energy surface. However, the vibrationally delocalized structure is distinct from the above-mentioned classical one. The atomic arrangement in polyprotic acids can facilitate internal proton transfer where the quantum behavior of the proton leads to significant non-classical effects on molecular structure. The objective of this work is to investigate the classical and quantum perspectives of acidic structures, using maleate(1-) as a model. To capture non-classical behavior, we use path integral molecular dynamics with a generalized Langevin equation. By examining the proton transfer between the two carboxyl groups, we determine the most probable hydrogen atom position and effectively characterize the anion structure. To assess the impact of the solvent, simulations are being performed for both the gas phase and an aqueous solution, with the latter modeled via the continuum solvation model. This research provides valuable insight into the intricate proton transfer mechanisms in polyprotic acids, contributing to a deeper understanding of the nuclear quantum effects on anion stability. Furthermore, these findings will assist in the design and interpretation photoelectron experiments.



Molecular structure of maleate(1-)

Diving into the Deep Blues and Dark Greens of the Aromatic Radical Anion Ocean

Zuzana Hybnerová (B3)

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

Radical anions of aromatic hydrocarbons serve as key intermediates in wide range of chemical reactions. They are typically formed in an electron transfer process from an alkali metal (assumed to take place via a solvated electron intermediate) into an unoccupied π^* valence orbital. Gaining insight into the electronic structure of these specimens is crucial to understand and optimize reaction conditions in Birch-like reductions. Moreover, their characteristic absorption in the UV-VIS makes them interesting for photo-induced reactions. Using electronic structure calculations (via TD-DFT and CAS-SCF excited state dynamics) and experimental measurements of their UV-VIS spectra, we aim to achieve a comprehensive and detailed understanding of electronic structures of naphthalene and benzophenone both in their neutral and radical anion states. While optimal theoretical framework is yet to be identified, experimental findings and ongoing progress in calculations is presented.

Molecular dynamics in a diabatic representation: charge transfer with constrained DFT and Landau–Zener method

Jan Koreš (B3)

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

Constrained density functional theory (CDFT) is a relatively novel tool that allows us to set constraints on the electron density of a group of atoms regarding its charge or spin. The method seems promising for modelling charge transfer processes. This study aims to apply this approach to a Na–CO₂ system, where the electron is transferred from the sodium atom, reducing the carbon dioxide molecule. The main goal of the presented work was the development of a tool for studying charge transfer using molecular dynamics simulations in a diabatic representation. Two distinct diabatic states are constructed using CDFT charge constraints. Since the simulations are treated within the Born–Oppenheimer approximation, we can construct potential energy surfaces of the two diabatic states and use them for molecular dynamics. The nonadiabatic transitions between the states are modelled by using the Landau–Zener formula. The method aims to help us understand charge transfer processes during molecular collisions, such as the above-mentioned collisions of Na and CO₂.

Vývoj simulační analýzy release faktorů v rámci mechanismu translace proteinů

Tomáš Kuzma (B3)

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

Tato práce bude zaměřená na téma release faktorů v kontextu výpočetní chemie. Tyto makromolekuly jsou zkoumány *in silico* v rámci simulačního modelu, na kterém poté pomocí ekvilibračních kroků mohou probíhat simulace. V úvodu práce bude popsáno, co jsou release faktory a jakých procesů se v rámci organismu účastní. Bude rozebrána i jejich struktura s popisem částí této makromolekuly a význam toho, proč release faktory zkoumat. Další částí této práce bude popis stavby simulačního modelu, přičemž budou rozebrány kroky, které byly potřeba udělat pro jeho dokončení a popíšeme jejich význam. Dále se práce zaměřuje na konkrétní kroky uskutečněné po tvorbě simulačního modelu, potřebné k dokončení simulačního procesu. Budou rozebrány uskutečněné metody analýzy dané simulace. Závěrem práce bude nastíněn další postup práce, co bude předmětem dalšího zkoumání, a jaký je cíl dané práce. Výstupem z této práce by mělo být pochopení problematiky funkce release faktorů, představa o tvorbě daného simulačního modelu a princip jeho analýzy.

Stavba simulačního modelu mitochondriálního ribozomu

Rudolf Kvasňovský (B3)

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

Tato práce je zaměřena na problematiku stavby modelu mitochondriálního ribozomu, se kterým posléze bude možno provádět nejrůznější simulace. Tento simulační model bude následně využit na popis dynamického chování vybraných částí mitochondriálního ribozomu. Úvodem práce budou popsány mitochondriální ribozomy jako takové. Bude popsáno, co jsou zač, čím se vyznačují oproti běžným ribozomům, kde je najdeme, jaká je jejich struktura a proč je jejich studium důležité a zajímavé. V dalších fázích prezentace bude přiblížen samotný proces stavby simulačního modelu, který se momentálně řítí do cílové rovinky a který je zároveň pokusem o vytvoření prvního kompletního simulačního modelu lidského mitochondriálního ribozomu na světě. Speciální pozornost bude věnována problematickým místům tvorby modelu, mezi které patří mimo jiné výskyt nekanonických residuí v proteinech a rRNA nebo přítomnost řetězců proteinů a rRNA s chybějící namodelovanou sekvencí residuí uprostřed řetězce. Jednotlivé případy budou rozvedeny a bude popsán postup, jakým byly dané problémy vyřešeny nebo jakým jsou řešeny. Závěrem bude nastíněno, co ještě chybí k úspěšnému dokončení projektu, jaké jsou jeho vyhlídky do budoucna a k čemu se bude hotový simulační model používat. Výstupem pro přítomné by mělo být uvedení do problematiky mitochondriálních ribozomů a také základní představa o samotném procesu tvorby modelu mitochondriálního ribozomu.

Non-adiabatic Simulations of Benzene and its Isomers

Anna Mokrá (B3)

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

Non-adiabatic molecular dynamics techniques are crucial for studying excited-state behavior in molecular systems. Among these, widely used mixed quantum-classical approach of trajectory surface hopping (TSH) simulates excited-state dynamics by propagating classical molecular trajectories across *ab initio* potential energy surfaces from an ensemble of initial geometries. In this work, we compare two TSH models — Fewest Switches Surface Hopping (FSSH) and Landau–Zener Surface Hopping (LZSH) — in simulations of benzene, fulvene and prismane, otherwise known as Ladenburg benzene. While FSSH is more established method, LZSH is its simpler yet efficient alternative. Both approaches present unique advantages depending on the structure of interest. By comparing these TSH models, we investigate the limitations of methods and explore the photochemistry of benzene isomers, ranging from the dissociation of hydrogen atom to the forming of a completely new structure.

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

Daniel Myšák (B3)

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

Living organisms regulate their life functions by biocatalyst called enzymes. Enzymes activity is very sensitive to its surrounding which allow the cells to quickly react and change metabolism. Cell's interior contains large variety of macromolecules, thus it is crowded. However, majority of the *in vitro* experiments with enzymes are made in simple aqueous buffers. Influence of the crowded environment is missing and that is why we focus on it. We simulated Glutamate dehydrogenase (GDH), one of the most common and important enzymes in all organisms, and compared our results with experimental data. Even though GDH is widely studied enzyme, its reaction mechanism is still not fully described. We used all-atom classical molecular dynamics for GDH systems with glutamate (GLU) and norvaline (NVA) as substrates under various conditions (pH, crowder). Then we collected 200-400 ns trajectories. We characterized large variety of possible active site conformations under various conditions, such as different substrate (GLU, NVA) and pH. We described active site flexibility, diverse orientation of residues and mobility of the substrates. Then we started working on quantitative description of the substrate binding using enhanced sampling methods. Collected trajectories and their analysis can help to explain how enzymes behave in crowded environment and to properly describe reaction mechanism of GDH and how it is affected by its surroundings.

Fyzikální chemie IV

MÍSTO: B23

KOMISE:

Předseda komise: prof. RNDr. Jiří Kolafa, CSc.

Členové komise:

- prof. Ing. Michal Fulem, Ph.D.
- Mgr. Ing. Eva Krupičková Pluhařová, Ph.D.

SEZNAM SOUTĚŽÍCÍCH

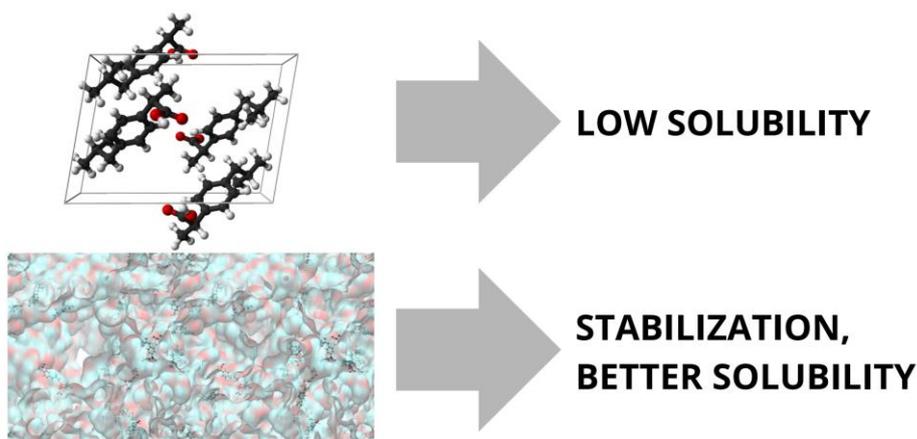
- Bc. **Vladislav Aulich**, M1, doc. Ing. Ctirad Červinka, Ph.D., *Insights on the compatibility of selected active pharmaceutical ingredients with polylactic acid from molecular-dynamics simulations*
- Bc. **Aneta Hrádková**, M1, doc. RNDr. Michal Kolář, Ph.D., *Strukturní variabilita peptidových deformyláz*
- Bc. **Martin Mašek**, M2, doc. RNDr. Michal Kolář, Ph.D., *Vliv hořčnatých iontů na strukturu a dynamiku protoribozomu*
- Bc. **Elia Pavliš**, M2, Ing. Martin Klajmon, Ph.D., *Kvantově mechanická parametrizace stavových rovnic typu PC-SAFT*
- Bc. **Veronika Šritterová**, M2, doc. Ing. Ctirad Červinka, Ph.D., *Implementation of Polarizable Simulations for Phase Interfaces in Porous Liquids*
- Bc. **Jakub Žváček**, M2, doc. RNDr. Michal Kolář, Ph.D., *Atomistic simulations of a transfer RNA analogue*

Insights on the compatibility of selected active pharmaceutical ingredients with polylactic acid from molecular-dynamics simulation

Bc. Vladislav Aulich (M1)

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

Many active pharmaceutical ingredients (APIs) suffer from low water solubility and consequent limited efficiency in the treatment of living organisms. A novel general trend is to reduce this deficiency by using an amorphous dispersion of API within polymeric excipients. That strategy relies on the thermodynamic fact that each amorphous solid phase is metastable with respect to its crystalline counterpart, being thus also more soluble than the crystal. In our case, we chose polylactic acid (PLA) as a polymeric excipient and four APIs (carbamazepine, naproxen, indomethacin, ibuprofen) to form a binary mixture. Molecular dynamics simulations represent a suitable tool for describing those binary systems to explore the key molecular interactions that bind their bulk phases and to interpret their kinetic properties and stability with respect to their undesirable recrystallization. Intensity of the interactions between API and polymer molecules in the amorphous bulk mixtures are derived directly by calculating radial distribution functions and cohesive energies or indirectly from the mean squared displacement of API molecules in the bulk. Another important calculated parameter indicating the influence of atomic interactions between the drug and polymer molecules is the glass transition temperature, representing a direct measure of the kinetic stability.

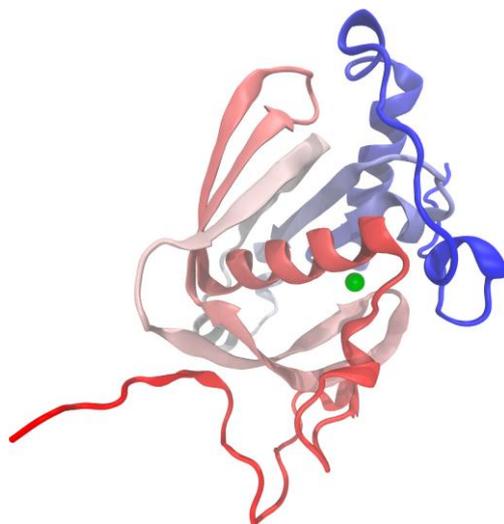


Strukturní variabilita peptidových deformyláz

Bc. Aneta Hrádková (M1)

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

První enzym, se kterým se bakteriální proteiny rodící se v ribozomu setkají, je peptidová deformyláza (PDF). PDF se váže na povrch ribozomu a odštěpuje formylovou skupinu z N konce nascentního proteinu, který se vynořuje z ribozomálního tunelu. Podle strukturních a sekvenčních podobností se PDF dělí na Typ I, Typ II a Typ III, přičemž Typ III je považován za neaktivní. PDF Typu I mají C-koncový α -helix, který slouží jako spojení mezi katalytickou doménou enzymu a povrchem ribozomu, zatímco u PDF Typu II je přesný mechanismus vazby na ribozom stále neznámý. Ve své bakalářské práci jsem pomocí simulací molekulové dynamiky studovala chování C-koncové oblasti PDF získaných z různých organismů. V této práci rozšiřuji naše poznatky o pěti bakteriálních PDF o další 2 proteiny. Tentokrát se ale jedná o zástupce eukaryotních PDF. Dříve se věřilo, že PDF lze najít pouze v bakteriálních buňkách, ale v posledních letech se ukázalo, že existují PDF analogy i v rostlinách nebo mitochondriích. Právě tyto deformylázy jsou předmětem této práce, jedna je zástupcem plastidiálních PDF a druhá byla syntetizována jako analog lidské mitochondriální PDF. Zabývám se zde srovnáním struktury a dynamiky eukaryotních a prokaryotních PDF pomocí počítačových simulací těchto enzymů. Výsledky těchto simulací poukazují například na podobnost flexibility C konce eukaryotních PDF a zástupců Typu I.



Vliv hořčnatých iontů na strukturu a dynamiku protoribozomu

Bc. Martin Mašek (M2)

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

Ribozom je biomolekulový komplex, který je zodpovědný za biosyntézu proteinů, vyskytující se téměř ve všech buňkách. Schopnost ribozomu katalyzovat tvorbu peptidových vazeb je připisována peptidyltransferázovému centru (PTC), katalytickému místu, které je složené výhradně z ribozomální RNA (rRNA). V rámci ribozomu obklopuje PTC strukturně symetrická oblast, jež byla pozorována konzistentně u různých druhů organismů. Tato symetrie naznačuje dávný evoluční původ PTC. V této práci jsem studoval modelovou strukturu (PTC_Small) potenciálního evolučního předchůdce ribozomu, tzv. protoribozomu, u které již bylo prokázáno, že je schopna katalyzovat vznik dipeptidů. Model PTC_Small jsem postavil na základě struktury moderního bakteriálního ribozomu *T. thermophilus*. Zaměřil jsem se především na vliv strukturních iontů a iontů v roztoku na strukturu rRNA v PTC_Small. K tomu jsem využil metody molekulární dynamiky na atomové úrovni pomocí programu GROMACS. Výsledky naznačují, že strukturní hořčnaté ionty mírně stabilizují rRNA. Na druhé straně vyšší koncentrace iontů v rozpouštědle strukturu modelu příliš neovlivňuje.

Kvantově mechanická parametrizace stavových rovnic typu PC-SAFT

Bc. Elia Pavliš (M2)

Školitel: Ing. Martin Klajmon, Ph.D.

Stavové rovnice typu PC-SAFT umožňují výpočet termodynamických a volumetrických vlastností čistých látek a směsí pouze na základě látkových parametrů pro jednotlivé složky. Význam těchto parametrů je jasně definovaný a vztahuje se ke geometrickým a interakčním vlastnostem molekul dané látky. Relativní přímočarost výpočtů činí pokročilé stavové rovnice cenným screeningovým nástrojem v situacích, kde experimentální údaje chybí nebo je jejich získání velmi nákladné. Parametry čistých látek je ovšem stále potřeba fitovat na experimentální data, jako je například hustota, tlak nasycených par nebo rozpustnosti. To omezuje použití PC-SAFT na látky, pro které jsou tyto údaje k dispozici, a navíc je výsledek výpočtu ovlivněn výběrem experimentálních dat a jejich kvalitou. Nedávno byla představena technika SEPP (Segment-Based Equation of State Parameter Prediction), která umožňuje určení parametrů přímo z molekulární struktury pomocí kvantově chemických výpočtů. Takto získané parametry mají potenciál výrazně usnadnit využití rovnic typu PC-SAFT pro zcela nové látky. Technika SEPP byla však doposud testována jen na užším výběru látek a je tedy otázkou, jaké výsledky lze očekávat pro jiné, složitější látky. Cílem práce je tuto komplexní výpočetní techniku (zahrnující souhrn řady softwarových prostředků) implementovat a srovnat její výsledky s výsledky získanými běžnými parametrizačními metodami.

Implementation of Polarizable Simulations for Phase Interfaces in Porous Liquids

Bc. Veronika Šritterová (M2)

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

Porous liquids (PLs) represent an innovative class of materials as they combine the permanent porosity of solid sorbents and the fluid nature of liquids. Adding structured voids into liquids is highly attractive in terms of promising applications, including gas capture, catalysis, and separations. This work presents a set of molecular dynamics simulations addressing the structural and dynamic properties of PLs comprised of the selected ionic liquids (ILs) and metal-organic frameworks (MOFs), particularly ZIF-8. The study explores the atomic-level dynamics of fluid behavior near the crystal structure's free surface, uncovering the subtle interactions and movements in this boundary region. The force fields used are enhanced to incorporate explicit atomic polarizability via the Drude model. The polarizability is expected to impact the interactions among ions and the surface significantly, reducing the spurious ionic cage effect, and thus promoting the inner dynamics of the fluid component. By calculating the interaction energies of ions with the interface and their lifetime in its proximity, it is ascertained how the confinement of the ILs within the MOF pore influences its fluid properties. The overarching aim is to conduct a thorough analysis of the interphase at the atomic resolution, and subsequently to assess whether the combinations of the considered materials are suitable for the formation of porous liquids.

Atomistic simulations of a transfer RNA analogue

Bc. Jakub Žváček (M2)

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

Besides ribosome itself, transfer RNA (tRNA) is one of the key components of protein synthesis. It serves as a mean of translation from the mRNA code into the amino acid sequence, and this “language” is evolutionarily strictly conserved, meaning that one mRNA sequence is translated into the same amino acid sequence in almost all organisms. The work follows an article, where it was experimentally proven that there are organisms able to modify this code in some cases. Therefore, mRNA sequences are not translated the expected way. It was also discovered that tRNAs associated with these abnormalities have structural difference in so called anticodon stem (AS). Typically, AS consists of five base pairs, however, tRNAs encoding abnormalities have AS only four base pairs long, due to a point mutation of one nucleobase. In this work series of MD simulations were performed for structures with different point mutations leading to shorter AS. The resulting simulations are evaluated by x3DNA, tool used to describe tertiary structures of nucleic acids and compared to results obtained with the structure of wild type. The aim is to determine, whether point mutations and shorter AS can lead to difference in tRNA flexibility, that could eventually cause abnormalities in mRNA code translation.

Fyzikální chemie V

MÍSTO: B26

KOMISE:

Předseda komise: doc. RNDr. Michal Kolář, Ph.D.

Členové komise:

- Ing. Martin Klajmon, Ph.D.
- Ing. Vít Svoboda, Dr. sc. ETH Zürich

SEZNAM SOUTĚŽÍCÍCH

- Bc. **Karolína Fárníková**, M2, Mgr. Ing. Eva Krupičková Pluhařová, Ph.D., *Molecular simulations of reaction intermediates of CO₂ reduction aided by cobaltoporphyrin catalyst*
- Bc. **Marek Klíma**, M1, prof. RNDr. Bc. Petr Slaviček, Ph.D., *CO release from flavonol: Ab initio Model*
- Bc. **Lukáš Peterka**, M2, prof. RNDr. Bc. Petr Slaviček, Ph.D., *Investigating Photoinduced Electron Transfer from Bilirubin Model Compound to Oxygen*
- Bc. **Tereza Šimsová**, M2, prof. Ing. Michal Fulem, Ph.D., *Fyzikální stabilita amorfních lékových formulací: Vliv termodynamických, kinetických a relaxačních faktorů*
- Bc. **Anna Lamancová**, M2, RNDr. Dana Nachtigallová, Ph.D., *Predicting Rotational Dynamics in Molecular Rotors: An Ab Initio Study of Substituent Influence on Thermal Isomerization*
- Bc. **Katarína Vosovičová**, M1, prof. RNDr. Bc. Petr Slaviček, Ph.D., *Towards Photostability of Astrochemical Glycine: Impact of a Solvent*

Molecular simulations of reaction intermediates of CO₂ reduction aided by cobaltoporphyrin catalyst

Bc. Karolína Fárníková (M2)

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

The increasing carbon dioxide (CO₂) levels in the atmosphere correlated with global warming are a challenge for humanity. Therefore, there has been an effort to either reduce its production or capture it and use it further. The second option can be realized by catalyzed electrochemical reduction, which leads to various products. To facilitate the electrochemical reduction many catalysts are being currently under development. In our research, we have focused on the details of the catalytic mechanism of the reduction of CO₂ to carbon monoxide catalyzed by a cobaltoporphyrine cage catalyst. We focused on two reaction intermediates, one after full reduction and binding of CO₂ and another one after subsequent protonation. To simulate the behavior of these intermediates in aqueous solutions of alkali metal cations, which can tune the selectivity of the catalyst, classical molecular dynamics were employed. However, since we are dealing with non-standard residues for both intermediates, we had to develop empirical force fields. Our results can contribute to both development of force fields for non-standard residues and the understanding and tuning of an environmentally interesting catalyst.

CO release from flavonol: Ab initio Model

Bc. Marek Klíma (M1)

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

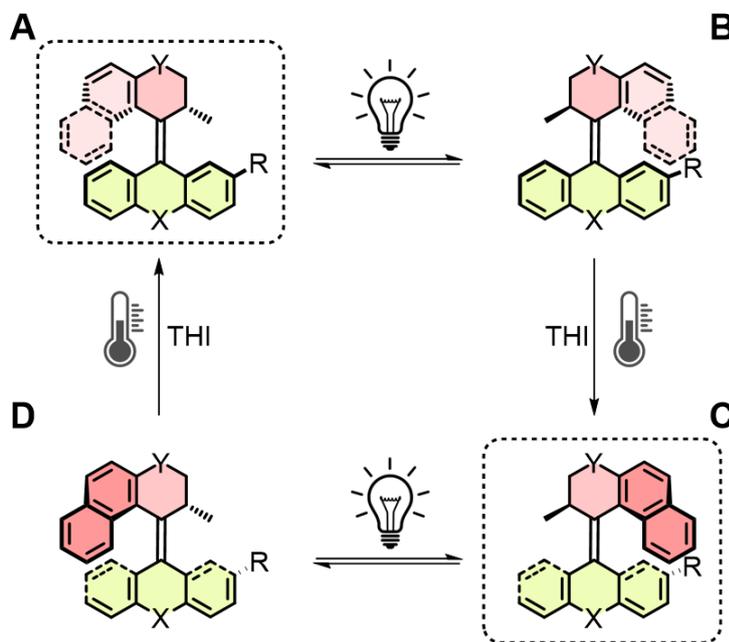
The release of carbon monoxide from flavonol upon UV radiation exposure was first discovered in 1989, establishing flavonol as a photoactivatable carbon monoxide-releasing molecule (photoCORM). The targeted CO release is significant for biomedical applications, e.g. CO can have beneficial effects on the human body when its release is localized. Triplet state plays a critical role in the dissociation process of flavonol and recently the influence of molecular oxygen was demonstrated. In my work, I aim to model dissociation of flavonol using *ab initio* methods, primarily multireference methods in addition with transition state theory to study the mechanism and kinetics of the dissociation.

Predicting Rotational Dynamics in Molecular Rotors: An *Ab Initio* Study of Substituent Influence on Thermal Isomerization

Bc. Anna Lamancová (M2)

Školitel: RNDr. Dana Nachtigallová, Ph.D.

Molecular rotors are nanoscale systems capable of controlled rotational movement around a specific axis, driven by energy inputs such as light, heat, or chemical reactions. In this study, we investigate the influence of substituents on the thermal helix inversion, rotational speed, and rotational barrier of molecular rotors. Using *ab initio* methods, density functional theory (DFT), and the long-range corrected functional ω B97XD, we conduct a 2D potential energy surface (PES) scan for isomerization between two stable isomers. This approach allows us to accurately map the PES and analyze how different substituents affect inversion dynamics and energy barriers. The aim of this work is to deepen the understanding of substituent effects on molecular rotor performance, providing insights for designing efficient synthetic molecular machines.



Investigating Photoinduced Electron Transfer from Bilirubin Model Compound to Oxygen

Bc. Lukáš Peterka (M2)

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

The present study examines the photoinduced electron transfer (PET) process from a bilirubin model compound, dipyrinone, to an oxygen molecule. This process may represent the initial step of the photooxidation pathway of dipyrinone derivatives, as recently proposed at the cooperating experimental laboratory (prof. Petr Klán, MU Brno). This work employs a range of computational methods, including time-dependent density-functional theory (TD-DFT), constrained density-functional theory (CDFT), multireference approaches, and semiempirical techniques, to elucidate the PET mechanism. The potential energy surface mapping is performed, involving excited states characterization, interpolation between critical structures, and the implementation and application of Landau–Zener TD-DFT surface hopping dynamics. Initially, the characterization of dipyrinone and oxygen is conducted separately, followed by an investigation of their complex. A comparison of calculations conducted in vacuum and water implicit environments demonstrates the significant influence of the solvent.

Fyzikální stabilita amorfních lékových formulací: Vliv termodynamických, kinetických a relaxačních faktorů

Bc. Tereza Šimsová (M2)

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

Amorfní formulace jsou hojně používány jako strategie pro zvýšení biodostupnosti málo rozpustných léčiv. Počátek krystalizace je kritickým faktorem pro stanovení doby použitelnosti amorfních formulací. Proto je porozumění a zajištění dlouhodobé inhibice krystalizace léčiva v amorfních formulacích jedním z klíčových parametrů pro jejich používání. Tato práce se zabývá simultánním zkoumáním vlivu termodynamických, kinetických a strukturně-relaxačních faktorů na fyzikální stabilitu amorfních forem léčiv a jejich směsmi s vybranými polymerními excipienty. Cílem práce je rovněž objasnit vztahy mezi těmito faktory a zavedenou klasifikací látek podle jejich schopnosti tvořit amorfní fázi, tzv. „glass-forming ability“. Relaxační vlastnosti, tepelné kapacity, fázové přeměny a jejich kinetika jsou zkoumány kalorimetrickými metodami ve spojení s odpovídajícími modely pro popis těchto vlastností.

Towards Photostability of Astrochemical Glycine: Impact of a Solvent

Bc. Katarína Vosovičová (M1)

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

Over the last decade, glycine, the simplest amino acid, has been detected in cometary atmospheres and ice. Recently, glycolamide, an isomer of glycine, has also been identified in interstellar matter, sparking further interest in the survival mechanisms of these molecules under extreme cosmic conditions. The photochemical decomposition of amino acids is thought to play a role in developing biomolecular homochirality, yet the photostability of glycine in space remains underexplored. In this study, I examine the photostability of glycine under simulated cosmic radiation, with a specific focus on its behavior in solution. By utilizing QM/MM non-adiabatic molecular dynamics simulations with the CASSCF method with various active spaces, I explore the photochemistry of zwitterionic glycine in a cluster of water molecules. This approach allowed me to analyze how the solvent affects photostability by exploring potential reaction pathways. I further compare the reactivity of solvated and non-solvated glycine, finding that the presence of water molecules significantly affects its photostability. These findings shed light on the role of solvent effects in stability, providing insights into the resilience of amino acids in space and implications for the potential origins of life.

Ústav chemického inženýrství (409)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

doc. Dr. Ing. Pavlína Basařová

SEZNAM SEKČÍ

8. [Chemické inženýrství I](#)
9. [Chemické inženýrství II](#)
10. [Chemické inženýrství III](#)
11. [Chemické inženýrství IV](#)
12. [Chemické inženýrství V](#)
13. [Chemické inženýrství VI](#)
14. [Chemické inženýrství VII](#)
15. [Chemické inženýrství VII](#)

SEZNAM SOUTĚŽÍČÍCH

1. Bc. **Adriana Augustínová**, M2, Ing. Mária Zedníková, Ph.D., *Stanovenie rozpustnosti hélia v eutektiku Pb-16Li*
2. Bc. **Lukáš Bednář**, M1, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D., *Vývoj modelu palivového článku s pevným elektrolytem*
3. **Jiří Bohuslav**, B3, doc. Dr. Ing. Milan Jahoda, *Ověření designu pojistných ventilů v petrochemii*
4. **Lukáš Bukač**, B3, Ing. Lucie Mašková, Ph.D., *Fine-tuning of 3D bioprinted films for in-situ synthesis and release of bactericides*
5. Bc. **Jan Cincibuch**, M1, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D., *Modelování reakce a transportu při hydrogenolyze metylbenzenu v katalytickém reaktoru s pevným ložem*
6. Bc. **Zuzana Coufalová**, M1, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D., *Testování Pd/SSZ-13 jako aktivního materiálu pro adsorpci NOx*
7. **Milana Dejaková**, B3, Ing. Martin Isoz, Ph.D., *On energy balance in non-spherical CFD-DEM*
8. **Yelyzaveta Demianenko**, B3, doc. Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D., *Preparation and Characterization of Si/Polyaniline Core-Shell Nanoparticles for Lithium-Ion Battery Applications*
9. Bc. **Denisa Dendisová**, M2, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek, *Upcycling of plastics: fractionation method for composites and polyolefins*
10. **Hoang Phi Hung Do**, B3, prof. Ing. Petr Kočí Ph.D., *Matematické modelování adsorpce a desorpce NOx na zeolitovém katalyzátoru Pd/SSZ-13*
11. Bc. **Kryštof Dorňák**, M1, Ing. Anna Vanluchene, Ph.D., *Optimizing Mass Transport in Microfluidic Channels for Photocatalysis Using CFD Modeling*

12. Bc. **Marek Drápela**, M1, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek, *The impact of surface morphology of powders on contact charging*
13. **Filip Drešr**, B3, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek, *Turbidity, Rheology and stability measurements for Solvent-Based recycling*
14. **Martin Drnec**, B3, Ing. Petr Mazúr, Ph.D., *Optimization of the electrolyte composition of a zinc-iodine flow battery*
15. **Vojtěch Dvořák**, B3, Ing. Pavel Zelenka, *Vývoj zjednodušeného modelu plic pro studium depozice inhalačních léčiv*
16. **Jakub Fišner**, B3, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D., *Analysis of mixing step in continuous antisolvent precipitation*
17. Bc. **Vojtěch Hampl**, M1, prof. František Štěpánek, Ph.D., *Zpracování farmaceutických nanosuspenzí metodou rozprašovacího sušení*
18. Bc. **Matěj Holub**, M1, doc. Ing. František Rejl, Ph.D., *Studium plněných aparátů za podmínek destilace*
19. Bc. **Matěj Honzík**, M1, prof. Ing. Petr Kočí Ph.D., *Katalytický rozklad amoniaku pro použití ve vysokoteplotním palivovém článku*
20. Bc. **Hynek Housar**, M1, Ing. Petr Jelínek, prof. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D., *Nanosuspension Preparation for Effective Nebulization of Poorly Water-Soluble Drugs*
21. Bc. **Rostislav Huňa**, M2, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D., *Modelování kinetiky homogenizace v mikrofluidním mísiči pomocí metody CFD*
22. Bc. **Romana Hupková**, M1, doc. Ing. Viola Tokárová, Ph.D., *Ako možno študovať tuberkulózu s použitím mikrofluidných čipov?*
23. **Gréta Iliášová**, B3, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D., *Vylepšenie kontaktov vodičov na elektródach palivového článku.*
24. **Vilém Jančík**, B3, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek, *Modelling polymer dissolution for the recycling of mass-produced plastics*
25. Bc. **Kryštof Jureček**, M2, prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha, *Vývoj metodiky kalibrace Hmetru*
26. Bc. **Matyáš Khýr**, M1, Ing. Martin Isoz, Ph.D., *AI for simulation of soot deposition in catalytic filters: From 2D to 3D estimates*
27. Bc. **Stanislav Kočí**, M2, doc. Ing. Ondřej Vopička, Ph.D., *Pervaporační a perstrakční dělení izomerů xylenu*
28. Bc. **Marek Martinian Kolátor**, M2, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D., *Příprava a charakterizace Pd/SSZ-13 jako aktivního materiálu pro adsorpci NOx*
29. **Jan Korbel**, B3, doc. Ing. František Rejl, Ph.D., *Optimalizace procesu elektrodialýzy pro recyklaci lithium-iontových baterií*
30. Bc. **Jan Kršek**, M1, Ing. Matyáš Marek, *Membrane screening for microemulsion redox flow batteries*
31. Bc. **Dalibor Kront**, M1, doc. Dr. Ing. Milan Jahoda, *Stanovení konvektivní složky při měření tepelného toku v prostředí požáru*
32. **Michael Křivan**, B2, Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D., *Optimalizace nebulizace nanoformulací pro inhalační podání léčiv*
33. **Filip Kříž**, B3, doc. Ing. Viola Tokárová, Ph.D., *Optimalizace přípravy mikrostrukturovaných povrchů pomocí laserové fotolitografie*
34. **Adam Labach**, B3, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D., *Simulace proudění a reakce ve 3D rekonstruované stěně porézního filtru*

35. **Adrián Laco**, B2, Ing. Miroslav Večeřa, *Fluidná lož ako alternatíva k sprejovému sušeniu na výrobu amorfných pevných disperzií*
36. Bc. **Barbora Litomiská**, M1, Ing. Petr Mazúr, Ph.D., *Nano-suspenzní elektrolyty na bázi polypyrrolu pro redoxní průtočné baterie*
37. **Kryštof Luhan**, B3, Ing. Martin Balouch, Ph.D., *Liposomes with new ionizable lipoids for pharmaceutical applications*
38. Bc. **Jaroslav Macas**, M1, prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha, *Příprava tlakové smyčky Hmetru*
39. Bc. **Alina Mamedova**, M2, doc. Ing. Viola Tokárová, Ph.D., *Enkapsulace buněk do hydrogelů pomocí stop-flow litografie*
40. **Daniela Marcalíková**, B3, doc. Ing. Jitka Čejková, Ph.D., *Studium morfolgie chemobrionických struktur pomocí rentgenové mikrotomografie*
41. Bc. **Martin Matej**, M1, doc. Ing. Alexandr Zubov, Ph.D., *Charakterizácia nádrží prietokových baterií pomocou výpočtovej dynamiky tekutín (CFD)*
42. Bc. **Jakub Melenovský**, M1, prof. Ing. Michal Příbyl, Ph.D., *Studium enantioselektivních transesterifikací v mikroreaktorech*
43. Bc. **Ondrej Melo**, M1, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek, *Crystallinity change of semi-crystalline polyolefins during the sorption of penetrants*
44. Bc. **Hana Moravčíková**, M1, Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D., *Studium interakce farmaceutických nanokrystalů s buněčnými sferoidy*
45. Bc. **Michal Neuwirth**, M2, doc. Dr. Ing. Milan Jahoda, *Modelování úniku toxické látky do volného prostředí*
46. **Vladimir Nikolaev**, B3, doc. Fatima Hassouna, Ph.D., *Synthesis and physico-chemical characterization of carbon quantum dots for drug delivery application*
47. **Adam Opravil**, B3, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D., *Výzkum a vývoj pevných formulací z glukonových částic*
48. **Jan Pchálek**, B3, Ing. Martin Krov, *Konstrukce statického mísiče pro zařízení Kuličkomat*
49. Bc. **Bára Pinčáková**, M1, doc. Dr. Ing. Milan Jahoda, *Vliv přítomnosti sazí na výsledky CFD modelování požárů*
50. **Žofie Plchutová**, B2, Ing. Petr Mazúr, Ph.D., *Inovované inertní 3D elektrody průtočných baterií s karbonizovanými polymerními nano-vlákný*
51. Bc. **Monika Poláčková**, M1, doc. Ing. Alexandr Zubov, Ph.D., *Modelling of emulsion copolymerization: Identifiability analysis*
52. **Jiří Polách**, B2, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D., *Kinetika deaktivace Pd/AEI zeolitu pro adsorpci NOx ve výfukových plynech*
53. Bc. **Eliška Prostějovská**, M1, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D., *Návrh systému pro čištění výfukových plynů ze stacionárního dieselgenerátoru*
54. Bc. **Anna Reiserová**, M1, Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D., *In vitro analýza inhalačních přípravků pro in situ výrobu antibiotik*
55. Bc. **Karolína Roháčová**, M1, prof. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D., *Novel coamorphous systems of Sofosbuvir*
56. **Jakub Rýc**, B3, Ing. Martin Isoz Ph.D., *Pečení chleba: analýza citlivosti multifyzikálního CFD modelu*
57. **Veronika Rychlá**, B3, Ing. Lukáš Valenz Ph.D., *Studium závislosti kGa na difúzním koeficientu na výplni MellapakPlus 452.Y*
58. Bc. **Ludmila Řiháková**, M2, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek, *Innovative Solvent-Based Recycling: Closing the Loop on Plastic Waste*

59. **Antonín Saifrt**, B3, Ing. Jan Haidl, Ph.D., *Vývoj procesu kombinované koagulace pro výrobu pitné vody*
60. Bc. **Adam Sedlačík**, M2, Ing. Petr Mazúr Ph.D., *Optimisation of zinc-air hybrid flow batteries*
61. Bc. **Karolína Slonková**, M2, doc. Ing. Ondřej Kašpar, Ph.D., *Post-breakage growth of organic crystals*
62. **Barbora Šašková**, B3, Ing. Filip Zavřel, *Příprava kompozitů kontrastní látky a glukanových částic*
63. **Vojtěch Šebek**, B3, Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D., *Optimalizace magnetoliposomů pro biomedicínské aplikace*
64. Bc. **Anna Šmídová**, M2, Zubov Alexandr doc. Ing. Ph.D., *Van der Waalsova stavová rovnice a její překvapivá využití*
65. **Michal Števuliak**, B3, Ing. Petr Mazúr, Ph.D., *Vplyv teploty a pH na stabilitu kladného elektrolytu použitého v prietočných batériových článkoch prevádzkovaných pri vyšších teplotách*
66. Bc. **Alberto Taccori**, M2, Ing. Petr Mazúr, Ph.D., *Phase diagrams of microemulsion electrolytes in flow batteries*
67. **Jarmila Terpáková**, B3, Ing. Martin Isoz, Ph.D., *Development of a fully resolved digital twin for analysis of fluidized bed*
68. Bc. **Matyáš Jakub Tichý**, M1, doc. Ing. František Rejl, Ph.D., *Vývoj metodiky recyklace lithium-iontových baterií*
69. **Yeva Tsypko**, B3, prof. Ing. Petr Kočí Ph.D., *Simulation study of catalytic systems for exhaust aftertreatment*
70. Bc. **Samuel Uhliarik**, M2, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D., *Modifikácia uvoľňovania liečivej látky z minitabliet pomocou coatingu vo fluidnom lože*
71. Bc. **Mikuláš Vaszi**, M1, prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha, *Měření a zpracování signálu Hmetru a jeho kalibrace*
72. **Vít Večerník**, B2, Ing. Lucie Kubíčková, *Metoda vnořené hranice s turbulentními modely Reynoldsova středování: Verifikace a validace*
73. **Vanesa Virsiková**, B3, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek, *Combining simulation and experimental techniques to study diffusion in polymer melts*
74. **Petr Vítek**, B2, Ing. Stanislav Valtera, *Atom by Atom Built CuPd Pentamer Clusters for Oxidative and Non-Oxidative Cyclohexene Dehydrogenation*
75. Bc. **Juraj Volešíni**, M1, Ing. Petr Mazúr, Ph.D., *Optimization of an organic redox flow battery model: Impact of electrochemical kinetics description on performance metrics*
76. **Lenka Vyhliđalová**, B2, Ing. Denisa Lizoňová, Ph. D., *Interakce kurkuminových nanokrystalů s plicními buňkami*
77. Bc. **Martin Weisl**, M1, Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D., *Enkapsulace peptidů do glukanových částic*
78. **Kateřina Zedníčková**, B3, prof. Ing. Michal Příbyl, Ph.D., *Matematické modelování kontinuální elektroforetické separace enantiomerů kyseliny mandlové*
79. Bc. **Pavel Zeman**, M1, Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D., *Aerosol Drug Formulation Using Phospholipid-Stabilized Nanocrystals: Modeling and In Vitro Evaluation*
80. Bc. **Lukáš Ziebiker**, M1, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D., *Stanovení emisí dieselového generátoru elektřiny vzhledem k normě EU Stage V*

SPONZOŘI ÚSTAVU CHEMICKÉHO INŽENÝRSTVÍ

ZENTIVA



Chemické inženýrství I

MÍSTO: B 141b

KOMISE

Předseda komise: prof. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.

Členové komise:

- Ing. Anna Vanluchene, Ph.D.
- Ing. Filip Hládek
- Ing. Jakub Staš
- Ing. David Smrčka (Zentiva)
- Ing. Michal Dudák, Ph.D. (Anamet)
- Ing. Martin Bár (Orlen Unipetrol)

SEZNAM SOUTĚŽÍCÍCH

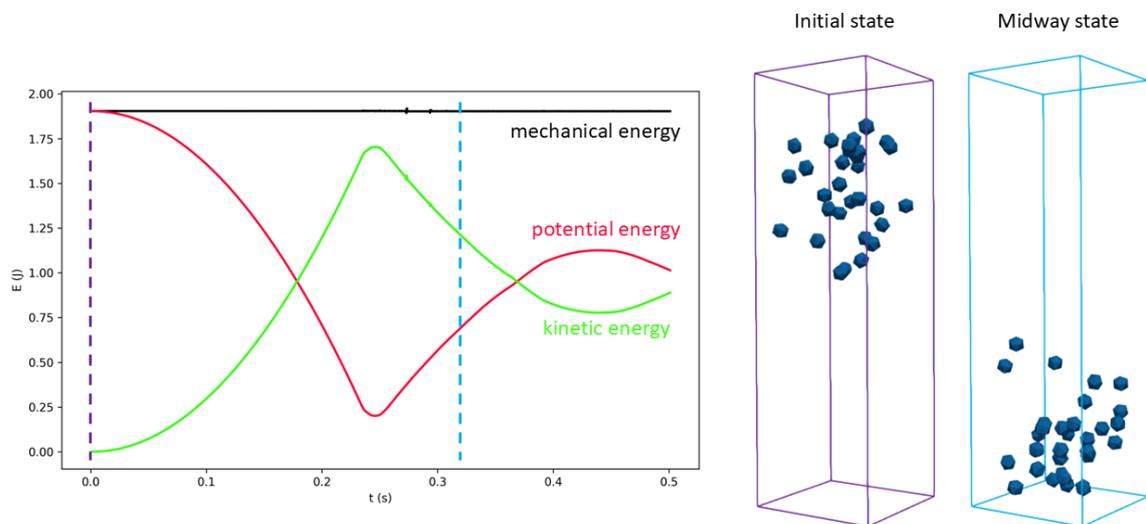
- **Milana Dejaková**, B3, Ing. Martin Isoz, Ph.D., *On energy balance in non-spherical CFD-DEM*
- **Bc. Kryštof Dorňák**, M1, Ing. Anna Vanluchene, Ph.D., *Optimizing Mass Transport in Microfluidic Channels for Photocatalysis Using CFD Modeling*
- **Jakub Fišner**, B3, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D., *Analysis of mixing step in continuous antisolvent precipitation*
- **Vladimir Nikolaev**, B3, doc. Fatima Hassouna, Ph.D., *Synthesis and physico-chemical characterization of carbon quantum dots for drug delivery application*
- **Bc. Karolína Slonková**, M2, prof. Jerry Heng (školitel za VŠCHT: doc. Ing. Ondřej Kašpar, Ph.D.), *Post-breakage growth of organic crystals*
- **Bc. Alberto Taccori**, M2, Ing. Petr Mazúr, Ph.D., *Phase diagrams of microemulsion electrolytes in flow batteries*
- **Jarmila Terpáková**, B3, Ing. Martin Isoz, Ph.D., *Development of a fully resolved digital twin for analysis of fluidized bed*
- **Yeva Tsypko**, B3, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D., *Simulation study of catalytic systems for exhaust aftertreatment*
- **Petr Vítek**, B2, Ing. Stanislav Valtera, *Atom by Atom Built CuPd Pentamer Clusters for Oxidative and Non-Oxidative Cyclohexene Dehydrogenation*

On energy balance in non-spherical CFD-DEM

Milana Dejaková (B3)

Supervisor: Ing. Martin Isoz, Ph.D.

From standardised large-scale processes, e.g. fluidised beds or filtration to highly specialised microscale, such as microdosing of suspensions for medicinal purposes; processes containing solids dispersed in a fluid phase are widespread in the industry. Further optimisation of the standardised processes and design of the specialised ones is possible via high-fidelity simulations considering particle-particle and particle-fluid interactions. Such simulations may be constructed by coupling Computational Fluid Dynamics (CFD) with the Discrete Element Method (DEM). The CFD-DEM solvers are presently applied for large-scale applications while considering primarily only spherical particles due to their simple geometry, contact treatment, and drag force correlations. However, on a microscale, the spherical CFD-DEM approach becomes insufficient as the particle shape is crucial. A new in-house developed CFD-DEM solver for arbitrarily shaped solids is suitable for such applications, but its fidelity has to be evaluated, particularly with respect to DEM. This work aims to provide an effective verification tool based on an in-depth energy balance verification, including a single contact verification and large system verification against the LIGGGHTS DEM solver commonly used by the industry.



Optimizing Mass Transport in Microfluidic Channels for Photocatalysis Using CFD Modeling

Bc. Kryštof Dorňák (M1)

Supervisor: Ing. Anna Vanluchene, Ph.D.

We live in a time where pharmaceuticals and other fine chemistry products make our lives easier, more enjoyable, or, in some cases, simply even possible. As such, the demand for these is very high. However, the efforts to answer it must face two main issues. First, a catalyst is needed to enhance product yield and as of now, expensive organic compounds, often with precious metal content, are the most common choice. This poses a problem as we ought to keep fine chemistry as sustainable as can be. A possible solution comes in the form of metal-free photocatalysts, which have been gaining attention due to their low production cost and high sustainability. Second, the product synthesis is usually quite challenging, as precise control over the reaction conditions has to be achieved. This is where microreactors come in handy, with their dimensions well fit for the level of control needed. Compared to traditional batch reactors, these also allow for better light utilization when photocatalyzed. The aim of this project is to combine the two solutions and therefore, a photocatalyzed microreactor will be modeled under different Taylor flow regimes, using a CFD simulation tool. The proposed model will then be experimentally validated and used for optimized sustainable reactor design.

Analysis of mixing step in continuous antisolvent precipitation

Jakub Fišner (B3)

Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Many potential pharmaceutical ingredients (APIs) are poorly soluble in physiological solutions. To tackle this issue during early stages of drug development, APIs are commonly dissolved in dimethyl sulfoxide (DMSO). The issue arises upon later stages of development, with need of complete re-formulation, as DMSO cannot be further used. One possible solution is to use API nanoparticles already in the early stage, mitigating both the solubility issue, and the need of use of DMSO. Commonly, preparation of colloidally stable API nanosuspensions is a strenuous process, however, development of a screening device would greatly simplify this process. Such device, based on the principle of antisolvent precipitation method, should screen through combinations of APIs and stabilizers, offering insight into feasible combinations. A crucial element of the instrument is the mixing chamber where the precipitation occurs. This work analyses three geometries of mixing chambers: T-mixer, active mixer, and FDmiX, hope to further describe benefits of different mixing types & to suggest future optimization paths. The results are evaluated based on the polydispersity and particle mean size, and the up- and downsides of each mixing chamber are discussed.

Synthesis and physico-chemical characterization of carbon quantum dots for drug delivery application

Vladimir Nikolaev (B3)

Školitel: doc. Fatima Hassouna, Ph.D.

Carbon quantum dots (CQDs) are known to be rising stars of fluorescent carbon-based nanoparticles with an sp² conjugated core and a spherical structure of size diameter less than 10 nm. They have emerged as excellent fluorophores that possess functional groups mostly of hydroxyl, carbonyl, and carboxylic groups on their surface which spark off their high hydrophilicity and ability to interact with other species. They exhibit unique properties like good stability, biocompatibility, low cytotoxicity, wavelength excitation dependence and high surface area. Their properties lead to promising applications in biomedicine, especially drug delivery and theranostics. In this study, CQDs with an average size of 2 – 4 nm were prepared from branched polyethyleneimine using a simple and environmentally friendly approach, i.e., hydrothermal reaction. The synthesis parameters were optimized to achieve the best quantum yield, as this improves bioimaging and alleviates theranostic functionality of CQDs. Using several techniques, the formation of CQDs and their functional groups, particle size, surface charge and optical properties were investigated. Drug loaded CQDs using paclitaxel as a model drug were prepared and characterized.

Post-breakage growth of organic crystals

Bc. Karolína Slonková (M2)

Školitel: prof. Jerry Heng (doc. Ing. Ondřej Kašpar, Ph.D.)

Even though crystal breakage is a widespread phenomenon in industrial crystallisers, there is very limited information available on the subsequent growth of crystals. Therefore, this phenomenon is often neglected in process design, leading to unreliable predictions of the size and shape of the resulting crystals. This work focuses on the observation of the growth of such fractured organic crystals, specifically Glycine and Carbamazepine. The crystals were always cleaved into two parts and their subsequent growth was observed. In both cases, the fractured crystal was shown to behave differently from the intact crystal. After breaking, the crystal first regenerates to its original shape and only then does the crystal show overall growth, similar to the growth of a lizard's tail. This surprising phenomenon is therefore contrary to most theories dealing with crystal morphology and thus offers the possibility of improving the accuracy of modelling processes and predicting the resulting crystals.

Phase diagrams of microemulsion electrolytes in flow batteries

Bc. Alberto Taccori (M2)

Tutor: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

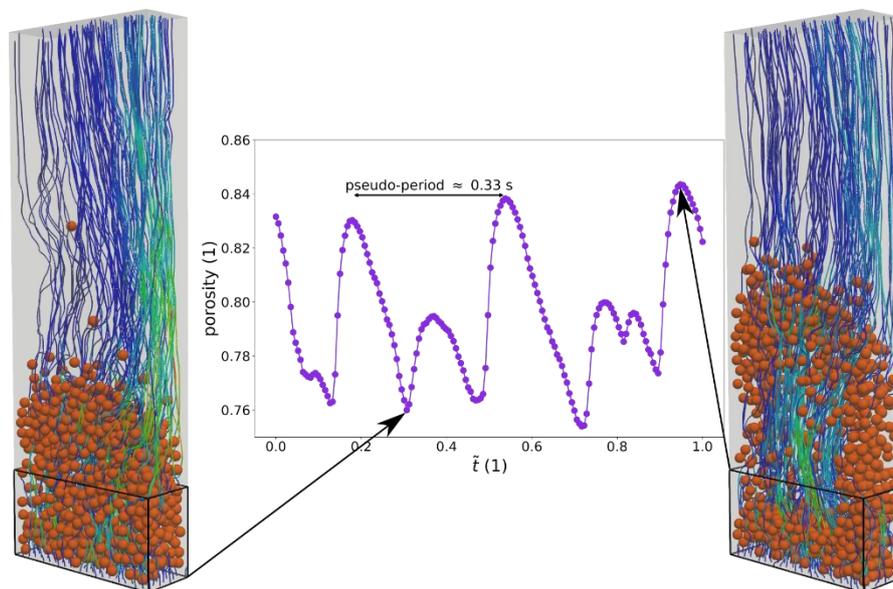
Redox flow batteries (RFBs) are gaining attention in stationary energy storage, especially from sustainable sources that experience power fluctuations. This work focuses on organic electrolytes for RFBs to avoid the high, volatile prices of inorganic ones due to scarcity. Organic compounds are potentially more ecological and locally producible alternatives; however, they often suffer from low solubility and stability in aqueous solutions. A significant challenge is finding electrolyte solutions with good ionic conductivity and high solubility of redox-active species. Microemulsion (mE) electrolytes show promise by decoupling solubility of redox-active materials (oil phase) from conductivity (aqueous phase). This study aims to build a phase diagram of an mE comprising water and toluene with various surfactants and co-surfactants, identifying conditions that create a Winsor III (bi-continuous) mE, maximizing oil content for higher energy density while maintaining sufficient ionic conductivity. The phase diagram will be constructed by measuring conductivity and turbidity while varying the solution's composition. Additionally, lab-scale single-cell tests will assess the impact of the supporting electrolyte on the performance and stability of selected organic RFB active species.

Development of a fully resolved digital twin for analysis of fluidized bed

Jarmila Terpáková (B3)

Školitel: Ing. Martin Isoz, Ph.D.

Fluid flows containing dispersed particles are omnipresent in both nature and industry; examples span from blood flow to large-scale fluidized bed reactors. Such processes are described primarily with empirical correlations. However, smaller-scale apparatuses or applications with non-spherical particles are still being optimized on a trial-and-error basis. Alternatively, detailed insight is possible via a fully resolved CFD-DEM approach, which couples computational fluid dynamics (CFD) with the discrete element method (DEM). Such an approach enables the construction of a high-fidelity digital twin for regions of interest in both large and micro-scale processes. In this work, we present a pilot study of a pseudo-2D fluidized bed, for which detailed experimental data are available. The in-house developed OpenHFDIB-DEM project, implemented in the OpenFOAM library, is employed. The initial results of this study focus primarily on system-defining criteria by analyzing pressure drop and particle distribution across the domain. Furthermore, the collision frequency is validated against experimental data from the literature.



Simulation study of catalytic systems for exhaust aftertreatment

Yeva Tsytko (B3)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí Ph.D.

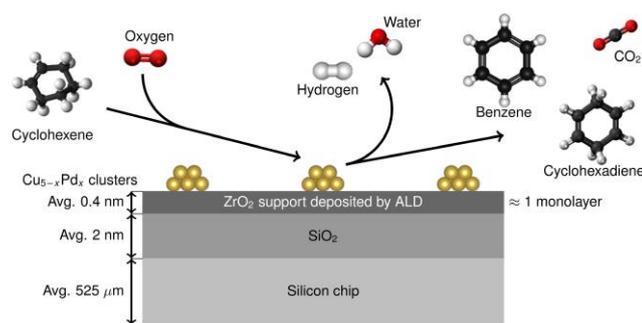
Diesel engines remain in demand in the automobile industry, but increasing ecological awareness and regulations require reducing exhaust emissions. The EPA, for instance, has implemented a program targeting a 50% reduction of NMOC and NO_x emissions for light-duty vehicles and a 33% reduction for heavy-duty vehicles by 2033. One of the technologies used to achieve this goal is SCR (Selective Catalytic Reduction), which reduces NO_x emissions through reduction with oxygen and ammonia. In addition to this main reaction, other reactions occur in the system, including the oxidation of CO, NO, C₃H₆ and NH₃. Temperature and inlet gas composition affect ongoing reactions and NO_x conversion. Kinetics of these side reactions were studied using a mathematical model, using inlet and outlet data (temperature, gas flow and component concentrations) measured throughout the experiment. The obtained simulation results predict the dependence of conversion on temperature for each component, and these are compared to the measured data. To fit the simulation output to the experimental data, the reactor geometry was adjusted according to the actual system studied and pre-exponential factors of reaction kinetic constants were adapted. The tailored model provides conversions close to the measured data.

Atom by Atom Built CuPd Pentamer Clusters for Oxidative and Non-Oxidative Cyclohexene Dehydrogenation

Petr Víték (B2)

Školitel: Ing. Stanislav Valtera

The subnanometer size of the clusters grants them different properties compared to bulk materials, owing to quantum effects, which become pronounced at this scale. Those properties depend not only on the cluster composition, but also on the cluster size, offering a vast possibility of modifying their behavior. Moreover, the cluster-support interactions have a significant effect on the final properties of the nanocatalyst by influencing the charge transfer between the cluster and the support providing an additional option to fine-tune the cluster-based properties. In the present study, atomically precise $\text{Cu}_{5-n}\text{Pd}_n$ ($0 \leq n \leq 5$) clusters deposited on ultra-thin zirconia (ZrO_2) support prepared by atomic layer deposition (ALD), were tested during cyclohexene dehydrogenation. To investigate the sole effect of composition on the activity and selectivity of the nanocatalyst, the cluster size (i.e. total of 5 atoms) and metal loading were kept constant for each sample. Swapping an atom of Cu for Pd in a cluster had a significant effect on the catalytic properties, altering the activity while maintaining high selectivity toward benzene (above 98 %). The results revealed that under given reaction conditions, which were set for oxidative dehydrogenation (ODH), the reaction proceeded as a combination of oxidative and non-oxidative dehydrogenation (DH). By swapping one atom of Pd in the Pd_5 cluster with a Cu atom, it is possible to switch the reaction mechanism between ODH and DH.



Schematic representation of the dehydrogenation of cyclohexene on the surface of the nanocatalyst. Cyclohexene is converted to benzene and cyclohexadiene during which H_2 , CO_2 and H_2O are formed.

Chemické inženýrství II

MÍSTO: BS4

KOMISE

Předseda komise: doc. Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.

Členové komise:

- Ing. Vladislav Nevoral, Ph.D.
- Ing. Miroslav Večeřa
- Ing. Aleš Palkovič
- Ing. Jiří Perner
- Ing. Tomáš Jirkal (Zentiva)
- Ing. Anastasia Vulakh (PRO.MED.CS)
- Ing. Zdeněk Mühlhauser (Orlen Unipetrol)

SEZNAM SOUTĚŽÍCÍCH

- **Michael Křivan**, B2, Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D., *Optimalizace nebulizace nanoformulací pro inhalační podání léčiv*
- **Kateřina Zedníčková**, B3, prof. Ing. Michal Příbyl, Ph.D., *Matematické modelování kontinuální elektroforetické separace enantiomerů kyseliny mandlové*
- **Adrián Laco**, B2, Ing. Miroslav Večeřa, *Fluidná lož jako alternativa k sprejovému sušení na výrobu amorfných pevných disperzií*
- **Žofie Plchutová**, B2, Ing. Petr Mazúr, Ph.D., *Inovované inertní 3D elektrody průtočných baterií s karbonizovanými polymerními nano-vláknky*
- **Jakub Rýc**, B3, Ing. Martin Isoz, Ph.D., *Pečení chleba: analýza citlivosti multifyzikálního CFD modelu*
- **Vanesa Virsiková**, B3, Prof. Dr. Ing. Juraj Kosek, *Combining simulation and experimental techniques to study diffusion in polymer melts*
- **Veronika Rychlá**, B3, Ing. Lukáš Valenz Ph.D., *Studium závislosti k_{Ga} na difúzním koeficientu na výplni MellapakPlus 452.Y*
- **Jiří Polách**, B2, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D., *Kinetika deaktivace Pd/AEI zeolitu pro adsorpci NOx ve výfukových plynech*
- **Vít Večerník**, B2, Ing. Lucie Kubíčková, *Metoda vnořené hranice s turbulentními modely Reynoldsova středování: Verifikace a validace*
- **Jan Korbel**, B3, doc. Ing. František Rejl, Ph.D., *Optimalizace procesu elektrodialýzy pro recyklaci lithium-iontových baterií*

Optimalizace nebulizace nanoformulací pro inhalační podání léčiv

Michael Křivan (B2)

Školitel: Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.

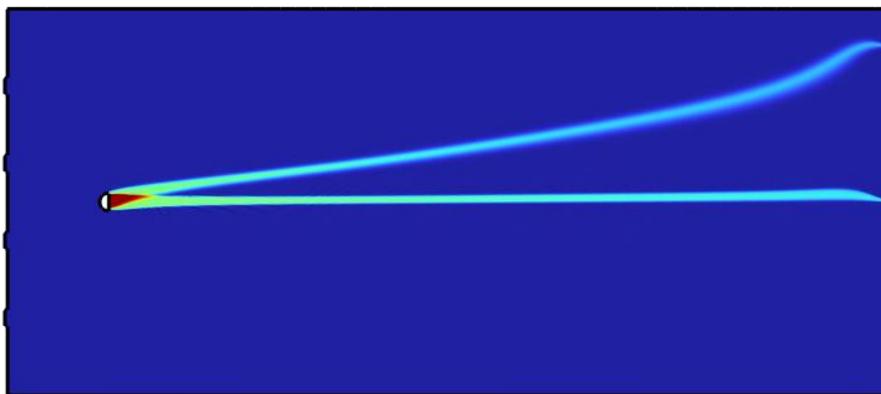
Inhalační podání léčiv může výrazně zvýšit biologickou dostupnost špatně rozpustných molekul. Cílem této práce je proto prozkoumat nebulizaci, jeden z možných procesů tvorby aerosolu, jako aplikační přístup pro inhalační podání nanosupenzí léčiv. Metodou mokrého mletí byly připraveny nanokrystaly kurkuminu jakožto vhodné modelové látky s nízkou vodnou rozpustností a špatnou orální biologickou dostupností. Tyto nanokrystaly byly stabilizovány fosfolipidy běžně zastoupenými v plicním surfaktantu, díky čemu se dá očekávat vysoká biokompatibilita s plícemi. Aerosolizace vodní disperze nanokrystalů byla provedena pomocí kompresorového nebulizátoru Laica NE2013, přičemž velikost částic aerosolu tvořených nanokrystaly ve vodních kapkách byla měřena kaskádovým impaktorem. Cílem bylo produkovat částice o vhodné velikosti pro inhalační podání do plic (tj. 1–5 μm), čehož lze dosáhnout úpravou parametrů, jako je koncentrace kurkuminu, viskozita nosného média, velikost nanočástic či přítomnost aditiv. Depozice částic v plicích byla vyhodnocována pomocí modelu Multiple-Path Particle Dosimetry (MPPD), který umožňuje vypočítat dávku deponovanou v jednotlivých částech dýchacího traktu.

Matematické modelování kontinuální elektroforetické separace enantiomerů kyseliny mandlové

Kateřina Zedníčková (B3)

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

Separace enantiomerů z racemických směsí hraje důležitou roli v oblastech, jako jsou farmacie a potravinářství, jelikož každý z enantiomerů může vykazovat odlišnou biologickou aktivitu. Jedná se však o náročný a nákladný proces. Tradičně se k separacím enantiomerů využívají diskontinuální chromatografické nebo elektroseparační techniky. Jedním z alternativních přístupů je využití specifické vazby jednoho z enantiomerů na chirální selektor a následná kontinuální separace obou izomerů v elektrickém poli. V této práci je modelována separace enantiomerů kyseliny mandlové, kdy je jedna forma selektivně vázána na derivát β -cyklodextrinu, čímž se významně sníží její elektroforetická mobilita. Směs enantiomerů je přivedena do zařízení s elektroforézou ve volném toku (FFE), ve kterém se složky rozdělí podle své pohyblivosti v elektrickém poli. Vyvinutý matematický model umožňuje vypočítat rychlostní a tlakové pole v mikrofluidním zařízení, a také rozložení elektrického potenciálu a koncentrace složek (kationt a aniont nosného elektrolytu, jedna či obě formy kyseliny mandlové) uvnitř separátoru. Model byl použit na objasnění vlivů koncentrace nosného elektrolytu a vloženého napětí na separační schopnosti zařízení. Získaná data byla následně vyhodnocena a porovnána s výsledky experimentů.



Fluidná lož ako alternatíva k sprejovému sušeniu na výrobu amorfných pevných disperzií

Adrián Laco (B2)

Školiteľ: Ing. Miroslav Večeňa

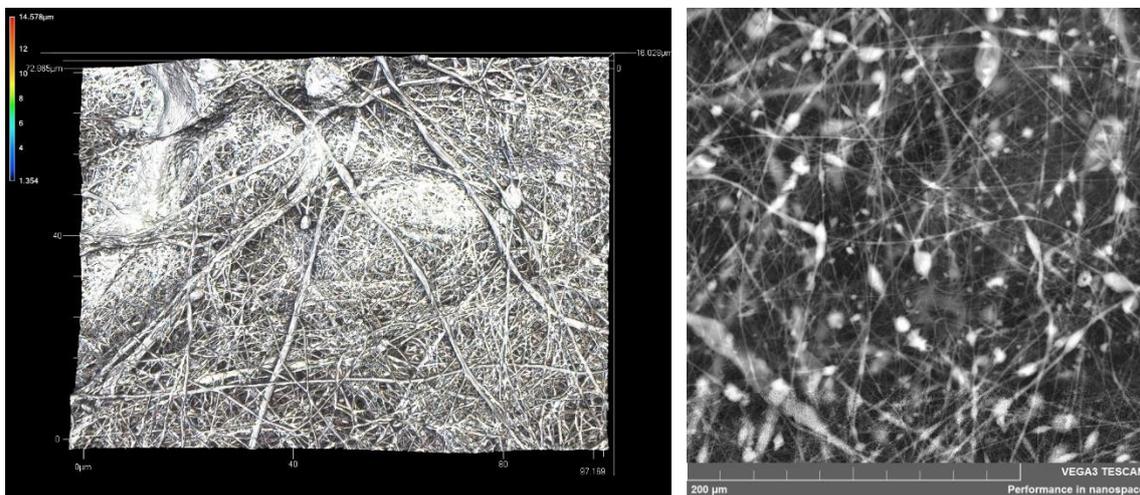
Amorfné pevné disperzie sú jednou z možností zvýšenia biodostupnosti liečiv, ktoré sú nerozpustné alebo málo rozpustné vo vode. Prevod liečiv z kryštalickej formy do amorfnej sítě zvyšuje ich rozpustnosť, no zároveň spôsobuje nižšiu stabilitu, čo predstavuje problém pri ich formulácii. Riešením môže byť stabilizácia pomocou polymérov, ktoré v spojení s účinnou látkou tvoria amorfnú pevnú disperziu (ASD). Moja práca sa zameriava na prípravu ASD pomocou dvoch metód: sprejovej sušiarne a fluidnej lože. Zatiaľ čo sprejová sušiareň je praktická v laboratóriu, fluidná lož sa častejšie využíva v priemysle pre redukciu krokov pri ďalšom spracovaní produktu a svoju schopnosť homogénne nanášať funkčné vrstvy na častice. Na prípravu ASD som vybral kombináciu modelového liečiva a troch vhodných polymérov. Po príprave vzoriek na sprejovej sušiarne som overil ich amorfné vlastnosti pomocou röntgenovej práškovej difrakcie (XRPD). V ďalších fázach mojej práce sa plánujem zamerať na charakterizáciu pripravených amorfných disperzií a reprodukciu ich vlastností na fluidnej loži.

Inovované inertní 3D elektrody průtočných baterií s karbonizovanými polymerními nanovláknky

Žofie Plchutová (B2)

Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Se zvětšujícím se podílem obnovitelné energie v celosvětových dodávkách elektřiny narůstá potřeba flexibilních a levných technologií k akumulaci energie. Jedním z předních kandidátů jsou redoxní průtočné baterie (RPB), pro něž jsou charakteristické nehořlavost a prostorové oddělení skladování a konverze energie. Nejrozšířenějším a v průmyslu již využívaným typem těchto baterií jsou vanadové RPB, které vynikají zejména svou dlouhodobou životností. Přes všechny pokroky v posledních desetiletích mají VRFB stále výrazné nedostatky, jako je například nízká výkonová hustota, což vede k velkým a drahým bateriovým svazkům. Cílem práce je zvýšení katalytické aktivity porézních 3D plstěných elektrod na bázi karbonizovaného polyakrylnitrilu (PAN). Prováděli jsme charakterizaci vzorků nanovláknenných elektrod (připravených u partnera SPUR a.s. metodou electrospinningu) v laboratorním článku VRFB. Nanovrstva byla aplikována na zápornou elektrodu, kde je kinetika reakce limitujícím faktorem. Fyzikálně-chemická charakterizace proběhla pomocí 3D laserového mikroskopu, SEM a N₂ fyzisorpce (metoda BET). Byl sledován vliv plošné hmotnosti a karbonizačních podmínek nanovláknenné vrstvy na relevantní vlastnosti.



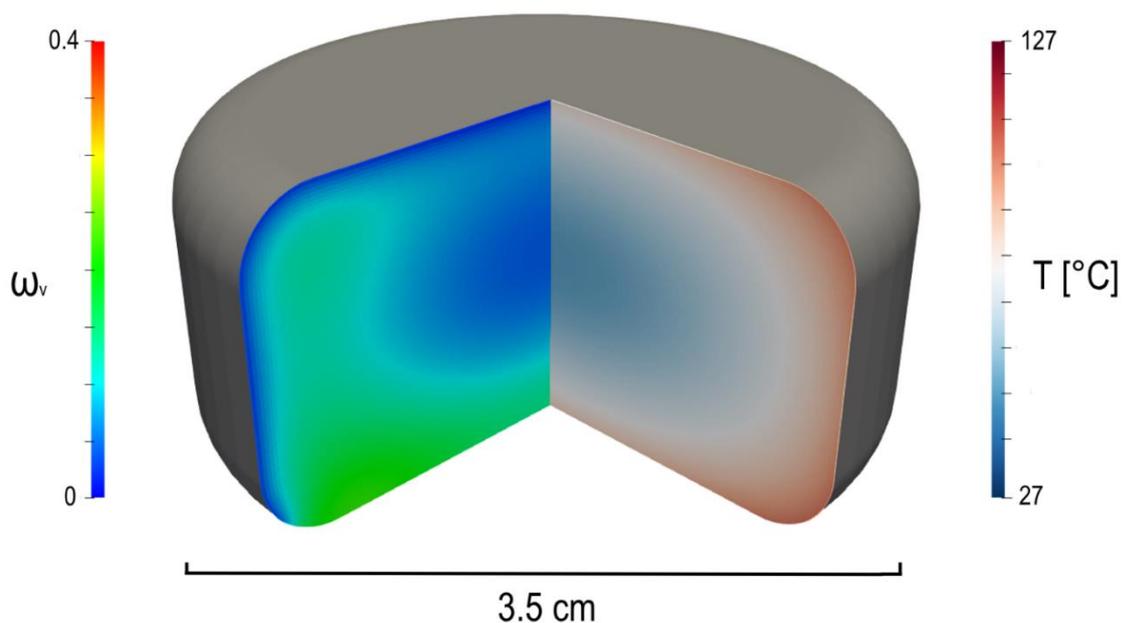
Obrázek 1: Snímky nanovláknenné vrstvy karbonizovaného PAN z laserového 3D mikroskopu (vlevo) a elektronového mikroskopu (vpravo).

Pečení chleba: analýza citlivosti multifyzikálního CFD modelu

Jakub Rýc (B3)

Školitel: Ing. Martin Isoz, Ph.D.

Chléb je jednou z nejstarších a nejrozšířenějších potravin na světě, přičemž jeho výroba, zahrnující složitý proces kynutí a pečení, je součástí lidské kultury již tisíce let. Přestože se jedná o tak běžný produkt, samotný proces pečení zůstává relativně málo prozkoumaný, zejména z důvodu komplexní interakce probíhajících fyzikálních a chemických jevů. Naším dlouhodobým cílem je vytvořit detailní model pečení chleba založený na metodách výpočetní dynamiky tekutin. Pomocí vyvinutého modelu se následně budeme snažit snížit spotřebu energie v pekárně při zachování kvality výsledného produktu. V této práci si dáváme za cíl analyzovat citlivost vyvíjeného modelu na změny obtížně dohledatelných transportních parametrů uvnitř chleba. Tato citlivostní studie nám může napovědět, které procesy jsou pro pečení rozhodující a je nutné je řešit s nejvyšší prioritou.



Combining Simulation and Experimental Techniques to Study Diffusion in Polymer Melts

Vanesa Virsiková (B3)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

The study of diffusion in polymer melts is essential for understanding and optimising extrusion, moulding, and other high-performance applications involving polymer materials. This research presents a novel approach combining an experimental approach with advanced computational models. This dual approach enhances our ability to predict and control how polymer melts behave under different processing conditions. In my work, I developed and built a cell that enables precise observation of sorption and desorption phenomena within polymer melts. This pressure-isolated and temperature-isolated setup replicates industrially relevant conditions. Through collaboration with industry partners, the findings from these experiments actively inform about the conditions of the mentioned production, demonstrating the practical relevance of this work. To quantify diffusion, I have implemented a simulation model specifically programmed to calculate the diffusion coefficient from experimental data obtained. The goal of this research is to create a framework for analysing and optimising the behaviour of polymer melts, benefiting both theory and industry. By offering insights into polymer structure under various conditions, this work supports industries in defining optimal processing conditions to improve quality, efficiency, and sustainability.

Studium závislosti k_{Ga} na difúzním koeficientu na výplni MellapakPlus 452.Y

Veronika Rychlá (B3)

Školitel: Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.

V průmyslové praxi se v absorpčních kolonách využívá více než 1000 systémů kapalina – plyn. Je tedy nemožné u všech naměřit nezbytné hydraulické a transportní charakteristiky pro výpočet potřebného průměru a výšky zařízení. Proto se často schyluje k predikci z empirických a semiempirických modelů, které jsou mnohdy příliš konzervativní a nepřesné při přenosu na jiný systém, než na kterém byly verifikovány. Pro zlepšení správnosti těchto aproximací je nutná znalost chování odlišných systémů. V této práci jsem se zaměřila na závislost objemového koeficientu přestupu hmoty v plynné fázi, k_{Ga} na difúzním koeficientu. Měření bylo provedeno na systému látek $\text{NH}_3\text{-H}_2\text{SO}_4$ a vypočtené hodnoty k_{Ga} byly porovnány s dřívějším měřením na systému látek $\text{SO}_2\text{-NaOH}$ na výplni MellapakPlus 452.Y. Rozdíl mezi těmito konkrétními systémy spočívá jen v odlišném difúzním koeficientu amoniaku a oxidu siřičitého ve vzduchu. Závislost k_{Ga} na difúzním koeficientu je v řadě využívaných modelů pro predikci k_{Ga} mocninná s exponentem výrazně vyšším, než ukazují roky výzkumu v laboratoři sdílení hmoty na VŠCHT. Tato práce byla motivována potřebou doplnit databázi měření k_{Ga} na výplni MellapakPlus 452.Y o systém amoniak-kyselina sírová ve snaze prohloubit znalosti o závislosti k_{Ga} na difúzním koeficientu.

Kinetika deaktivace Pd/AEI zeolitu pro adsorpci NO_x ve výfukových plynech

Jiří Polách (B2)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, PhD.

Znečištění ovzduší silniční dopravou představuje významný environmentální problém. Pro redukci emisí oxidů dusíku (NO_x) se u dieselových motorů používá selektivní katalytická redukce (SCR). Ta probíhá při teplotách nad 200°C. Během studeného startu však SCR katalyzátor není aktivní, oxidy dusíku prochází systémem bez reakce, a znečišťují tak prostředí. Aby se zabránilo tomuto problému, může se před SCR přidat pasivní adsorbér NO_x (PNA) obsahující atomy Pd ukotvené ve struktuře zeolitu SSZ-13 nebo AEI. Tento materiál při nízké teplotě váže NO_x a po ohřevu na provozní teplotu SCR katalyzátoru je opět uvolní, aby mohly být účinně zredukovány. Tato práce se zabývá rozšířením matematického modelu PNA o deaktivaci způsobenou přítomností dalších složek plynu, zejména CO. Deaktivací proces zahrnuje migraci atomů Pd ze struktury zeolitu do nanočástic na jeho povrchu, což vede ke ztrátě aktivních míst pro adsorpci NO_x. Tento proces je částečně vratný – při vyšších teplotách za oxidačních podmínek může docházet k redisperzi Pd. Pro vývoj modelu jsou využita experimentální data získaná na práškovém katalyzátoru Pd/AEI. Vyvinutý model umožňuje předpovědět vývoj aktivity v závislosti na historii provozních podmínek, a lépe tak řídit funkci celého systému.

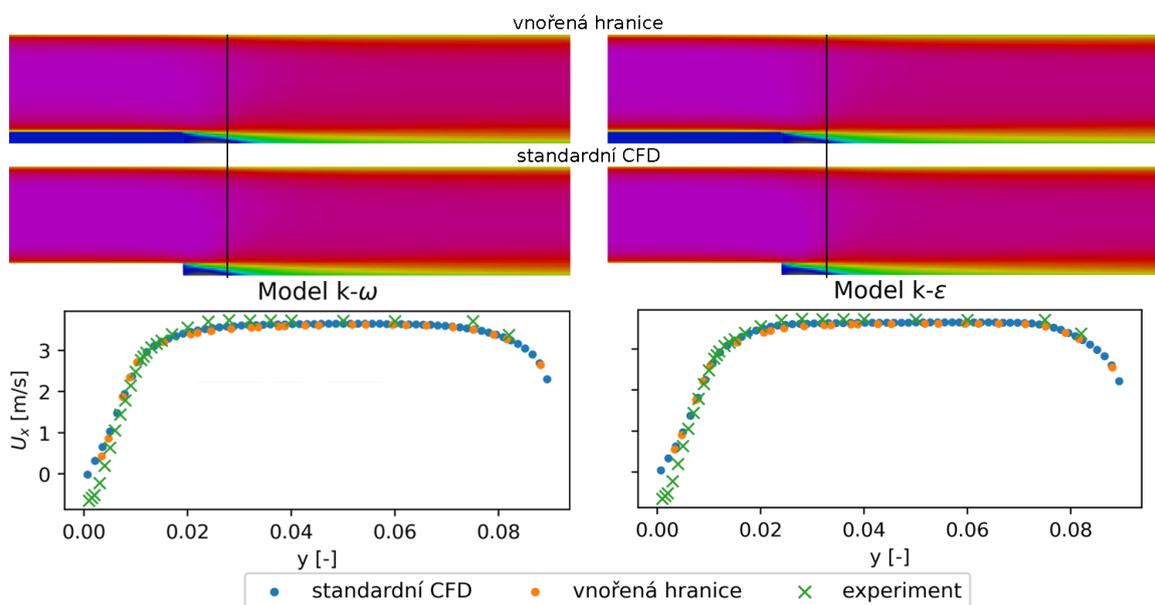
Metoda vnořené hranice s turbulentními modely

Reynoldsova středování: Verifikace a validace

Vít Večerník (B2)

Školitel: Ing. Martin Isoz, Ph.D.

V naší laboratoři vyvíjíme metodu vnořené hranice, která umožňuje simulovat proudění tekutin v interakci s pevným tělesem bez nutnosti přizpůsobovat výpočetní síť geometrii tělesa. V minulém roce byla naše metoda vnořené hranice propojena s turbulentními modely založenými na Reynoldsově středování, ale vzhledem k nestandardnímu přístupu k pevným tělesům musely být turbulentní modely a okrajové podmínky, tzv. stěnové funkce, upraveny. Hlavním cílem této práce je verifikovat a validovat tuto metodu na standardizovaných testech. Konkrétně jsme se zaměřili na test označovaný jako “backward facing step” s výsledky převzatými z databáze spravované NASA. Porovnávali jsme vždy metodu vnořené hranice se standardním přístupem k simulaci proudění a experimentálními daty. Test jsme prováděli v několika variantách s různým zahuštěním sítě u stěn a různými turbulentními modely. Výsledky ukazují, že naše metoda vnořené hranice se chová podobně jako standardní přístup. Průměrná odchylka v porovnávaných hodnotách rychlosti se pohybovala okolo 2 %. Metoda je tedy připravená na další vývoj a aplikaci ve složitějších simulacích.



Optimalizace procesu elektrodialýzy pro recyklaci lithium-iontových baterií

Jan Korbel (B3)

Doc. Ing. František Rejl, Ph.D.

Svět čelí problémům spojeným s rostoucí produkcí spotřební elektroniky, s přechodem na elektromobilitu, vzrůstajícím množstvím použitých baterií a těžbou vzácných kovů. Snaha o nalezení východiska z této složité situace je veliká, a proto je kladen čím dál větší důraz na recyklaci. V laboratoři Sdílení hmoty pracujeme na recyklaci aktivního katodového materiálu z lithium iontových baterií. Ukázalo se, že použití elektrodialýzy s bipolárními membránami umožňuje uzavřít hydrometalurgický recyklační proces pro lithium iontové baterie. Jedná se totiž o efektivní způsob pro zpracování roztoku síranu lithného vznikajícího při rozpouštění a srážení kovů z katodového materiálu zpět na výchozí rozpouštěcí a srážecí činidlo (vodný roztok kyseliny sírové a hydroxidu lithného). Cílem mé práce je optimalizace procesu elektrodialýzy za účelem 1) dosažení co nejvyšších výstupních koncentrací kyseliny sírové a hydroxidu lithného; 2) snížení kontaminace produktů surovinou. Koncentrace vzniklých roztoků je zapotřebí alespoň na úrovni těch, které používáme v předešlém rozpouštění a srážení. Kontaminaci produktů je třeba snížit na takovou úroveň, aby negativně neovlivňovala rozpouštěcí a srážecí proces a nekomplikovala navazující filtraci.

Chemické inženýrství III

MÍSTO: BS9

KOMISE

Předseda komise: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Členové komise:

- Ing. Lucie Vobecká, Ph.D.
- Ing. Jan Trnka
- Ing. Martin Roudný
- Bc. Jan Halouzka (Lovochemie)
- Ing. Natálie Václavíková (MemBrain)
- Ing. Oskar Levý (Synthos)

SEZNAM SOUTĚŽÍCÍCH

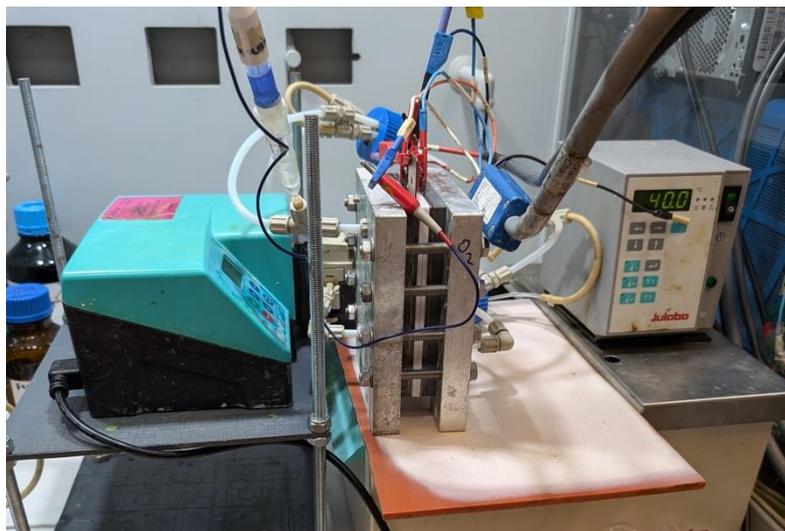
- **Michal Števuliak**, B3, Ing. Petr Mazúr Ph.D., *Vplyv teploty a pH na stabilitu kladného elektrolytu použitého v prietočných batériových článkoch prevádzkovaných pri vyšších teplotách*
- **Lenka Vyhliđalová**, B2, Ing. Denisa Lizoňová, Ph. D., *Interakce kurkuminových nanokrystalů s plicními buňkami*
- **Jiří Bohuslav**, B3, doc. Dr. Ing. Milan Jahoda, *Ověření designu pojistných ventilů v petrochemii*
- **Adam Opravil**, B3, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D., *Výzkum a vývoj pevných formulací z glukanových částic*
- **Barbora Šašková**, B3, Ing. Filip Zavřel, *Příprava kompozitů kontrastní látky a glukanových částic*
- **Yelyzaveta Demianenko**, B3, doc. Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D., *Preparation and Characterization of Si/Polyaniline Core-Shell Nanoparticles for Lithium-Ion Battery Applications*
- **Lukáš Bukač**, B3, Ing. Lucie Mašková, Ph.D., *Fine-tuning of 3D bioprinted films for in-situ synthesis and release of bactericides*
- **Jan Pchálek**, B3, Ing. Martin Krov, *Konstrukce statického mísiče pro zařízení Kuličkomat*
- **Hoang Phi Hung Do**, B3, prof. Ing. Petr Kočí Ph.D., *Matematické modelování adsorpce a desorpce NOx na zeolitovém katalyzátoru Pd/SSZ-13*
- **Filip Kříž**, B3, doc. Ing. Viola Tokárová Ph.D., *Optimalizace přípravy mikrostrukturovaných povrchů pomocí laserové fotolitografie*

Vplyv teploty a pH na stabilitu kladného elektrolytu použitého v prietochných batériových článkoch prevádzkovaných pri vyšších teplotách

Michal Števuliak (B3)

Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Redoxné prietokové batérie (RPB) sú sľubným typom akumulátora na stacionárne uloženie energie. Oproti Li-ion batériám majú síce nižšiu hustotu energie, no vďaka vodným elektrolytom sú RPB prakticky nehorľavé a prietochné usporiadanie umožňuje nezávislé škálovanie výkonu a kapacity batérie. Zvýšením prevádzkových teplôt nad 40 °C (čo je súčasný teplotný limit vanádových elektrolytov) je možné zvýšiť účinnosť batérie a využiť tepelnú kapacitu elektrolytu na akumuláciu tepla. Po boku štđ. riešení na báze iónov vanádu sú skúmané aj rôzne tepelne stabilné organické redoxné látky na použitie v zápornom elektrolyte. Naša práca je zameraná na posúdenie stability aktívnych látok kladného elektrolytu na báze hexakvanoželeznatanových iónov pri zvýšených teplotách v neutrálnom a alkalickom prostredí. Chemická stabilita v teplotnom rozmedzí 20 - 80 °C pri rôznych pH bola vyhodnocovaná z priebežných analýz elektrolytov pomocou UV-VIS spektroskopie. Elektrochemická stabilita bola študovaná v laboratórnej RPB so symetrickým zložením elektrolytov v 3-elektrodovom zapojení metódou kombinovaných nabíjajúcich-vybíjajúcich cyklov. Zvýsledkov bolo identifikované optimálne zloženie študovaného elektrolytu na účinnú a dlhodobú prevádzku organickej RPB.



Obr 1. Symetrický článok RPB použitý na sledovanie elektrochemickej stability.

Interakce kurkuminových nanokrystalů s plicními buňkami

Lenka Vyhlídalová (B2)

Školitel: Ing. Denisa Lizoňová, Ph. D.

Orálně podávaná léčiva často narážejí na problémy související s nízkou biologickou dostupností. To je způsobeno především jejich slabou rozpustností ve vodě, citlivostí na prostředí trávicího traktu a významným metabolismem při prvním průchodu játry (tzv. „first pass efekt“). Tyto faktory omezují efektivní transport léčiv přes gastrointestinální trakt. V tomto kontextu se jako vhodná alternativa jeví inhalační podání, které může zlepšit biologickou dostupnost léčiva a zároveň snížit množství nevyužité dávky, což by mělo mít pozitivní ekologický i ekonomický přínos. Projekt se zaměřuje na studium interakce kurkuminových nanokrystalů, modelových částic lipofilního léčiva, s plicními buňkami. Nanokrystaly kurkuminu (< 100 nm) byly připraveny metodou mokrého mletí a stabilizovány fosfolipidy dipalmitoylfosfatidylcholinem (DPPC) a dipalmitoylfosfatidylglycerolem (DPPG) (**Obr 1**), které se přirozeně vyskytují v plicním surfaktantu, a následně testovány na plicních buňkách. Pomocí resazurinového testu byla změřena bezpečná dávka kurkuminových nanokrystalů pro plicní buňky. Tato informace dále poslouží k návrhu experimentů zaměřených na hlubší porozumění interakcí nanokrystalů s plicní tkání.



Obr 1. Nanokrystal kurkuminu stabilizovaný DPPC, DPPG

Ověření designu pojistných ventilů v petrochemii

Jiří Bohuslav (B3)

Školitel: doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

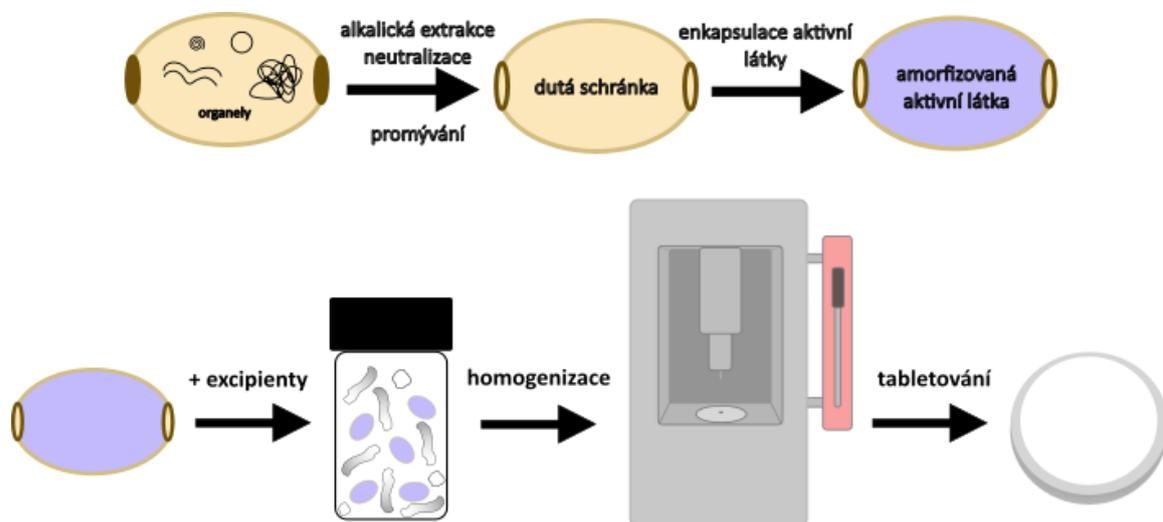
Práce se zabývá metodikou a praktickým provedením kontrolního výpočtu systému pojistných ventilů, které chrání proti přetlakování propylenovou kolonu DA-406 a některá další zařízení na ethylenové jednotce v areálu Chempark Záluží společnosti ORLEN Unipetrol RPA. Pojistné ventily jsou zásadním bezpečnostním prvkem v technologických a chemických výroбах, které mohou odtlakováním systému v potenciálně nebezpečné situaci předejít následkům přetlakování jako poškození zařízení, v krajních případech explozi nebo požáru. V práci jsou ukázány všechny kroky, které jsou pro kontrolní výpočet obecně požadované, včetně konkrétních postupů a výsledků v případě technologie výroby propylenu. Při výpočtu bylo postupováno dle metodiky American Petroleum Institute API 520 a po statistickém zpracování provozních dat byly v programu ASPEN Hysys simulovány možné výchylky od běžného provozu jak v ustáleném, tak dynamickém režimu.

Výzkum a vývoj pevných formulací z glukonových částic

Adam Opravil (B3)

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

Většina aktivních látek ve farmaceutickém průmyslu má nízkou rozpustnost ve vodě, což omezuje jejich účinnost při perorálním podání. Možným řešením jsou glukonové částice, které se připravují odstraněním vnitřních organel z kvasinek *Saccharomyces cerevisiae*. Tyto částice fungují jako biokompatibilní nosiče aktivních látek – udržují je v amorfní formě, což zvyšuje rozpustnost, a zároveň stimulují imunitní reakci. Má práce se zaměřuje na přípravu glukonových částic a zejména pak na jejich formulaci do tablet. Tablety umožňují snadno optimalizovat uvolňování účinné látky pomocí nastavení procesních parametrů a složením formulace. Jsou připravovány binární systémy glukonové částice – plnivo (mikrokrytalická celulóza/laktóza monohydrát), v různých poměrech a při použití odlišných lisovacích sil. Cílem je dosáhnout tablet s požadovanými mechanickými, dezintegračními a disolučními vlastnostmi. Z dosavadních testů pevnosti a dezintegrace vyplývá, že obě vlastnosti výrazně závisí na obsahu glukonových částic. Momentálně se zaměřuji na detailní studium dezintegrace, která bude následována disolučními testy s cílem vytvořit formulaci s volitelným disolučním profilem, nezávislým na vlastnostech samotné aktivní látky.



Příprava kompozitů kontrastní látky a glukanových částic

Barbora Šašková (B3)

Školitel: Ing. Filip Zavřel

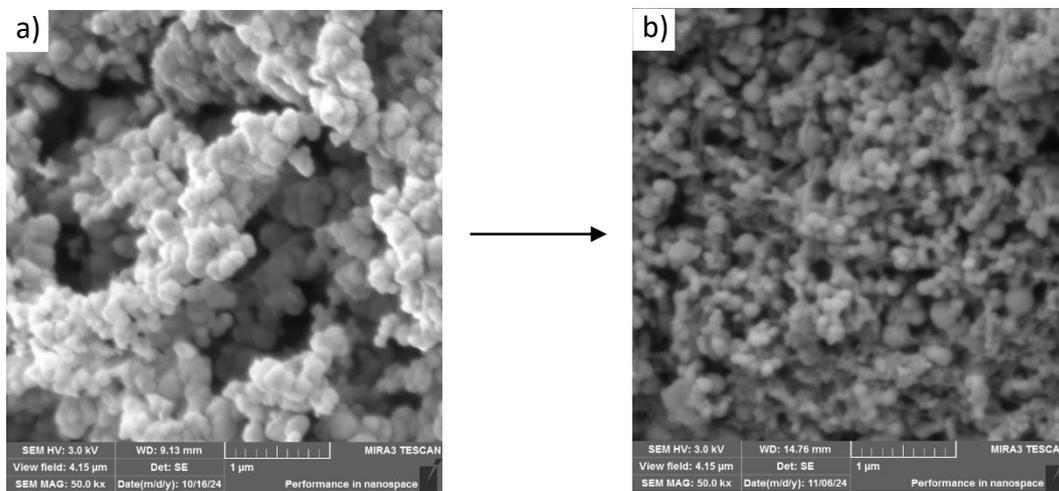
Glukanové částice (GPs), připravené pomocí alkalické a acidické extrakce z kvasinek *Saccharomyces cerevisiae*, se dají využít pro cílené doručování látek prostřednictvím fagocytózy. K vhodnému využití tohoto způsobu doručování je potřebné vytvoření ucelenějšího obrazu o jeho fungování. Pro to potřebujeme být schopni zobrazit a lokalizovat glukanové částice po jejich podání uvnitř organismů, což současně využívané metody neumožňují. Naším cílem je proto umožnit zobrazení glukanových částic pomocí tomografických metod, jež jsou schopny zobrazit nejen kontrast zapouzdřené látky uvnitř glukanových částic, ale i rozhraní jednotlivých tkání uvnitř organismů. Zásadní bylo zvolení vhodné kontrastní látky i metody pro její zapouzdření do glukanových částic, tedy vytvoření kompozitů kontrastní látky a glukanových částic. V rámci projektu byla nalezena vhodná kontrastní látka a vytvořen postup pro její zapouzdření do glukanových částic.

Preparation and Characterization of Si/Polyaniline Core-Shell Nanoparticles for Lithium-Ion Battery Applications

Yelyzaveta Demianenko (B3)

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

The rising need for energy storage across various applications requires developing batteries with enhanced durability, high energy density and long cycle life. Silicon (Si) is viewed as a promising anode material for next-generation lithium-ion batteries due to its high theoretical specific capacity ($\sim 3579 \text{ mAh g}^{-1}$), and abundance. However, Si-based anodes face issues due to the $\sim 300\%$ volume expansion of Si during the lithiation process, which leads to the fading of the battery capacity over repeated charge/discharge cycles. To address this issue, this study aims at developing Si/carbonized polyaniline (c-PANI) core-shell nanoparticles (CS NPs) for use in Si-based anodes. The c-PANI shell can play a key role in buffering the volume expansion of Si. Si/c-PANI CS NPs are synthesized by the polymerization of aniline monomers on the surface of Si nanocrystals, followed by carbonization of the resulting Si/PANI CS NPs (Figure 1). The effect of various experimental parameters, including the Si to PANI ratio and the carbonization time were analyzed to assess their influence on the morphology, textural properties, chemical structure, and electrical conductivity of the resulting material.



SEM pictures of a) Pure Si NPs (100 nm), and b) Carbonized Si/PANI (1:3) CS NPs

Fine-tuning of 3D bioprinted films for in-situ synthesis and release of bactericides

Lukáš Bukač (B3)

Školitel: Ing. Lucie Mašková, Ph.D.

The controlled release of bioactive compounds is essential for therapeutic applications. Allicin, a molecule found in freshly cut garlic, is known for its potent antimicrobial properties, though it degrades rapidly. By using hydrogels embedded with the allicin precursor *alliin* and the enzyme *alliinase*, it is possible to achieve environmentally-triggered, in-situ production of allicin. This is a promising approach to utilize the antimicrobial properties of allicin with the high precision needed for medical applications. This study focuses on alginate-gelatin hydrogels, their 3D bioprinting into thin, porous films, and their cross-linking strategy. Using these hydrogels, *alliin* and *alliinase* were immobilized within the 3D-printed structures, enabling the conversion of *alliin* to allicin upon rehydration of the film. The analysis included multiple cross-linking and printing options to enhance structural integrity, enzyme stability, and minimize premature allicin release during fabrication and storage. Additionally, we aimed to increase the triggered allicin release after rehydration and studied the storage stability of the films. Finally, the effectiveness of the films was demonstrated through antibacterial testing against *E. coli*. We believe this work has the potential to introduce new nature-inspired antibiotics, thereby contributing to the fight against microbial resistance.

Konstrukce statického mísiče pro zařízení Kuličkomat

Jan Pchálek (B3)

Školitel: Ing. Martin Krov

Současným problémem průmyslového provozu pilotního zařízení Kuličkomatu je termická degradace aktivně účinné látky (API). Tato práce se zabývá návrhem a konstrukcí statického mísiče pro Kuličkomat, vyvíjeného v rámci univerzitního spin-off projektu MarbleMat. Cílem Kuličkomatu je přenést přípravu lipidických formulací ve formě OilMarbles z laboratorního měřítka na průmyslové, s využitím ve farmaceutickém a potravinářském průmyslu. Významným přínosem lipidických formulací je vyšší biodostupnost API, snadná příprava a snížení tzv. food effectu. Navrhované řešení spočívá v použití statického mísiče a dvou tlakových nádob namísto aktuálně jedné nádoby, kde dochází k termické degradaci API. První nádoba obsahuje excipienty při 60–80 °C, zatímco druhá nádoba uchovává API v olejové fázi při 25 °C. Mísič obsahuje mísicí elementy vhodné pro laminární proudění (Reynoldsovo kritérium=7,5) a byl vyroben technologií MSLA. K ověření funkčnosti mísiče je použita vysokorychlostní kamera, která snímá výstupní potrubí z mísiče a také spektrofotometrická analýza. Další fáze zahrnují měření s různými průtokovými poměry a viskóznějšími látkami, návrh a testování různých typů mísičů, a finální instalaci a optimalizaci mísiče na zařízení Kuličkomat. Nakonec měření s komerčně používanými API a excipienty.

Matematické modelování adsorpce a desorpce NO_x na zeolitovém katalyzátoru Pd/SSZ-13

Hoang Phi Hung Do (B3)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

I přes rostoucí počet elektromobilů jsou dieselové motory stále nejvíce zastoupeným typem pohonu a v případě nákladních automobilů tomu tak bude i v delším časovém horizontu. Spalovací motory jsou bohužel zdrojem emisí škodlivých oxidů dusíku (NO_x), přičemž největším problémem je snížení emisí během studeného startu motoru, kdy ještě nefunguje katalyzátor pro redukci NO_x. To lze řešit pomocí pasivního adsorbéru NO_x (PNA), například typu Pd/SSZ-13, který byl zkoumán v rámci této práce. Při nižších teplotách (pod 200 °C) se oxidy dusíku vážou chemisorpcí na aktivní centra PNA a uvolňují se až během vyšších teplot, kdy už běží reakce pro jejich redukci na běžném katalyzátoru. V rámci této práce byl vytvořen matematický model, který popisuje adsorpci a desorpci oxidů dusíku na povrchu adsorbéru. Je zkoumáno vázání oxidů dusíku na různých aktivních centrech katalyzátoru a na základě dodaných experimentálních dat jsou nalezeny kinetické parametry pro jednotlivé děje. Vyvinutý model je schopný předpovídat průběh zachycení a uvolnění oxidů dusíku během studeného startu v závislosti na aktuální vývoji teploty, průtoku a koncentrací na vstupu do zařízení.

Optimalizace přípravy mikrostrukturovaných povrchů pomocí laserové fotolitografie

Filip Kříž (B3)

Školitel: doc. Ing. Viola Tokárová, Ph.D.

Konvenční metody boje proti bakteriím, jako jsou antibiotika, ztrácejí účinnost, což vyvolává potřebu hledat nová řešení. Inspirací pro naši práci jsou přírodní antibakteriální povrchy, konkrétně struktura křídel vážek a cikád. Tato práce se zaměřuje na přípravu mikrostruktur, které napodobují tyto přírodní povrchy, využitím metody laserové fotolitografie a optimalizací celého procesu. Pro přípravu mikrostruktur byly zvoleny tvary kruh a obdélník, právě z důvodu usnadnění následné optimalizace. Hlavním sledovaným parametrem byla dávka osvitů, při jejíž změně byly pozorovány největší změny tvaru samotných struktur. Připravené struktury byly charakterizovány konfokální a elektronovou mikroskopií spolu s měřením kontaktního úhlu. V dalším kroku výzkumu se zaměříme na aplikaci bakterií na tyto mikrostrukturované povrchy a sledování jejich chování.

Chemické inženýrství IV

MÍSTO: B06

KOMISE

Předseda komise: prof. Ing. Dalimil Šnita, CSc.

Členové komise:

- Ing. Lizoňová Denisa, Ph.D.
- Bc. M.Sc. Adam Tywoniak
- Ing. Adam Bouz
- Ing. Václav Šmíd (Mondi)
- Ing. Marek Bobák, Ph.D. (MemBrain)

SEZNAM SOUTĚŽÍCÍCH

- **Kryštof Luhan**, B3, Ing. Martin Balouch, Ph.D., *Liposomes with new ionizable lipidoids for pharmaceutical applications*
- **Vilém Jančík**, B3, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek, *Modelling polymer dissolution for the recycling of mass-produced plastics*
- **Antonín Saifrt**, B3, Ing. Jan Haidl, Ph.D., *Vývoj procesu kombinované koagulace pro výrobu pitné vody*
- **Martin Drnec**, B3, Ing. Petr Mazúr, Ph.D., *Optimization of the electrolyte composition of a zinc-iodine flow battery*
- **Adam Labach**, B3, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D., *Simulace proudění a reakce ve 3D rekonstruované stěně porézního filtru*
- **Vojtěch Dvořák**, B3, Ing. Pavel Zelenka, *Vývoj zjednodušeného modelu plic pro studium depozice inhalačních léčiv*
- **Vojtěch Šebek**, B3, Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D., *Optimalizace magnetoliposomů pro biomedicínské aplikace*
- **Daniela Marcalíková**, B3, doc. Ing. Jitka Čejková, Ph.D., *Studium morfologie chemobrionických struktur pomocí rentgenové mikrotomografie*
- **Filip Drešr**, B3, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek, *Turbidity, Rheology and stability measurements for Solvent-Based recycling*
- **Gréta Iliášová**, B3, prof. Ing. Petr Kočí Ph.D, *Vylepšenie kontaktov vodičov na elektródach palivového článku.*

Liposomes with new ionisable lipidoids for pharmaceutical applications

Kryštof Luhan (B3)

Školitel: Ing. Martin Balouch, Ph.D.

One of the most prominent issues for humankind over the past few years was the COVID–19 pandemic. Among the most effective methods used to counter the disease were the vaccines, some of which used lipidic nanoparticles (LNPs) with ionisable lipids as carriers of mRNA. Motivated by the limited range of available lipids, a research team at IOCB CAS recently produced a new lipid-like molecule, naming it XMaN6. This molecule contains an adamantane structure with three tertiary amine chains (pK_a around 6.2), capable of obtaining a charge depending on surrounding pH, resulting in a bulk release of the encapsulated nucleic acid (NA). Initial results of XMaN6-based LNPs with different NAs, incl. mRNA, were promising, and raised a question of possible use for the XMaN6 in other targeted drug delivery systems as well. Nanoparticles best known for applications in this field are liposomes. Thus, the focus of this work is on preparing liposomes containing the new XMaN6 molecule, examining their stability and permeability, and comparing them with established compounds. The results also may offer a possible solution for some limitations of liposomal formulations, such as their inability of containing active pharmaceutical ingredients with specific properties within the structure.

Modelling polymer dissolution for the recycling of mass-produced plastics

Vilém Jančík (B3)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

One of the challenges in plastics recycling is producing a high-quality product with low energy consumption. Recycling methods based on selective polymer dissolution can complement mechanical recycling, which often downgrades the recycled polymer. Solvent-based recycling offers a solution: it can be used to extract additives from polymers, separate composites into individual components, and sort polymer chains by length, thereby maintaining or upgrading the quality of the recyclate. However, for the process to be efficient, selective solvents are required, and it should operate at temperatures that avoid polymer chain degradation. The focus of the broader project in our research group is on processing polyolefin, polyester, and polyamide waste. In this work, we focused on screening of suitable solvents for a specific polymer. To obtain predictions of solubility based only on molecular structure, we utilized the COSMO-SAC model, which combines a quantum chemistry approach with statistical thermodynamics to calculate activity coefficients in the liquid-like phase. While this computational approach does not provide precise solubility values, the goal is to aid in selecting suitable solvents and temperature ranges, which will then be experimentally verified.

Vývoj procesu kombinované koagulace pro úpravu pitné vody

Antonín Saifrt (B3)

Školitel: Ing. Jan Haidl, Ph.D.

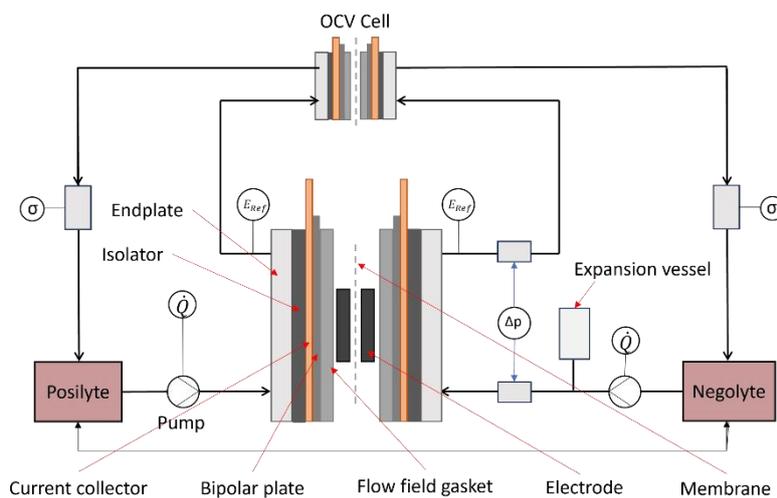
Se zvyšujícím se obsahem organické hmoty ve zdrojích pitné vody je nutné hledat efektivnější způsoby na její odstranění. Nejčastěji používaným procesem je koagulace, při které se organická hmota naváže na vločky koagulačního činidla, které se následně odfiltrují. Tato práce se zabývá zvýšením účinnosti klasické chemické koagulace její kombinací s účinnější, ale nákladnější elektrokoagulací. Při té se koagulační činidlo dodává pomocí přímého elektrolytického rozpouštění kovové elektrody. Elektrokoagulace se v současné době využívá především k čištění odpadních vod, její využití pro průmyslovou úpravu pitné vody je vzácné, zejména z důvodu nízké elektrické vodivosti surové vody zvyšující energetickou náročnost procesu. Nicméně, kombinací chemické koagulace s elektrokoagulací je možné energetickou náročnost procesu snížit na přijatelnou úroveň umožňující aplikaci vyvinuté metody pro průmyslovou úpravu pitné vody.

Optimization of the electrolyte composition of a zinc-iodine flow battery

Martin Drnec (B3)

Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Zinc-iodine hybrid flow batteries are emerging as a promising alternative to the well-established vanadium redox flow batteries, which have successfully carved out a role in energy storage. Flow batteries, in general, are valued for their non-flammability, modularity of power and capacity, and long lifespan. These advantages make them ideal candidates for addressing fluctuations in the generation of “carbon-free” energy from renewable sources by storing surplus energy and releasing it back into the power grid as needed. This work is dedicated to optimizing zinc-iodine hybrid flow batteries, with a particular focus on electrolyte composition and its effect on battery efficiency and stability. Battery testing under various operating conditions was performed on our advanced test bench, which enables online monitoring of relevant parameters (such as electrolyte conductivity, pressure drop, and electrode/electrolyte potentials) and allows hydraulic connection of the electrolyte tanks. Strategies for extending areal capacity were identified, along with conditions that provide stable and efficient battery operation.



Simulace proudění a reakce ve 3D rekonstruované stěně porézního filtru

Adam Labach (B3)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Vzhľadom na pretrvávajúce využitie spaľovacích motorov v automobiloch, je dôležité naďalej zlepšovať technológie odstraňovania pevných častíc a ostatných škodlivých zložiek z výfukových plynov. Moja práca sa zameriava na heterogénnu katalytickú oxidáciu CO na CO₂ vo vnútri filtra pevných častíc, ktorého steny kanálikov sú potiahnuté aktívnym katalyzátorom. Počas prevádzky zariadenia sa na jeho povrchu usadzujú sadze. Tieto usadeniny zvyšujú účinnosť filtrácie, zvyšujú tlakovú stratu a majú tiež vplyv na konverziu plyných škodlivín, lebo obmedzujú ich prístup ku katalytickým centrárom. Cieľom práce bolo zistiť závislosť konverzie CO na množstve zachytených sadzí pomocou CFD simulácie v programe OpenFoam. Simulácie prebiehajú na 3D modeli úseku poréznej steny, s použitím užívateľského riešiteľa vyvinutého v našej výskumnej skupine. Riešiteľ berie do úvahy prúdenie plynu, difúziu cez vrstvy zachytených sadzí a katalyzátora a taktiež prebiehajúcu reakciu. Získané závislosti konverzie CO na teplote, prietoku plynu a hrúbke vrstvy sadzí na stenách pórov sú v súlade s trendami pozorovanými pri experimentoch.

Vývoj zjednodušeného modelu plic pro studium depozice inhalačních léčiv

Vojtěch Dvořák (B3)

Školitel: Ing. Pavel Zelenka

Inhalační léčiva jsou klíčovou součástí léčby plicních onemocnění a efektivita transportu a depozice částic léčiva je zásadní pro jejich maximální účinek. Tato práce se zabývá léčivou látkou allicinem, která se nachází převážně v česneku a slouží k jeho obraně proti škůdcům. Allicin je v poslední době studován v kontextu boje proti antibakteriální rezistenci. Cílem této práce je vyvinout zjednodušený model plic, na němž bude možné studovat depozici a antibakteriální účinky částic obsahujících allicin. Pomocí kombinace 3D tisku a měkké litografie je vyroben model, který představuje zjednodušenou, ale reprezentativní část plicních cest, což umožňuje věrnou simulaci *in vivo* podmínek a optimalizaci parametrů léčiva pro dosažení maximálních terapeutických účinků. Měkká litografie je využita k vytvoření vrstvy agarového gelu s výživovým médiem, která slouží jako model povrchu sliznice dýchacích cest. Stejná problematika je studována pomocí CFD simulací v programu OPENFOAM. Data ze simulací jsou používána pro plánování experimentů a studium geometricky složitějších struktur, které by bylo obtížné vyrobit fyzicky.

Optimalizace magnetoliposomů pro biomedicínské aplikace

Vojtěch Šebek (B3)

Školitel: Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.

Tradiční metody podávání léčiv často vedou k systémovému působení, což má za následek nežádoucí vedlejší účinky na zdravé tkáně, případně nedostatečnou terapeutickou účinnost v cílové oblasti. Proto je věnována pozornost vývoji lékových nosičů, které umožňují cílené doručení účinných látek přímo na požadované místo a jejich kontrolované uvolnění. Jedním z perspektivních systémů jsou magnetoliposomy, které představují hybridní nosiče tvořené nanočásticemi oxidu železa a fosfolipidovými vezikulami neboli liposomy. Tento systém dokáže zapouzdřit široké spektrum látek – jak hydrofilních, tak lipofilních. Díky magnetickým vlastnostem umožňuje cílené navádění do vybraných míst a potenciálně i řízené uvolňování zapouzdřené látky. K tomu dochází prostřednictvím radiofrekvenčního ohřevu, který vzniká při vystavení magnetických částic střídavému magnetickému poli. V rámci této práce byl u magnetoliposomů zkoumán vliv složení a obsahu nanočástic železa na jejich strukturu a charakteristiky. Dále byla hodnocena schopnost radiofrekvenčního ohřevu po vystavení střídavému magnetickému poli a byl zkoumán mechanismus uvolňování zapouzdřené látky. Rovněž byla zkoumána možnost cílení magnetoliposomů pomocí externího magnetu v průtočném zařízení, které simuluje podmínky biologického systému.

Studium morfologie chemobrionických struktur pomocí rentgenové mikrotomografie

Daniela Marcalíková (B3)

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

Experiment zvaný chemické zahrádky poukazuje na fascinující fenomén samo se organizujících struktur tvořených z anorganických sloučenin ve vodním skle, které mohou připomínat různorodé barevné rostliny či jeskynní útvary. Jejich růst udivuje vědce po již skoro dvě staletí, ale dosud se především zabývali zahrádkami skládajícími se z jedné soli. Tato práce se týká zahrádek rostoucích z tabletek, které jsou složeny ze tří různých solí v jiných molárních poměrech, jejichž výsledné struktury byly vyneseny do trojúhelníkového diagram. Naším cílem je zjistit, jak se mění morfologie vzniklých chemobrionických struktur v závislosti na počátečních podmínkách. Dosud bylo zkoumání vnitřní stavby vzniklých zahrádek prováděno pouze po ukončení experimentu zničením. Proto jsme pro monitorování dějů během růstu použili rentgenový mikrotomograf, který nám umožní sledovat vytvořené struktury uvnitř zahrádek v reálném čase.

Solvent-based plastic recycling: turbidity, rheology and stability measurements,

Filip Drešr (B3)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

One of open worldwide issues is how to deal with plastics at the end of their service life to close the recycling loop. This work aims to optimize Solvent-Based recycling concepts in our laboratory. It is difficult to use predictive models to select solvents for plastic dissolving. Therefore, systematic experimental studies are required to provide data about suitable polymer-solvent systems. These experiments were conducted in our in-house-built turbidimetry apparatus operating at elevated pressures and temperatures. We have studied polypropylene (PP) in two solvents and their mixtures for turbidity and rheology measurements. Melt flow rate (MFR) is one of the most crucial characteristics required by industry for processing of re-granulated plastics. We have also conducted a long-term study of polymer-controlled degradation of three polyolefin samples in the furnace. The MFRs were thus measured using Melt Flow Indexer. Main goal of this work was to bring relevant data for Solvent-Based recycling.

Vylepšenie kontaktov vodičov na elektródach palivového článku

Gréta Iliášová (B3)

Školiteľ: prof. Ing. Petr Kočí Ph.D.

V súčasnosti je kladený čoraz väčší dôraz na ekologické zdroje elektrickej energie, čo vytvára priestor pre nové technológie. Palivové články, ako jedna z alternatív, sú elektrochemické zariadenia, ktoré premieňajú chemickú energiu v palive na energiu elektrickú, a to pomocou redoxných reakcií. Palivom je najčastejšie vodík, ale v prípade článkov, ktoré obsahujú elektrolyt z pevného oxidu, je možné použiť aj iné typy palív ako metán, metanol alebo amoniak. Tento typ článku pozostáva z poréznej anódy $\text{Ni-Sm}_{0.2}\text{Ce}_{0.8}\text{O}_2$ a poréznej katódy $\text{La}_{0.6}\text{Sr}_{0.4}\text{Co}_{0.2}\text{Fe}_{0.8}\text{O}_3$, medzi ktorými je pevný elektrolyt $\text{Sm}_{0.2}\text{Ce}_{0.8}\text{O}_2$, ktorý umožňuje transport kyslíkových aniónov O^{2-} . Nami zostrojená aparátúra na testovanie tohto typu článkov bola vyvinutá s dôrazom na zaistenie správneho toku plynov k elektródam a je potrebné vylepšiť kontakt s elektrónovým vodičom prúdu v podobe striebornej drôtenej mriežky. Pritom je potreba zachovať transport plynov k elektróde tak, aby nedochádzalo ku koncentračnej polarizácii, a zároveň dosiahnuť dostatočný a stabilný kontakt vodičov na elektróde, aby sa nezvyšovali ohmické odpory v článku a nedochádzalo tak k nadmerným stratám napätia. Vylepšenia zahŕňajú optimalizáciu mechanického prítlaku mriežky, ako aj formulácie lepidla a jeho rozmiestnenie na elektróde.

Chemické inženýrství V

MÍSTO: B028

KOMISE

Předseda komise: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Členové komise:

- Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D.
- Ing. Karel Mařík
- Ing. Dan Trunov
- Ing. Pavel Calta, Ph.D. (Kapaji)
- Ing. Kateřina Hejnová (Bryan Research & Engineering)
- Ing. Miroslav Malecký, CSc (Orlen Unipetrol)

SEZNAM SOUTĚŽÍCÍCH

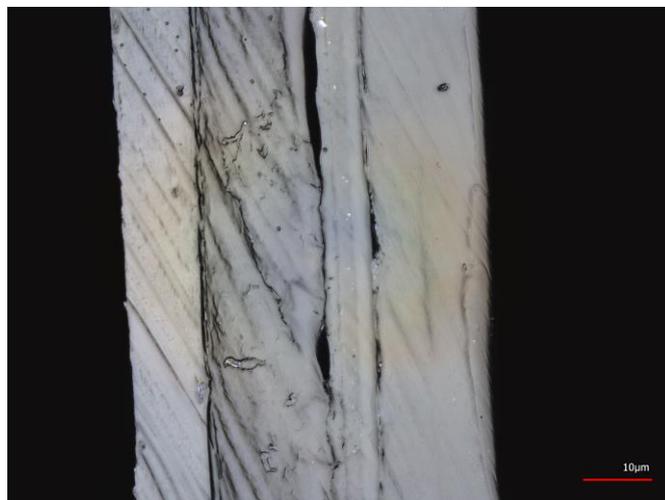
- **Bc., Denisa, Dendisová**, M2, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek, *Upcycling of plastics: fractionation method for composites and polyolefins*
- **Bc. Karolína Roháčová**, M1, prof. Ing. Miroslav Šooš, Ph.D., *Novel coamorphous systems of Sofosbuvir*
- **Bc. Samuel Uhliarik**, M2, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D., *Modifikácia uvoľňovania liečivej látky z minitabliet pomocou coatingu vo fluidnom lože*
- **Bc. Pavel Zeman**, M1, Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D., *Aerosol Drug Formulation Using Phospholipid-Stabilized Nanocrystals: Modeling and In Vitro Evaluation*
- **Bc. Anna Šmídová**, M2, doc. Ing. Zubov Alexandr Ph.D., *Van der Waalsova stavová rovnice a její překvapivá využití*
- **Bc. Stanislav Kočí**, M2, doc. Ing. Ondřej Vopička, Ph.D., *Pervaporační a perstrakční dělení izomerů xylenu*
- **Bc. Matěj Holub**, M1, doc. Ing. František Rejl, Ph.D., *Studium plněných aparátů za podmínek destilace*
- **Bc. Jan Cincibuch**, M1, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D., *Modelování reakce a transportu při hydrogenolyze metylbenzenu v katalytickém reaktoru s pevným ložem*
- **Bc. Matyáš Khýr**, M1, Ing. Martin Isoz, Ph.D., *AI for simulation of soot deposition in catalytic filters: From 2D to 3D estimates*
- **Bc. Martin Weisl**, M1, Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D., *Enkapsulace peptidů do glukanových částic*

Upcycling of plastics: fractionation method for composites and polyolefins

Bc. Denisa Dendisová (M2)

Supervisor: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

As aware people of the 21st century, we are solving global problems, e.g., plastic pollution, global warming, large carbon footprint. These problems affect the way of our living. According to the EU statistics, in 2021 we produced about 40% more plastics than we recycled. This work reports on the new method of upgrading (i.e., upcycling) polymers by the fractionation principle. The aim of the method is to upgrade plastics by removing degraded and short chains or by separating polymers from multilayer packaging. Our goal is to achieve the highest quality of upcycled polymers comparable with the properties of virgin polymers. The experiments were performed using our in-house-built apparatus with automatized control. We have examined many polymer-solvent systems to enrich our data library about rheological properties and turbidity. To characterize fractionated polymers, we are employing complementary methods such as DSC, GPC or Raman spectroscopy. Textiles constitute a significant challenge in the field of plastic recycling. They are often made from more than one polymer, which complicates the recycling process. For instance, textiles are mostly fabricated from cotton/polyester or polyamide fibers, where both synthetic polymers are hard to dissolve in environmental-friendly solvents.



Multilayer food packaging

Novel coamorphous systems of Sofosbuvir

Bc. Karolína Roháčová (M1)

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

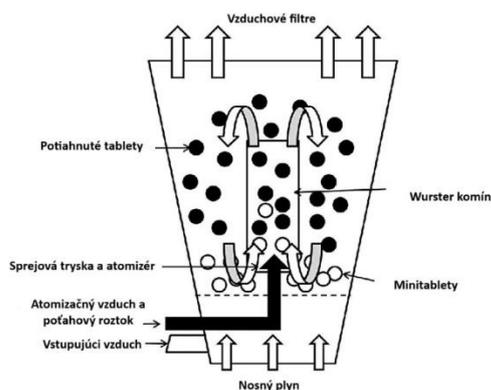
Sofosbuvir is an Active Pharmaceutical Ingredient (API) used to treat hepatitis C, a liver disease caused by the hepatitis C virus (HCV). It is classified as a Class III drug under the Biopharmaceutics Classification System (BCS), meaning it has high solubility but low permeability. This study aims to enhance sofosbuvir's physicochemical properties, particularly solubility and dissolution, which are expected to improve its permeability and, ultimately, its bioavailability. To achieve this, we used the method of coamorphization, which has been used previously with success to enhance the properties of various drugs. To prepare the coamorphous systems, xanthine and its methylated derivatives, specifically caffeine, theophylline, and theobromine, are used as cofomers. For their preparation ball milling is used as a sustainable, eco-friendly technique, since this mechanical process facilitates the formation of coamorphous mixtures without the need for solvents.

Modifikácia uvoľňovania liečivej látky z minitabliet pomocou coatingu vo fluidnom lôžku

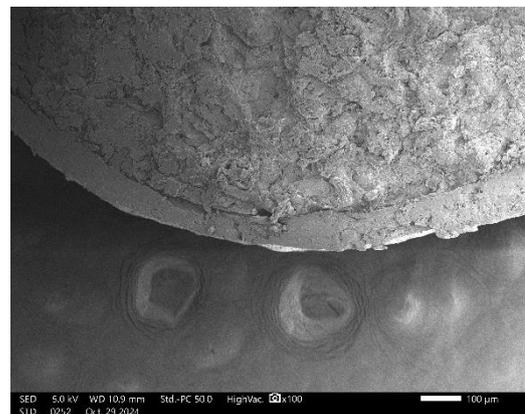
Bc. Samuel Uhliarik (M2)

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

Tablety s okamžitým uvoľňovaním sú v dnešnej dobe bežnou liekovou formou. Do popredia sa ale dostávajú aj takzvané liekové formy s postupným uvoľňovaním. Využívajú sa napríklad pri účinných látkach s úzkym terapeutickým oknom, kde je potreba nepresiahnuť určitú koncentráciu v tele, ale aj pri látkach, u ktorých chceme dlhšiu pôsobnosť účinku. V našej práci sme sa zamerali na minitabliety, ktoré majú priemer 2 mm, a majú veľké množstvo výhod oproti konvenčným tabletám. Medzi ne patrí napríklad jednoduchšie prehĺtanie, možnosť personalizácie liečby či tvorba viac-jednotkových liekových systémov. Na modifikáciu uvoľňovania API bola použitá metóda poťahovania tabliet vo fluidnom lôžku, konkrétne za použitia Würsterovej metódy (Obrázok 1). Pri príprave roztokov poťahu boli zvolené rôzne typy polymérov a nastavené podmienky na nástrek vo fluidnom lôžku. Pripravené minitabliety boli podrobené disolučným testom a ďalšej charakterizácii, ako napríklad foteniu na SEM (Obrázok 2). Naším cieľom je taktiež pomocou bilančných výpočtov získať závislosť hrúbky poťahu na množstve polyméru tak, aby bolo možné pripraviť minitabliety s definovaným disolučným profilom.



Obrázok 1: Schéma Würsterovej metódy



Obrázok 2: Poťahová vrstva na minitablete, snímok zo SEM

Formulace aerosolových lékových forem pomocí nanokrystalů stabilizovaných fosfolipidy: Matematické modelování

Bc. Pavel Zeman (M1)

Školitel: Ing. Denisa Lizoňová, Ph. D.

Mnohá běžně používaná léčiva mají při orálním podání nízkou biologickou dostupnost – do krve se z trávicího traktu dostane jen část dávky. Pro dosažení účinné koncentrace v krvi pak perorální lékové formy (např. tablety či kapsle) musí obsahovat vyšší množství léčiva, což zvyšuje výrobní náklady, riziko vedlejších účinků a zátěž pro životní prostředí. Tento projekt řeší zmíněné problémy vývojem inhalačních lékových forem na bázi fosfolipidy stabilizovaných nanokrystalů, které obcházejí trávicí trakt, čímž umožňují vstřebávání léčiv bez tvorby nežádoucích metabolitů. Nanokrystaly díky svému velkému povrchu urychlují absorpci a obsahují minimum excipientů. Stabilizace fosfolipidem dipalmitoylfosfatidylcholinem (DPPC), hlavní složkou plicního surfaktantu, navíc brání spotřebování plicního surfaktantu, který je klíčový pro udržení povrchového napětí a prevenci kolapsu plic. Cílem práce je vytvořit matematický model, který kombinuje computational fluid dynamics (CFD) a transportní model pomocí metody konečných objemů, a umožní navrhnout optimální inhalační dávkování. Základem modelu je 1D model difuze, kterému bude přidáno na komplexnosti. Tento přístup snižuje potřebnou dávku, náklady a zatěžování organismu.

Van der Waalsova stavová rovnice a její překvapivá využití

Bc. Anna Šmídová (M2)

Školitel: doc. Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.

Van der Waalsova rovnice je historicky první rovnicí použitou pro popis stavového chování reálných plynů. V naší práci vyvracíme zažitý předpoklad, že je tato rovnice nedostatečně přesná pro reálné výpočty, a představujeme její rozšíření, které může vést k výsledkům srovnatelným s běžně používanými kubickými stavovými rovnicemi. V dosavadní práci jsme rovnici aplikovali v rámci modelu pro výpočet povrchového napětí u systémů kapalina-pára, veličiny hojně využívané pro popis jevů na fázovém rozhraní. Pro zvýšení přesnosti výpočtů jsme použili modifikovanou van der Waalsovu stavovou rovnici označovanou jako vdW-711, která mimo jiné zohledňuje vliv acentrického faktoru ω , jenž je dnes součástí většiny stavových rovnic. Pro zajištění numerické stability výpočtu využíváme Cahn-Hilliardova modelu, který v kombinaci s rovnicí vdW-711 poskytuje hodnoty povrchového napětí blízké experimentálním datům. V neposlední řadě poukážeme na relativně neznámé využití van der Waalsovy stavové rovnice, a to pro predikci stavového chování polymerů. S tímto přístupem přišel termodynamik Georgios M. Kontogeorgis již v 90. letech minulého století a my se snažíme na tento přístup navázat a rozšířit tak další možné využití této často opomíjené rovnice.

Pervaporační a perstrakční dělení izomerů xylenu

Bc. Stanislav Kočí (M2)

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

V chemické praxi je dělení směsí na jednotlivé složky stěžejním úkolem, některé směsi jsou však tradičními metodami, například rektifikací, krystalizací nebo adsorpcí, obtížně separovatelné. Výzkum v oblasti membránových technologií směřuje k vývoji metod a materiálů pro jejich efektivní separaci a tím snížení energetických nároků. Příkladem jsou směsi polohových izomerů xylenu a ethylbenzenu (C_8H_{10}), kde nejcennější složkou je *p*-xylen používaný například pro výrobu PET (polyethylentereftalát). Tato práce se zabývá dělením směsí *p*-xylenu a *m*-xylenu membránami z klasických membránových materiálů, síťovaného PEGDA (polyethylen glykol diakrylát) a CTA (triacetát celulosy). Cílem práce je optimalizace separačních charakteristik volbou operačního módu separátoru: pervaporačního a perstrakčního (membránově extrakčního). Pro jednotlivé operační módy byly stanoveny separační charakteristiky membrán pro ekvimolární směs *p*-xylen/*m*-xylen a pro eutektickou směs *p*-xylen/*m*-xylen (13 % *p*-xylenu). Vedle současného trendu excesivního vývoje nových membránových materiálů práce směřuje k inovativnímu použití dostupných robustních materiálů.

Studium plněných aparátů za podmínek destilace

Bc. Matěj Holub (M1)

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

Nemálo chemických inženýrů se ve svém profesním životě setká s otázkou výběru vhodné výplně do destilační kolony. Je lepší zvolit strukturovanou či sypanou výplň? Pro zodpovědné rozhodnutí je potřeba vzít v úvahu transportní, hydrodynamické a hydraulické parametry daného typu výplně a další okolnosti vyplývající např. z charakteru destilované směsi. Dřívější experimenty s výplní 3. generace (Intalox 25) napovídají tomu, že u sypaných výplní dochází k intenzivnímu podélnému promíchávání v kapalně fázi, čímž se snižuje hybná síla přenosu hmoty. Projeví se podélné promíchávání i při destilaci v koloně naplněné sypanou výplní 4. generace (NeXRing 0.7) s dvojnásobným průměrem oproti původní koloně? Získaná data budou sloužit jako podklad pro dlouhodobě vyvíjený destilační model, který bude zahrnovat jev podélného promíchávání, na rozdíl od modelů vytvořených např. v komerčních simulačních softwarech, které takové odchylky od pístového toku, jako je podélné promíchávání fází, neuvažují.



Modelování reakce a transportu při hydrogenolýze metylbenzenu v katalytickém reaktoru s pevným ložem

Bc. Jan Cincibuch (M1)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

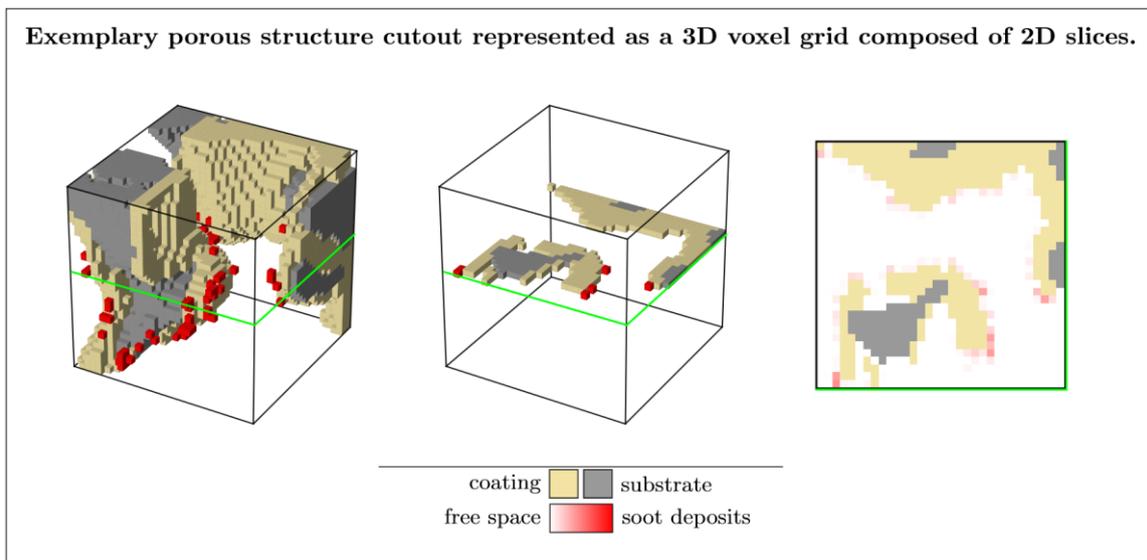
V průmyslu často nastává situace, kdy získáme vedlejší produkty, které nemají přímé využití, takže je třeba je dále zpracovat. V petrochemickém průmyslu taková situace nastává například u frakcí substituovaných aromatických uhlovodíků. Ústředním tématem této práce je heterogenní katalytický reaktor s pevným ložem, ve kterém probíhá katalytická hydrogenolýza aromátů. Produktem je pak směs alifatických uhlovodíků, které už lze dále využít, např. jako motorové palivo. Pro správný průběh reakce, a především pro zachování kýžené selektivity, je nutné udržovat poměrně úzké teplotní rozmezí. Pro návrh chlazení této exotermní reakce a průmyslového škálování reaktoru je tedy důležité co nejlépe porozumět dějům uvnitř reaktoru. Bezpečným a ekonomicky rozumným řešením je kombinace experimentálních dat z laboratorního reaktoru a počítačového modelu. Pro simulace je využit osově souměrný, pseudohomogenní model trubkového reaktoru s podélnou i příčnou disperzí hmoty a vedením tepla, sestavený ve výpočetním prostředí OpenFOAM. Je provedena parametrická studie vlivu klíčových parametrů modelu na rozložení teplot v reaktoru. Výsledky jsou porovnány s dostupnými experimentálními daty. Je také zkoumán vliv ředění katalyzátoru na udržení teploty v požadovaných mezích.

AI for simulation of soot deposition in catalytic filters: From 2D to 3D estimates

Bc. Matyáš Khýr (M1)

Školitel: Ing. Martin Isoz, Ph.D.

In recent years, the use of artificial neural networks as computationally efficient surrogates for numerical models has gained traction in engineering fields such as optimization and fluid flow modelling. In our previous work, we introduced a novel neural network architecture that is able to qualitatively estimate the spatial distribution of the particle deposit inside the microstructure of a porous filter. The network is composed of a DeepONet-like structure that utilizes autoencoders with convolutional layers for efficient processing of high-dimensional structured data corresponding to a two-dimensional representation of a porous filter structure. In this contribution, we explore several principal approaches to extending our neural network model toward use with three-dimensional filter microstructure data with the intended application in the development of catalytic filters. We discuss the performance as well as the computational cost of the varying implementations, ranging from mere two-dimensional to three-dimensional reconstruction to fully three-dimensional convolutional layers.

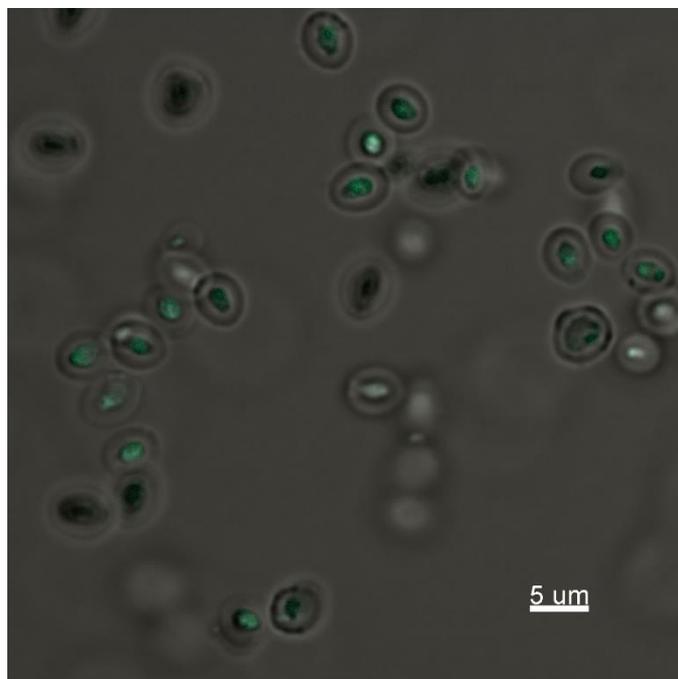


Enkapsulace peptidů do glukanových částic

Bc. Martin Weisl (M1)

Školitel: Mgr. Jaroslav Hanuš Ph.D.

Drtivá většina terapeutických peptidů je dnes podávána injekčně. Hlavními problémy při podání *per os* jsou velice drsné podmínky v gastro-intestinálním traktu (GIT) a schopnost pronikat biologickými bariérami. Aktuálně probíhající výzkumy se zabývají různými mechanismy řešícími tyto problémy, mezi něž patří snaha o úpravu chemické struktury peptidů, zvýšení jejich permeability nebo využití geneticky upravených bakterií. Enkapsulace do glukanových částic odvozených z kvasinek *Saccharomyces cerevisiae* by mohla nabídnout bezpečný průchod GIT, díky β -1,3 a β -1,6 glykosidickým vazbám, pro které lidskému organismu chybí příslušný štěpící enzym. V tenkém střevě jsou částice následně rozeznávány makrofágy a ve formě fagocytů transportovány přes střevní stěnu a lymfatickým systémem dále do organismu. V rámci našeho projektu byly připraveny glukanové částice za využití různých rozpouštědel, vyšších teplot, centrifugace a lyofylizace. Nyní probíhá syntéza definované řady peptidů s fluorescenčním značením a testování různých způsobů integrace do glukanových částic. Plánujeme pokračovat s kvantifikací enkapsulovaných peptidů pomocí aminokyselinové analýzy a popsáním kinetiky jejich uvolňování, dlouhodobě testování interakcí s makrofágy *in vitro* a *in vivo* v drozofilách, či vyšších živočiších.



Snímek glukanových částic z laserového skenovacího konfokálního mikroskopu

Chemické inženýrství VI

MÍSTO: B 139

KOMISE

Předseda komise: prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha

Členové komise:

- Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.
- Ing. Stanislav Chvíla
- Ing. Přemysl Richtr
- Dr. Ing. Pavel Havelka (Arxada Biotech)
- Ing. Petr Hnídek (Synthomer)
- Ing. Petr Pokorný (Crytur)

SEZNAM SOUTĚŽÍCÍCH

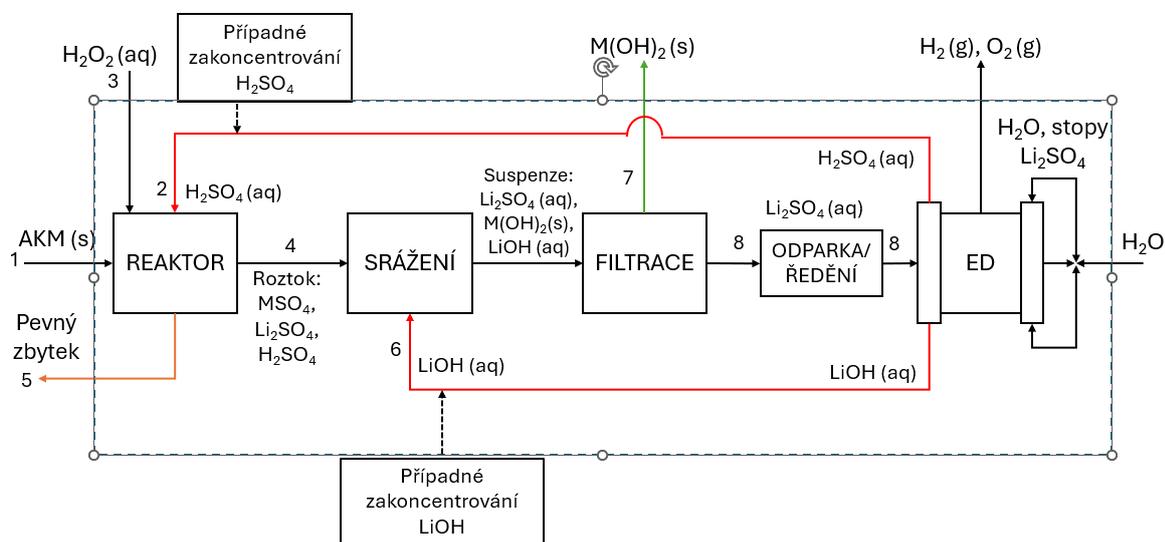
- **Bc. Matyáš Jakub Tichý**, M1, doc. Ing. František Rejl, Ph.D., *Vývoj metodiky recyklace lithium-iontových baterií*
- **Bc. Mikuláš Vaszi**, M1, prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha, *Měření a zpracování signálu Hmetru a jeho kalibrace*
- **Bc. Bára Pinčáková**, M1, doc. Dr. Ing. Milan Jahoda, *Vliv přítomnosti sazí na výsledky CFD modelování požárů*
- **Bc. Eliška Prostějovská**, M1, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D., *Návrh systému pro čištění výfukových plynů ze stacionárního dieselgenerátoru*
- **Bc. Jakub Melenovský**, M1, Prof. Ing. Michal Přibyl, Ph.D., *Studium enantioselektivních transesterifikací v mikroreaktorech*
- **Bc. Michal Neuwirth**, M2, doc. Dr. Ing. Milan Jahoda, *Modelování úniku toxické látky do volného prostředí*
- **Bc. Lukáš Bednář**, M1, Prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D., *Vývoj modelu palivového článku s pevným elektrolytem*
- **Bc. Rostislav Huňa**, M2, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D., *Modelování kinetiky homogenizace v mikrofluidním míšiči pomocí metody CFD*
- **Bc. Anna Reiserová**, M1, Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D., *In vitro analýza inhalačních přípravků pro in situ výrobu antibiotik*
- **Bc. Alina Mamedova**, M2, doc. Ing. Viola Tokárová, Ph.D., *Enkapsulace buněk do hydrogelů pomocí stop-flow litografie*

Vývoj metodiky recyklace lithium-iontových baterií

Bc. Matyáš Jakub Tichý (M1)

Školitel: doc. Ing. František Rejl, PhD.

Vzhledem k očekávanému, masivnímu přechodu na ryze elektrické automobily a nedostatečnému zajištění surovinové základny pro výrobu jejich akumulátorů (především grafitu, kobaltu a niklu), je jedinou možností udržení nezávislosti EU na dovozu z problematických zemí jejich hluboká recyklace. Metody jsou známy, zřídka jsou však zároveň ekonomické a zároveň neprodukcující plynné, kapalně nebo pevné odpady v neúnosném množství. Tato práce si klade za cíl vyvinutí recyklačního procesu, který bude produkovat co nejmenší množství odpadů a zároveň bude dávat smysl z ekonomického hlediska. Hlavním bodem této práce je recyklace aktivního katodového materiálu NMC ($\text{LiNi}_x\text{Mn}_y\text{Co}_{1-x-y}\text{O}_2$) pomocí hydrometalurgických procesů pro vytvoření standardů a referenčních dat pro následné zpracování průmyslové black mass, která obsahuje, jak katodový, tak anodový aktivní materiál, elektrolyt, pojiva a zbytky sběračů náboje či jiné nečistoty. Aplikované procesy zahrnují rozpouštění NMC v kyselině a následné srážení vzniklého roztoku hydroxidem s cílem separovat Ni, Mn, Co. Zbýlý roztok obsahující lithnou sůl je zpracován elektrodialýzou s bipolárními membránami s cílem regenerace kyseliny a hydroxidu, které mohou být tak znovu použity.



Měření a zpracování signálu Hmetru a jeho kalibrace

Bc. Mikuláš Vaszi (M1)

Školitel: prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha

Tato práce vychází z projektu zaměřeného na vývoj senzoru vodíku (Hmetru) do primárního okruhu jaderné elektrárny. Téma sestává ze dvou hlavních úkolů, a to: i) Měření linearitu signálu vodíkových sond v závislosti na fugacitě vodíku ve smyčce, kde je měřena odezva Hmetru na inertní plyn (v našem případě vzduch při atmosférickém tlaku), následně na čistý plynný vodík při atmosférickém tlaku a na závěr čistý plynný vodík při přetlaku 150 kPa. Pro dosažení přetlaku byl vodík vypouštěn do atmosféry přes 1,5 m vysoký vodní sloupec. Ve smyčce byly zapojeny 3 sondy zároveň (A, B a 3C) a při přechodu mezi jednotlivými stavy a odečtením naměřených hodnot byla ponechána prodleva minimálně 30 minut, aby došlo k ustálení. Při každém měření byla zároveň měřena okolní teplota a tlak v místnosti, protože odezva Hmetru závisí na teplotě.; ii) Návrh, ideálně i zhotovení pilotní verze, zařízení pro produkci kalibračního média pro dané Hmetry, s nímž budou po daných časových intervalech Hmetry automaticky proplachovány a rekalibrovány, aby bylo dosaženo přesnějšího měření a delší servisní periody přístroje.

Vliv přítomnosti sazí na výsledky CFD modelování požárů

Bc. Bára Pinčáková (M1)

Školitel: doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

Saze jsou jemné pevné částice uhlíku, které vznikají při nedokonalém spalování organických látek během pyrolyzních reakcí. V těchto podmínkách uhlík a další složky plynů nemohou plně reagovat s kyslíkem za vzniku oxidu uhličitého a vody. Místo toho uhlík zůstává ve formě sazí a zároveň vzniká toxický oxid uhelnatý. Při požáru saze ovlivňují okolní teplotní pole, hustotu směsi plynů, radiaci a viditelnost, což značně komplikuje orientaci v zasaženém prostoru. Pro lepší porozumění chování sazí při požáru se používají simulační nástroje, jako je Fire Dynamics Simulator (FDS). Tento program umožňuje modelovat šíření požárů, včetně kouře, sazí, tepla a dalších parametrů, což je klíčové pro predikci chování požárů a pro návrh efektivního protipožárního opatření. Pro numerické modelování tvorby, zániku a přítomnosti sazí v oblasti požáru se používají modelové přístupy s různou mírou komplexity. Tato práce se proto zabývá modelováním chování sazí v programu FDS se zaměřením na zjištění jejich vlivu na viditelnost, teplotu, radiaci a další parametry, a to s cílem přispět k lepšímu porozumění vlivu sazí při numerickém modelování průběhu požáru.

Návrh systému pro čištění výfukových plynů ze stacionárního dieselgenerátoru

Bc. Eliška Prostějovská (M1)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Emise ze stacionárních zdrojů, jako jsou topeniště, plynové a uhelné elektrárny a další průmyslové provozy, přispívají podstatnou měrou k znečištění ovzduší. K těmto zdrojům se řadí i stacionární plynové a diesellové generátory, které se používají jako vyrovnávací zdroje elektrické energie při převisu poptávky a nedostatečném výkonu ostatních zdrojů v elektrické síti. Aktuální emisní norma STAGE V značně omezuje povolené množství vypouštěných škodlivin z těchto generátorů, takže je u nich třeba osadit katalytické systémy pro konverzi výfukových plynů. Tato práce se zabývá návrhem systému oxidačního katalyzátoru (DOC) a katalyzátoru pro selektivní katalytickou redukci oxidů dusíku (SCR), který by měl být nově osazen na stacionárním dieselgenerátoru o maximálním výkonu 750 kW. Množství surových emisí bylo změřeno na dieselgenerátoru při pěti výkonových bodech a naměřené teploty, průtoky a koncentrace spalin byly využity jako vstup pro matematické modelování kombinovaného systému katalyzátorů DOC-SCR. Pomocí počítačových simulací byla nalezena vhodná velikost a konfigurace katalytických reaktorů pro požadovanou konverzi škodlivin a splnění dané emisní normy.

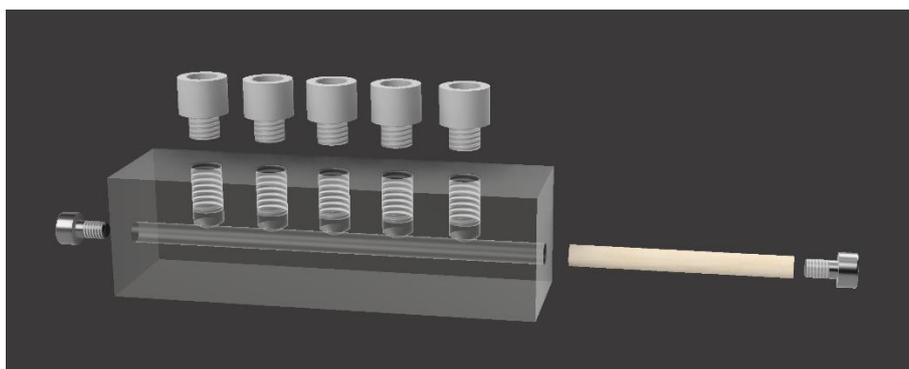


Studium enantioselektivních transesterifikací v mikroreaktorech

Bc. Jakub Melenovský (M1)

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

Mnoho odvětví průmyslu, od potravinářského po farmaceutický, vyžaduje opticky čisté chemické látky pro syntézu produktů. Separace optických izomerů z jejich směsí je složitá a časově náročná, protože chemicko-fyzikální vlastnosti optických izomerů se téměř neliší, nejsou-li v chirálním prostředí. Jedním ze způsobů získání opticky čistých látek je asymetrická enzymatická syntéza. Obzvláště vhodnou skupinou enzymů pro tuto syntézy jsou lipázy, protože jsou stabilní v celé řadě prostředí a mají širokou substrátovou specifitu. Cílem této práce bylo vyrobit průtočný mikroreaktor pro enantioselektivní transesterifikaci s ložem imobilizované lipázy. V mikroreaktoru byla zkoumána transesterifikační reakce racemické směsi 1-fenylethanolu a 1-fenylethylacetátu za vzniku (*R*)-1-fenylethyl acetátu. Nezareagovaný zůstává převážně enantiomer (*S*)-1-fenylethanol. Reakce je katalyzovaná lipázou CALB (*Candida Antarctica B*) imobilizovanou na akrylátové pryskyřici. Kvůli rozpuštění mnoha organických polymerů působením reakční směsi, bylo nutno připravit mikroreaktor z chemicky odolnějšího materiálu. Byly vyrobeny a testovány dva reaktory – jeden z hliníku a druhý z teflonu. Vzhledem k tomu, že hliník může způsobit deaktivaci lipázy, byl jako materiál pro výrobu mikroreaktoru vybrán teflon. V rámci projektu byly hledány takové reakční podmínky, které poskytují vysoký enantiomerní přebytek (*R*)-1-fenylethyl acetátu a (*S*)-1-fenylethanolu.



Modelování úniku toxické látky do volného prostředí

Bc. Michal Neuwirth (M2)

Školitel: doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

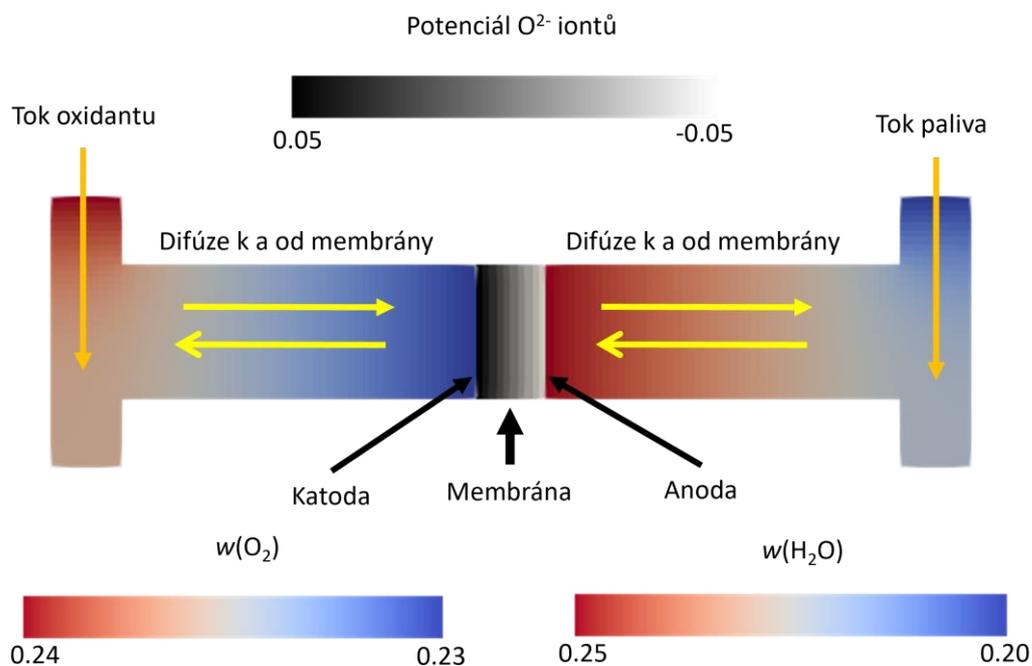
Bezpečnost by měla být absolutní prioritou v každém průmyslovém odvětví, v chemickém obzvláště, protože jakékoliv pochybení může mít dalekosáhlé a tragické důsledky na životech a majetku. Počítačové modelování je v oblasti bezpečnosti klíčovým nástrojem, který umožňuje předvídat chování komplexních systémů a analyzovat rizika v krizových situacích. Simulace poskytují možnost např. otestovat únik nebezpečných látek a další mimořádné události ve virtuálním prostředí. Výsledky simulací pak pomáhají při tvorbě preventivních opatření a nastavení efektivních krizových plánů, což výrazně snižuje riziko ohrožení v případě úniku toxických látek. V práci se zaměřuji na simulaci úniku amoniaku při stáčení ze železniční cisterny v areálu Chempark Záluží – Litvínov s využitím programu ALOHA. Cílem řešení je určení, jak atmosférické podmínky (teplota, rychlost větru a vlhkost) ovlivňují možné koncentrační profily unikajícího amoniaku ve sledované oblasti.

Vývoj modelu palivového článku s pevným elektrolytem

Bc. Lukáš Bednář (M1)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Palivové články s pevným elektrolytem (SOFC) jsou zařízení schopná produkovat elektřinu a teplo chemickou přeměnou paliva (vodík, oxid uhelnatý ale i například methan, methanol a jejich různé směsi) a oxidantu (kyslík, vzduch). Výhodou SOFC je jejich vysoká účinnost konverze uvolněné energie na elektřinu a zároveň nízká koncentrace nežádoucích vedlejších produktů. Cílem této práce je vyvinout CFD model reaktoru s planárním SOFC, který zahrnuje proudění plynu, Stefan-Maxwellovu difúzi k elektrodám, povrchovou reakci a transport iontů přes membránu. Důraz je kladen na vývoj a zakomponování modelu elektrochemických reakcí a jednotlivých příspěvků k napětí článku. Model je ověřen na základě výpočtu voltampérové charakteristiky článku při různých provozních teplotách v porovnání s daty z literatury.



Modelování kinetiky homogenizace v mikrofluidním mísiči pomocí metody CFD

Bc. Rostislav Huňa (M2)

Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Výpočetní dynamika tekutin (CFD) je metoda simulace pohybu tekutin na základě numerického řešení diskretizovaných transportních rovnic. V této práci využíváme metody CFD pro popis homogenizace v mikromísiči pro antisolventní precipitaci. Antisolventní precipitace je jedním ze způsobů přípravy nanočástic léčiva, tzv. nanokrystalů, který spočívá v mísení roztoku léčiva v organickém rozpouštědle (solventu) s vodou (antisolventním činidlem), v níž je léčivo špatně rozpustné. Tento proces vede k silnému lokálnímu přesycení roztoku a následné krystalizaci nanočástic léčiva. Tyto částice mají vysoký poměr povrchu k objemu, který zajišťuje výrazně rychlejší rozpouštění léčiva, a zlepšuje tak jeho biologickou dostupnost. Velikost vzniklých částic však značně závisí na hydrodynamických podmínkách v mísiči, jejichž vliv na tento zásadní faktor kvality produktu je třeba prostudovat. Cílem této studie je využít metodu CFD k určení koncentračních polí v mísiči a na základě těchto dat kvantifikovat stupeň promísení jako funkci času, celkového objemového průtoku mísičem a poměrů vstupních průtoků solventu a antisolventu. Takto sestavená kinetika míchání bude implementována do již existujícího modelu krystalizace, což umožní budoucí optimalizaci celého procesu.

In vitro analýza inhalačních přípravků pro in situ výrobu antibiotik

Bc. Anna Reiserová (M1)

Školitel: Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.

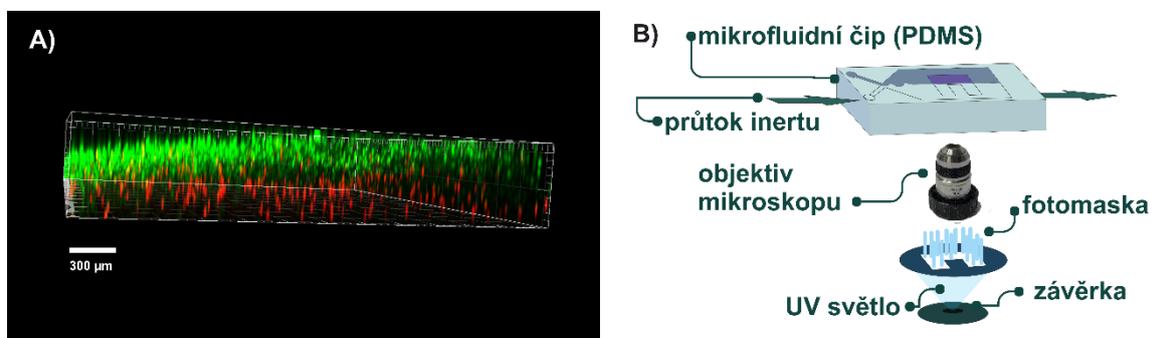
Bylo prokázáno, že rod *Allium*, zejména česnek (*Allium sativum*), vykazuje antimikrobiální, antimykotické a antiparazitární účinky, které jsou připisovány sloučenině allicinu. Tvorba allicinu je řízena enzymatickou reakcí, kde prekurzorem této reakce je alliin, což je neproteinogenní aminokyselina, která je přítomna v cytoplazmě buněk česneku, odděleně od enzymu alliinázy, který je uložen ve vakuolách. V důsledku porušení česnekové buňky dochází k iniciaci této enzymatické reakce za vzniku allicinu – antibiotické látky s krátkým poločasem rozpadu, díky čemuž se nevytváří bakteriální rezistence. Allicin může být inhalačně podáván do plic, kde může umožnit léčbu lokálních bakteriálních infekcí. Je však nutné znát koncentrace, které pro tělo nejsou škodlivé a zároveň účinně zabíjí bakterie. Tato práce se zaměřuje na studium toxicity allicinu na plicní buňky (linie A549) a určení koncentrací vhodných pro terapeutické účely. Práce studuje toxicitu jak enzymu (allinasa), substrátu (alliin) a produktu (allicin) samostatně, tak ve formě inhalačních mikročástic připravených sprejovým sušením. V dalším kroku bude studován efekt glutathionu na zmírnění toxicity allicinu, což bude napodobovat podmínky v lidském těle, kde je glutathion dodáván z krevního řečiště a chrání buňky před oxidačním stresem, například i v důsledku působení allicinu.

Enkapsulace buněk do hydrogelů pomocí stop-flow litografie

Bc. Alina Mamedova (M2)

Školitel: doc. Ing. Viola Tokárová, Ph.D.

Zapouzdření živočišných eukaryotických buněk do trojrozměrné struktury hydrogelu představuje v současném tkáňovém inženýrství pokročilejší alternativu ke klasické dvojrozměrné kultivaci na plastových površích. Hydrogel má schopnost simulovat přirozené prostředí extracelulární matrix a umožňuje zkoumat buněčnou fyziologii i morfologii v podmínkách více se blížících in vivo. Cílem této práce je najít biokompatibilní hydrogel pro enkapsulaci buněk předního zkříženého vazů vhodný pro výrobu mikročatic pomocí mikrofluidní techniky stop-flow litografie, která využívá UV světlo a fotomasku. Hledaný hydrogel by měl zajistit dostatečnou životaschopnost buněk po dobu několika dní a zároveň polymerizovat působením UV záření. Práce prezentuje výsledky testování čtyř různých metakrylovaných hydrogelů. Životaschopnost buněk v objemu hydrogelu byla vyhodnocena pomocí fluorescenčního barvení a konfokálního mikroskopu. Dále byl zkoumán průběh polymerace těchto hydrogelů uvnitř mikrofluidního čipu a jejich celková kompatibilita s technikou stop-flow litografie. Tento výzkum poslouží pro přípravu mikrorobotů a zkoumání vlivu mechanostimulace buněk na produkci prozánětlivých cytokinů, což přinese důležité poznatky pro léčbu ortopedických poranění a onemocnění vazů a šlach.



Obr. 2: A) 3D rozložení buněk v hydrogelu a jejich životaschopnost (zelené - živé, červené - mrtvé), B) schéma uspořádání stop-flow litografie

Chemické inženýrství VII

MÍSTO: B008

KOMISE

Předseda komise: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Členové komise:

- Ing. Martin Isoz, Ph.D.
- Ing. David Gráf
- Ing. Oliver Nagy
- Ing. Václav Babuka (Synthos)
- Ing. Martin Jakubec, Ph.D. (Ranido)
- Ing. Radek Černý (Spolchemie)

SEZNAM SOUTĚŽÍCÍCH

- **Bc. Ludmila Řiháková**, M2, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek, *Innovative Solvent-Based Recycling: Closing the Loop on Plastic Waste*
- **Bc. Adam Sedláčik**, M2, Ing. Petr Mazúr Ph.D., *Optimisation of zinc-air hybrid flow batteries*
- **Bc. Hana Moravčíková**, M1, Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D, *Studium interakce farmaceutických nanokrystalů s buněčnými sferoidy*
- **Bc. Hynek Housar**, M1, Ing. Petr Jelínek, prof. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D., *Nanosuspension Preparation for Effective Nebulization of Poorly Water-Soluble Drugs*
- **Bc. Marek Martinian Kolátor**, M2, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D., *Příprava a charakterizace Pd/SSZ-13 jako aktivního materiálu pro adsorpci NOx*
- **Bc. Zuzana Coufalová**, M1, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D., *Testování Pd/SSZ-13 jako aktivního materiálu pro adsorpci NOx*
- **Bc. Ondrej Melo**, M1, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek, *Crystallinity change of semi-crystalline polyolefins during the sorption of penetrants*
- **Bc. Dalibor Krunť**, M1, doc. Dr. Ing. Milan Jahoda, *Stanovení konvektivní složky při měření tepelného toku v prostředí požáru*
- **Bc. Martin Matej**, M1, doc. Ing. Alexandr Zubov, Ph.D, *Charakterizácia nádrží prietokových baterií pomocou výpočtovej dynamiky tekutín (CFD)*
- **Bc. Monika Poláčková**, M1, doc. Ing. Alexandr Zubov, Ph.D., *Modelling of emulsion copolymerization: Identifiability analysis*
- **Bc. Vojtěch Hampl**, M1, prof. František Štěpánek, Ph.D., *Zpracování farmaceutických nanospenzí metodou rozprašovacího sušení*

Innovative Solvent-Based Recycling: Closing the Loop on Plastic Waste

Bc. Ludmila Řiháková (M2)

Supervisor: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Plastic materials are indispensable and irreplaceable and their production is increasing. However, for most plastics and textiles we do not know an efficient way of recycling them. Unfortunately, no method has yet been devised to solve the problem of increasing waste, as it is cheaper to produce new plastic than to recycle the used one. This work demonstrates a new approach to close the plastic waste loop and illustrates this approach on polyolefins and textiles. We are optimizing the developed method of solvent-based additives removal to ease-up the subsequent plastic processing and recycling. The apparatus was designed, constructed and tested in our laboratory, allowing flexible adjustment and optimization of the recycling process. It is not easy to puzzle out the composition of additives and their concentration in the polymer matrix. Therefore we prepared calibration samples of polymers with additives and characterized them by Raman and IR spectroscopy as principal tools monitoring the process conditions efficiency. As a case study we decolorized textiles with solvents, looking for the most efficient solvent. The goal is to develop a simple, inexpensive and sophisticated method for recycling plastics that will be integrated into the chain of existing recycling technologies.

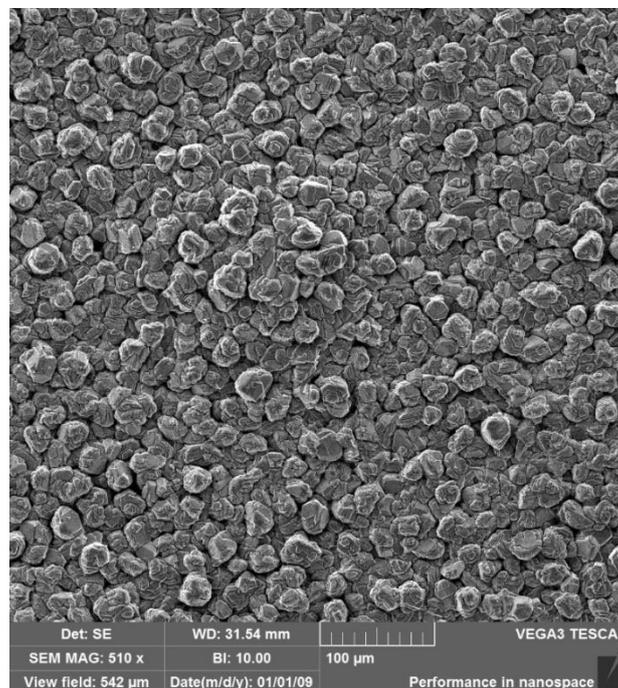


Optimisation of zinc-air hybrid flow batteries

Bc. Adam Sedlačík (M2)

Supervisor: Ing. Petr Mazúr PhD.

As the global population keeps growing, energy demands are surging, leading to considerable environmental pollution and accelerating climate change. To address these issues, world is increasingly shifting toward renewable energy sources as a viable alternative to fossil fuels. However, these are typically intermittent, which destabilizes the power grid. Zinc-air hybrid flow batteries (ZAHFBs) offer a promising stationary energy storage solution for renewables. ZAHFBs use zinc and oxygen, which are abundant and non-toxic materials, making them a cheaper and more eco-friendly alternative to traditional ones. Energy in ZAHFBs is stored in the form of solid layer of zinc deposited on the surface of the negative electrode during charging. Despite several ongoing efforts, there are still serious problems with the zinc anode, such as non-homogeneous deposition, dendritic growth and self-discharging. The latter issue is mainly caused by corrosion of the zinc anode, during which the deposited zinc reacts with electrolyte, forming zincate ions and generating hydrogen gas. This work systematically investigates self-discharging in ZAHFBs at different conditions (states of charge, temperatures), both for spherical particles and deposited layers, to gain a deeper understanding of the process.



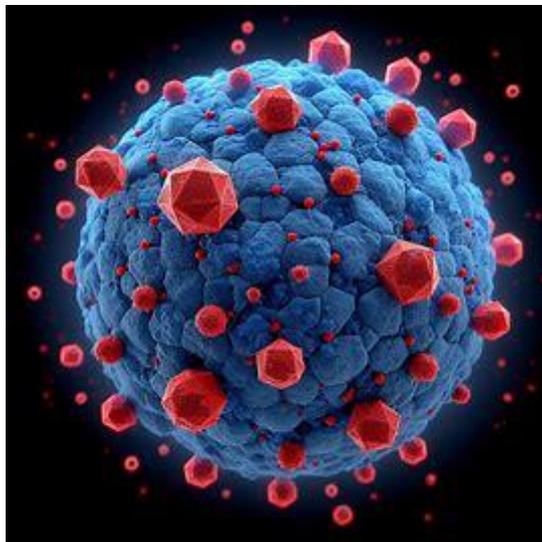
The image of desirable homogeneous and crystalline zinc structure deposited in our laboratory.

Studium interakce farmaceutických nanokrystalů s buněčnými sferoidy

Bc. Hana Moravčíková (M1)

Školitel: Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.

Moderní léčiva se často potkávají s problémem nízké rozpustnosti ve vodě a v důsledku toho i s nízkou biologickou dostupností po orálním podání. Jedním z možných řešení tohoto problému je tvorba nanokrystalů, částic složených z jádra tvořeného účinnou látkou a obalu ze surfaktantů, které díky velkému specifickému povrchu urychlují rozpouštění léčiv. V této práci byla pro přípravu nanokrystalů využita látka kurkumin, která má široké spektrum biologických účinků, nízkou orální biologickou dostupnost a vykazuje fluorescenci. Při testování léčiv je také často snaha o tvorbu spolehlivějšího *in vitro* modelu, který by byl podobnější tkáním v cílové oblasti a díky kterému by bylo možné lépe sledovat interakce účinných látek s cílovou tkání a omezit množství testování *in vivo* na zvířecích modelech. Tímto modelem byly v této práci buněčné sferoidy linie HT-29 (Obrázek 1). Byl zkoumán vliv velikosti a doby působení nanokrystalů na buněčné sferoidy a tyto interakce byly vyhodnoceny pomocí konfokální mikroskopie. Práce dále navrhuje budoucí výzkum zaměřený na aplikaci získaných poznatků na léčivo nintedanib, které se používá ke zpomalení progresu idiopatické plicní fibrózy.



Obrázek 1: Ilustrace buněčného sferoidu (modrá) interagujícího s nanokrystalami léčiva kurkumin (červená). Velikostní poměry objektů v ilustraci nejsou realistické.

Nanosuspension Preparation for Effective Nebulization of Poorly Water-Soluble Drugs

Bc. Hynek Housar (M1)

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

Bioavailability is a crucial metric for evaluating drug effectiveness in the pharmaceutical industry. Modern drug development, driven by combinatorial chemistry and innovative design, often results in formulations with higher molecular weights, increased lipophilicity, and, notably, lower hydrophilicity. For a drug to be absorbed via the portal vein and thus act, it must be present in its solute form after administration. Therefore, the solubility of drugs in water plays a vital role in determining bioavailability. However, this route can be overcome by lipid-based formulations that are preferentially absorbed via the lymphatic system. Our long-term research is dedicated to enhancing the viability of water-insoluble cannabinoids for use in treating rheumatoid arthritis. In this project, we optimized micro- and nanoemulsions, which were validated through *in vivo* studies involving both oral and intravenous administration. Based on the bioavailability results, a focused study was conducted on nanoparticles. Nanoparticle formulations were evaluated based on their composition, surfactant type, and size distribution regarding their final bioavailability. The system was further developed towards the solid form to increase shelf life while conserving high bioavailability.

Příprava a charakterizace Pd/SSZ-13 jako aktivního materiálu pro adsorpci NO_x

Bc. Marek Martinian Kolátor (M2)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Výfukové plyny, které jsou produkovány automobilovou dopravou, se významně podílejí na znečištění ovzduší. Mezi hlavní zařízení pro odstranění produkovaných zplodin patří například trojcestné katalyzátory (angl. three-way catalyst neboli TWC) nebo katalyzátory pro selektivní redukci oxidů dusíku (SCR). Tyto katalyzátory ale nefungují při nízkých teplotách, a proto jsou v dnešní době studené starty stále jedním z hlavních problémů. Možné řešení tohoto problému nabízejí pasivní adsorbéry NO_x (PNA), které slouží k zachycení oxidů dusíku při nízkých teplotách. Při vyšších teplotách, kdy TWC a SCR dosáhnou optimální provozní režim, jsou pak zachycené NO_x desorbovány a účinně zredukovány. Tato práce se věnovala přípravě takového aktivního materiálu pro adsorpci a desorpci NO_x. Zeolit typu HSSZ-13 byl naimpregnován roztokem nitrátu Pd, sušen a následně kalcinován tak, aby došlo k navázání jednotlivých kationtů Pd na Brönstedova kyselá centra ve struktuře zeolitu. Tím byla získána vysoká disperze paládia a tato aktivní místa umožnila požadovanou adsorpci NO za nízkých teplot. Připravené vzorky byly charakterizovány pomocí skenovací a transmisní elektronové mikroskopie a chemisorpce pro určení počtu aktivních míst.

Testování Pd/SSZ-13 jako aktivního materiálu pro adsorpci NO_x

Bc. Zuzana Coufalová (M1)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Automobily se spalovacími motory významně přispívají k znečištění ovzduší. Jednou z největších výzev je snižování emisí oxidů dusíku (NO_x) u dieselových motorů. Většinou se používá systém selektivní katalytické redukce (SCR). K jeho fungování je nutný amoniak (NH₃) vzniklý tepelným rozkladem vodného roztoku močoviny, který je známý jako přísada AdBlue. Redukcí NO_x v SCR vzniká dusík (N₂) a vodní pára (H₂O). Proces SCR začíná být účinný od teploty přibližně 200 °C, ale při nižších teplotách během studeném startu může docházet k úniku NO_x. Pro potlačení tohoto nežádoucího jevu je možné přidat do systému čištění výfukových plynů pasivní adsorbér NO_x (PNA), který dočasně zachytává NO_x při nižších teplotách a uvolňuje je po zahřátí na provozní teplotu, kdy už mohou být účinně zredukovány pomocí SCR. Jako materiál pro PNA byl v této práci zvolen Pd/SSZ-13 zeolit, protože je dostatečně stabilní a schopen zachytávat NO_x za nízkých teplot. V laboratorním reaktoru byla testována adsorpční kapacita i rychlost adsorpce a desorpce NO_x na tomto práškovém katalyzátoru. Naměřená data umožňují vyhodnocení kinetických parametrů, díky kterým lze pak simulovat provoz celého kombinovaného systému PNA-SCR a najít jeho vhodnou konfiguraci pro dosažení vysoké konverze NO_x.

Crystallinity change of semi-crystalline polyolefins during the sorption of penetrants

Bc. Ondrej Melo (M1)

Supervisor: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Polyethylene (PE) is one of the most important and widely produced polymer materials. While many studies have examined sorption processes in PE, most assume crystallinity remains constant and unaffected by sorption. In contrast, this study demonstrates that crystallinity changes occur during penetrant sorption, altering the semi-crystalline morphology of PE. Using time-domain nuclear magnetic resonance (TD-NMR), we quantify these crystallinity changes during the sorption of various gaseous penetrants. Experiments conducted from ambient temperature up to 55 °C reveal the effect of elevated temperature on sorption behaviour. Additionally, the crystallinity changes dynamics observed with TD-NMR provides insights into diffusion processes in PE, which are essential for understanding polymerization reaction and degassing kinetics.

Stanovení konvektivní složky při měření tepelného toku v prostředí požáru

Bc. Dalibor Krunt (M1)

Školitel: doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

Požáry představují jedny z nejhorších typů havárií nejen v chemickém průmyslu, neboť často způsobují velké materiální škody a ztráty na životech. Zásahující hasiči čelí extrémnímu nebezpečí kvůli vysokým teplotám, toxickým plynům a kouři, který zhoršuje viditelnost. Požární inženýrství se snaží zlepšit bezpečnost a ochranu jak zasahujících jednotek, tak majetku. Ke zjištění tepelného toku se dnes používají nákladné a křehké senzory, což však komplikuje jejich využití v terénních podmínkách. Hledá se proto alternativa, kterou by mohl být deskový termočlánek, jenž je jednodušší, odolnější a levnější. Jedná se o zařízení skládající se z kovové destičky, opláštěvaného termočláneku a izolace.

Pro spolehlivé měření je potřeba optimalizovat provedení termočláneku pro náročné podmínky. Zaměřím se na výběr materiálů izolace a spojení izolace s termočlánekem. Provedení musí být takové, aby odolalo vysokým teplotám, vykazovalo mechanickou odolnost a umožnilo co nejpřesnější měření. Výzkum bude probíhat ve spolupráci s Technickým ústavem požární ochrany HZS ČR. Měření budou probíhat na kónickém kalorimetru. Dále bude provedena kalibrace, která zajistí stabilní a spolehlivá data o tepelném toku v proměnlivých podmínkách požáru.

Characterization of Redox Flow Battery Tanks using Computational Fluid Dynamics (CFD)

B.Sc. Martin Matej (M1)

Školitel: doc. Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.

Use more renewable sources! That is the maxim, under which the industries race to shift from mainstream energy sources to renewable ones. Consequently, this has led to the increased use of Energy Storage Systems (ESS) to mitigate the unfavorable consequences of the transformation. One of many of such systems is the Redox Flow Battery (RFB). Among the advantages of this energy storage are a longer cycle life and lower environmental footprint compared to standard batteries, as well as their simple scalability. On the other hand, their energy density is not as high as that of standard batteries, limiting them to stationary ESS uses only. This work characterizes the flow in the storage tanks of the RFB through Computational Fluid Dynamics (CFD). Selected tank geometries are characterized under different operation conditions. The observations aim to identify the optimal conditions and subsequently increase the efficiency of the system.

Modelling of emulsion copolymerization: Identifiability analysis

Bc. Monika Poláčková (M1)

Školitel: doc. Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.

A common challenge encountered in the mathematical modelling of engineering processes is the presence of numerous input parameters, which can reduce the overall robustness and predictive power of the model. To identify the most influential parameters in complex models, the Global Sensitivity Analysis (GSA) is frequently employed, analysing how changes across the whole input space of parameters affect the model outputs. This work focuses on the emulsion polymerization process, a type of heterogeneous free-radical polymerization that is widely used in the manufacture of latex products for use in coatings, adhesives, pigments or biomedical applications. The model addresses the copolymerization of styrene and butyl acrylate in a semi-batch, isothermal reactor, considering complex kinetics and mass transfer between three phases: monomer droplets, latex particles and the aqueous phase. The Morris screening method, one of the GSA methods, was employed to statistically evaluate the relative effect of each input parameter on the predicted outputs (conversion of monomers, latex solid content, average polymer molecular weights). This allows for the model reduction and is vital in the process of parameter estimation from experimental data.

Zpracování farmaceutických nanosuspenzí metodou rozprašovacího sušení

Bc. Vojtěch Hampl (M1)

Školitel: prof. František Štěpánek, Ph.D.

Hlavním neduhem perorálně podávaných léčiv je jejich nízká biologická dostupnost, způsobená nízkou rozpustností a permeabilitou. Ty jsou pro většinu nových léčiv a látek s potenciálním léčivým účinkem velmi nízké, což má za následek komplikace s jejich vývojem a testováním, nebo jejich úplné zavrnutí. Tento problém se často řeší syntézou proléčiv, nebo zvýšením množství léčiva a excipientů, což vede ke zvýšení nákladů, nebo u konkrétní látky není tento postup vůbec možný. Možným řešením, kterým se ve své práci zabývám, je příprava účinných farmaceutických látek ve formě koloidně stabilní nanosuspenze připravenou mokrým mletím jako meziprojektu a následnou úpravou rozprašovacím sušením. Léčiva ve formě nanosuspenze dosahují v disolučních testech řádově rychlejšího uvolňování než obvyklá prášková forma a spolu s možným dosažením lokálního přesycení může dojít ke zvýšení biologické dostupnosti. Následnou úpravou rozprašovacím sušením lze z nanosuspenze získat práškovou formu, která ve vodném roztoku rychle disperguje a tím rychle uvolňuje léčivo. Cílem práce je studium parametrů ovlivňující rozprašovací sušení a jejich optimalizace pro možnost zpracování nanosuspenze připravovanou kontinuálně či vsádkově v průmyslově využitelném mlýnu.

Chemické inženýrství VIII

MÍSTO: BIII

KOMISE

Předseda komise: Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.

Členové komise:

- Ing. Petr Mazúr, Ph.D.
- Ing. Patrik Bouřa
- Ing. Petr Fatka
- Ing. Michaela Mikešová (Mondi)
- Ing. Jiří Charvát Ph.D. (Pinflow energy storage)

SEZNAM SOUTĚŽÍCÍCH

- **Bc. Marek Drápela**, M1, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek, *The impact of surface morphology of powders on contact charging*
- **Bc. Matěj Honzík**, M1, prof. Ing. Petr Kočí Ph.D., *Katalytický rozklad amoniaku pro použití ve vysokoteplotním palivovém článku*
- **Bc. Romana Hupková**, M1, doc. Ing. Viola Tokárová, Ph.D., *Ako možno študovať tuberkulózu s použitím mikrofluidných čipov?*
- **Bc. Jan Kršek**, M1, Ing. Matyáš Marek, *Membrane screening for microemulsion redox flow batteries*
- **Bc. Barbora Litomiská**, M1, Ing. Petr Mazúr, Ph.D., *Nano-suspenzní elektrolyty na bázi polypyrrolu pro redoxní průtočné baterie*
- **Bc. Jaroslav Macas**, M1, prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha, *Příprava tlakové smyčky Hmetru*
- **Bc. Juraj Volešíni**, M1, Ing. Petr Mazúr, Ph.D., *Optimization of an organic redox flow battery model: Impact of electrochemical kinetics description on performance metrics*
- **Bc. Lukáš Ziebiker**, M1, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D., *Stanovení emisí dieselového generátoru elektřiny vzhledem k normě EU Stage V*
- **Bc. Adriana Augustínová**, M2, Ing. Mária Zedníková, Ph.D., *Stanovenie rozpustnosti hélia v eutektiku Pb-16Li*
- **Bc. Kryštof Jureček**, M2, prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha, *Vývoj metodiky kalibrace Hmetru*

The impact of surface morphology of powders on contact charging

Bc. Marek Drápela (M1)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

When two objects, such as a particle and a plate, are brought into contact, friction between the surface of the particle and the plate creates a surface charge – a phenomenon known as triboelectric charging. This effect can be a problem in industrial processes, particularly in the manufacturing of granular materials, e.g., polymers or pharmaceuticals, causing problems such as temperature control issues or product inhomogeneity due to agglomeration. Understanding triboelectric charging in insulator powders is therefore essential for industry and even for safety reasons, as triboelectric charging can generate a potentially dangerous spark. This work investigates the contribution of surface morphology to polyolefin samples charging. Samples were placed into stainless steel cells and collisions were enhanced by vibrating. Charge evolution in time was measured to determine the saturation charge and charging rate constant. These parameters play a key role in predicting and controlling the charging behaviour. Obtained results with samples of different sizes and charged at different collision velocities also indicate that the charge transfer correlates with the actual contact area, providing new insights for a better understanding of tribo-charging phenomena.

Katalytický rozklad amoniaku pro použití ve vysokoteplotním palivovém článku

Bc. Matěj Honzík, M1

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí Ph.D.

V důsledku globální změny klimatu je nutné postupně nahrazovat fosilní paliva obnovitelnými zdroji. Výroba elektrické energie z obnovitelných zdrojů je však značně nestabilní. Rozdíly v okamžité spotřebě a výrobě elektřiny mohou být krátkodobé v průběhu dne, ale i sezónní. Kvůli těmto nestabilitám v elektrické síti je nezbytné vyvinout řešení i pro dlouhodobé ukládání energie. Jako bezuhlíkové zdroje s velkou energetickou hustotou se nabízí stlačený H_2 , nebo kapalný NH_3 . Tyto látky lze efektivně využít pro generování elektrické energie v palivových článcích s pevným elektrolytem (SOFC). Dlouhodobé vystavení SOFC vysokým koncentracím NH_3 ovšem způsobuje degradaci článku. Předcházet tomuto jevu je možné přiváděním NH_3 ve směsi s H_2 , nebo úplným rozkladem amoniaku na dusík a vodík v předřazeném katalytickém reaktoru. Tato práce se věnuje testování připraveného práškového katalyzátoru Ni/Al_2O_3 pro štěpení NH_3 . Aktivita katalyzátoru a konverze NH_3 jsou měřeny v laboratorním reaktoru za různých teplot, koncentrací a průtoků plynu. Naměřené konverze jsou porovnány s vypočítanými rovnovážnými konverzemi a následně jsou navrženy vhodné provozní podmínky reaktoru pro štěpení amoniaku.

How can we study tuberculosis using microfluidic chip?

Bc. Romana Hupková (M1)

Školitel: doc. Ing. Viola Tokárová, Ph.D.

Tuberculosis (TB) is a highly infectious disease which continues to infect 10 million people and cause over a million deaths annually. This is despite the high availability of the BCG vaccine and various antibiotics and largely due to rising antibiotic resistance. Traditional methods of TB research are complicated by the need for biosafety level 3 (BSL-3) facilities for handling *Mycobacterium tuberculosis* bacteria. Using the non-pathogenic *Mycobacterium smegmatis* as a model organism leverages its physiological and metabolic similarities to *M. tuberculosis*, while providing a safer and more accessible alternative for studies in BSL-1 laboratories. Microfluidic chips using *M. smegmatis* allow the study of microbial interactions, drug resistance, and cellular responses under precisely controlled, simulated *in vivo* conditions. Studying *M. smegmatis* adhesion, proliferation, and hypoxia responses provides valuable insights into TB pathology, resistance mechanisms, and potential treatment strategies—advancing our understanding of TB-like behaviors and enhancing approaches to combat antibiotic-resistant TB.

Membrane screening for microemulsion redox flow batteries

Bc. Jan Kršek (M1)

Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Energy from renewable sources fluctuates daily and seasonally, requiring efficient storage to balance excesses and shortages. Redox flow batteries (RFBs) offer potential solution with great scalability and safety. Standard RFBs electrolytes use metallic active species, however, metals are scarce, and their price is affected by the global market. Thus, organic compounds are sought as a substitute to improve techno-economical battery parameters. Lower solubility of organic active compounds in aqueous electrolytes can be overcome by use of microemulsion (mE) electrolytes, consisting of a polar (water) and a nonpolar solvent and a surfactant. This enables to dissolve non-polar organic species while keeping sufficient conductivity and safety of aqueous system. However, organic solvents may negatively affect polymeric ion-exchange membranes, mutually separating both battery half-cells, possibly causing an internal short circuit, fouling or electrolyte crossover. This work evaluates selected commercially available ion-exchange membranes for mE RFB. Membrane stability in a mE is assessed from resistance and permeability measurements in a RFB lab cell, with subsequent assessment of mechanical stability and dimensional changes, to identify suitable candidates for future mE RFBs.

Nano-suspenzní elektrolyty na bázi polypyrrolu pro redoxní průtočné baterie

Bc. Barbora Litomiská (M1)

Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Redoxní průtočné baterie (RPB) představují pokročilou technologii pro skladování energie, která se oproti tradičním akumulátorům vyznačuje několika výhodami. Tyto baterie skladují energii v aktivních látkách elektrolytů, což umožňuje oddělit kapacitu a výkon, a tím efektivněji nastavit parametry uložení. Další výhodou vodných RPB je jejich vyšší bezpečnost (nižší riziko hoření a výbuchu). Nevýhodou je naopak jejich nízká hustota energie, která je omezena rozpustností aktivních látek. Použití aktivních látek ve formě suspenzí představuje jednu z možných cest k navýšení hustoty energie. Předkládaná práce se zaměřuje na přípravu a základní charakterizaci nanočástic polypyrrolu pro využití v nano-suspenzních elektrolytech RPB. Polypyrrol byl syntetizován radikálovou oxidační polymerací z monomeru pyrrolu za využití oxidačního činidla chloridu železitého. Pro udržení koloidní stability nanočástic byl během syntézy přítomen polyvinylalkohol, jenž se sorbuje na povrch nanočástic. Byla zkoumána závislost koloidní stability nanočástic na koncentraci polypyrrolu v demineralizované vodě. Byla sledována stabilita suspenzí nanočástic v čase pro různé koncentrace nanočástic a přídavky vodivostního aditiva kyseliny sírové. Dále byly měřeny fyzikálně-chemické parametry, jako zeta potenciál částic a pH, iontová vodivost a viskozita různě koncentrovaných suspenzí, s cílem optimalizovat jejich vlastnosti pro danou aplikaci.

Příprava tlakové smyčky Hmetru

Bc. Jaroslav Macas (M1)

Školitel: prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha

Hmetr je zařízení určené k měření koncentrace vodíku v plynech a kapalinách. Vývoj přístroje je v našem případě zaměřen na chladio v primárním okruhu jaderné elektrárny, kde je pomocí vodíku snižována v chladiu koncentrace rozpuštěného kyslíku. Kyslík je pro chladič okruh nežádoucí, protože způsobuje korozi. Vodík difunduje z měřeného prostředí skrze semipermeabilní membránu čidla přístroje na povrch elektrody, kde je spotřebováván, při kterémžto ději vytváří elektrický signál. V ustáleném stavu je signál úměrný koncentraci rozpuštěného vodíku. Cílem práce je ověřit, zda je závislost signálu Hmetru na koncentraci vodíku lineární a zda je čidlo nezávislé na celkovém tlaku měřeného prostředí, pokud je fugacita vodíku konstantní.

Optimization of an organic redox flow battery model: Impact of electrochemical kinetics description on performance metrics

Bc. Juraj Volešíni (M1)

Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Organic redox flow batteries (ORFBs) have a vital role in the advancement of energy storage solutions, especially in light of the increasing demand for renewable energy. Utilizing organic materials, ORFBs present a sustainable and cost-effective alternative to traditional vanadium-based systems. In this work, we examined how different descriptions of electrode reaction kinetics affect a mathematical model of an ORFB. The model tracks the composition and volume of both electrolytes within the battery operation. Ion movement across the membrane follows the Nernst-Planck equation, with water transport driven by osmotic pressure differences. Electrochemical properties are modeled using Ohm's law for voltage drop and the Nernst equation for equilibrium potential. To estimate electrode overpotentials, we considered two widely used kinetic descriptions: the Butler-Volmer and Tafel equations. The Butler-Volmer equation provides a comprehensive description of electrode kinetics but is relatively complex to implement, while the Tafel equation is a simplified form of the Butler-Volmer equation and easier to apply. Finally, model results were compared to experimental data to identify which kinetic description offers the best fit.

Stanovení emisí dieselového generátoru elektřiny vzhledem k normě EU Stage V

Bc. Lukáš Ziebiker, M1

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí Ph.D.

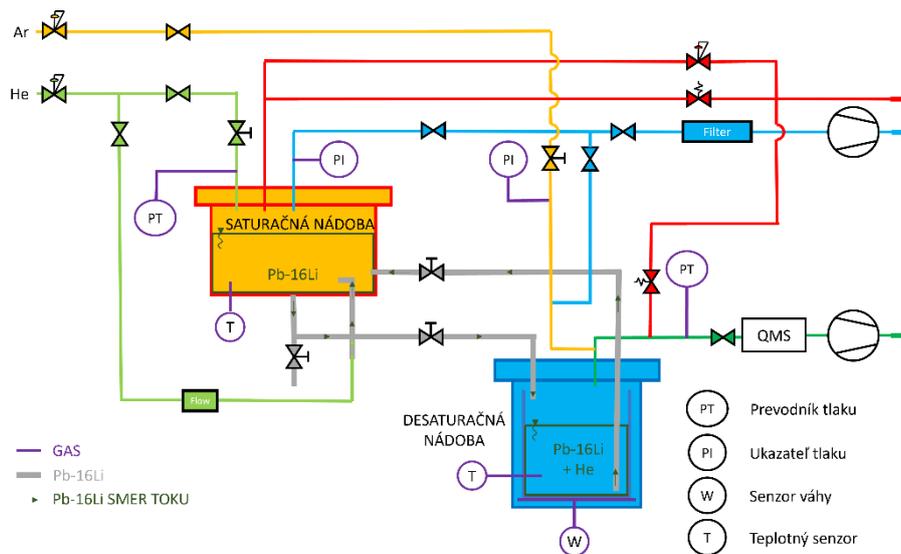
V současné době se snaží společnost čím dál více přiklánět k obnovitelným zdrojům energie, které však trpí nestabilitou dodávaného výkonu. Proto budou mít tradiční technologie i v dohledné době své využití. Výhodou generátorů poháněných spalovacím motorem je především schopnost rychlého nájedu na požadovaný výkon, a tedy rychlá reakce na výkyvy ve spotřebě elektřiny. To je i případ studovaného dieselgenerátoru se zdvihovým objemem 19,6 L a maximálním výkonem 725 kW. Pro použití tohoto generátoru v souladu s evropskou normou Stage V bylo nutné emise proměřit a s ohledem na výsledky navrhnout vhodný katalytický systém, který by umožnil splnění emisních limitů. Bylo proměřeno pět provozních bodů generátoru při různé zátěži. Hmotnost pevných částic ve spalinách byla stanovena gravimetricky, koncentrace plynných složek byly měřeny pomocí FTIR a teploty termočlánkem. Údaje o průtoku paliva, vzduchu a výfukového plynu byly dopočteny z údajů řídicí jednotky motoru a z bilance. Následně byly změřené emise přepočítány na jednotky g/kWh dle normy Stage V a porovnány s jejími limity. U složek překračujících limity bylo navrženo řešení pomocí vhodných katalyzátorů a filtrů.

Stanovenie rozpustnosti hélia v eutektiku Pb-16Li

Bc. Adriana Augustínová (M2)

Školiteľ: Ing. Mária Zedníková, Ph.D.

Termonukleárna fúzia predstavuje dlhodobé riešenie udržateľnej výroby energie. Breeding blanket (BB) je jedna z hlavných komponent fúzneho reaktoru, ktorá zaisťuje sebestačnosť trícia – paliva pre fúziu reakciu. V niektorých konceptoch BB prúdi tekutá eutektická zliatina olovo-lítia (Pb-16Li), ktorá reaguje s neutrónmi. Pri tejto reakcii vzniká žiadané trícium, množstvo energie a ako vedľajší produkt hélium. Práve hélium môže predstavovať problém kvôli potenciálnej tvorbe plynových bublín, ktoré by mohli zhoršiť výkon BB. Rozpustnosť hélia v tekutých kovoch je extrémne nízka, čo komplikuje jeho presné stanovenie. Teoretické odhady rozpustnosti hélia v zliatine Pb-16Li sa výrazne líšia v závislosti od použitej metódy a výpočtových prístupov, čo vedie k nejednotným výsledkom. Experimentálnych údajov je v tejto oblasti veľmi málo, pretože meranie tak malých koncentrácií hélia je technicky náročné. Táto práca si kladie za cieľ otestovať princíp fungovania aparatury (**Obr.1**) na meranie rozpustnosti hélia v eutektickej zliatine s detekčným limitom približne 10^{-14} mol He na 1 mol zliatiny Pb-16Li a predstaviť problémy ovplyvňujúce spoľahlivosť určenia rozpustnosti.



Obr.1 : Schéma aparatury na meranie rozpustnosti hélia v Pb-16Li.

Vývoj metodiky kalibrace Hmetru

Bc. Kryštof Jureček (M2)

Školitel: prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha

V rámci této práce je navrhován a vyvíjen vestavěný (embedded) systém pro amperometrický vodíkový senzor (Hmetr) v integrovaném vývojovém prostředí STM32CubeIDE. Pro implementaci tohoto systému je využívána vývojová deska STM32 Nucleo, která poskytuje flexibilitu a dostatečný výkon pro sběr a zpracování dat z amperometrického senzoru a pro řízení dalších potřebných komponent nezbytných pro správný chod celého zařízení. Systém zahrnuje řízení ventilů umožňujících přívod požadovaného média v jednotlivých fázích daného procesu, čerpadla sloužícího k přičerpání kalibračního roztoku, grafického displeje poskytujícího přehled o průběhu procesu a dalších periférií. S rostoucím významem vodíku v různých odvětvích, jako jsou energetika, chemie či ochrana životního prostředí, je nezbytné zajistit spolehlivé a efektivní monitorování jeho koncentrace.

Ústav fyziky a měřicí techniky (444)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

RNDr. Pavel Galář, Ph.D.

SEZNAM SEKČÍ

16. [Fyzika a měřicí technika I](#)
17. [Fyzika a měřicí technika II](#)
18. [Fyzika a měřicí technika III](#)

SEZNAM SOUTĚŽÍCÍCH

1. **Amálie Burešová**, B3, Ing. Bc. Michal Novotný, Ph.D., *Nanodrátky na povrchu tenkých vrstev kovů*
2. Bc. **Lucie Dorazilová**, M1, Dr. Mgr. Jana Jirešová, *Získávají bakterie rezistenci na netermální plazma?*
3. **Ondřej Grundfest**, B3, RNDr. Pavel Galář, Ph.D., *Optimalizace perovskitových vrstev pro fotovoltaické využití*
4. **Christopher William Heinz**, B3, Dr. Mgr. Jana Jirešová, *Vliv netermálního plazmatu na klíčivost semen Albízie růžové*
5. **Martin Jakšík**, B3, Ing. Jan Hrudka, *Vývoj a testování nízkonákladových raketových tuhých pohonných hmot*
6. Bc. **Hana Josífková**, M2, Ing. Jan Hrudka, *Využití genetických algoritmů k automatizaci návrhu raketových motorů*
7. **Lucie Kasýková**, B3, RNDr. Pavel Galář, Ph.D., *Příprava křemíkových nano-heterostruktur pomocí dvoustupňového plazmatického reaktoru*
8. **Jan Kotrba**, B2, Ing. Jan Hrudka, *Měření a zpracování dat z letu rakety*
9. **Eliška Koželuhová**, B2, Ing. Jan Hrudka, *Simulace charakteristik pohonných hmot pro raketové motory*
10. Bc. **Václav Kukačka**, M2, Ing. Ladislav Fišer, Ph.D., *Sběr dat z reaktivního motoru*
11. Bc. **Patrik Kula**, M1, Ing. Přemysl Fitl, Ph.D., *Simulace SAW senzorů pro detekci plynu*

12. **Jiří Kuthan**, B2, Ing. Jan Hrudka, *Charakterizace fyzikálních vlastností raketových paliv na bázi cukrů*
13. Bc. **Miriam Magočiová**, M2, prof. Dr. Ing. Martin Vrňata, *Zlepšenie parametrov detekcie na chemirezistoroch pomocou algoritmov strojového učenia*
14. **Jan Mišek**, B3, Ing. Ladislav Fišer, Ph.D., *Optimalizace aparatury pro senzory s nanostrukturovanou vrstvou*
15. Bc. **Denis Najman**, M1, Ing. Bc. Michal Novotný, Ph.D., *Materiál Cu₃N a problematika nitridových senzorů*
16. **Iveta Pršalová**, B3, doc. Ing. Vladimír Scholtz, PhD, *Zviditeľňování latentních otisků prstů na nábojnicích pomocí nízkoteplotního plazmatu*
17. **Michal Roštejnský**, B2, Ing. Jan Hrudka, *Vývoj řídicí jednotky pro bezpilotní letoun*
18. **David Soukup**, B2, Ing. Jan Hrudka, *Návrh reaktoru na syntézu tuhé raketové pohonné hmoty*
19. **Adriana Šedová**, B3, Dr. Mgr. Jana Jirešová, *Porovnání různých způsobů ošetření potravin netermálním plazmatem a plazmatem aktivovanou vodou*
20. **Hana Šikolová**, B3, Ing. Ladislav Fišer, Ph.D., *Vliv netermálního plazmatu na elektroniku*
21. Bc. **Tomáš Albert Štefanov**, M2, prof. Dr. Ing. Martin Vrňata, *Návrh a realizace měřících systémů pro senzory na bázi iontových kapalin*
22. **Michal Vašíček**, B3, RNDr. Pavel Galář, Ph.D., *Příprava křemíkových kvantových teček o efektivní luminiscenci a dobré dispersibilitě*
23. Bc. **Radim Weisser**, M2, RNDr. Pavel Galář, Ph.D., *Hybridní bateriové a superkondenzátorové systémy založené na vysoce koncentrovaných vodných elektrolytech*

SPONZOŘI ÚSTAVU FYZIKY A MĚŘICÍ TECHNIKY



LABORATORY IMAGING s.r.o.
Image Analysis Systems



vesmír



Fyzika a měřicí technika I

MÍSTO: B212

KOMISE

Předseda komise: doc. ing. Vladimír Scholtz. Ph.D.

Členové komise:

- Dr. Mgr. Jana Jirešová
- Ing. Eliška Lokajová
- Ing. Filip Matějka
- Ing. Petr Hakl (Ministerstvo Obrany ČR)

SEZNAM SOUTĚŽÍCÍCH

- **Martin Jakšík**, B3, Ing. Jan Hrudka, *Vývoj a testování nízkonákladových raketových tuhých pohonných hmot*
- Bc. **Hana Josífková**, M2, Ing. Jan Hrudka, *Využití genetických algoritmů k automatizaci návrhu raketových motorů*
- **Jan Kotrba**, B2, Ing. Jan Hrudka, *Měření a zpracování dat z letu rakety*
- **Eliška Koželuhová**, B2, Ing. Jan Hrudka, *Simulace charakteristik pohonných hmot pro raketové motory*
- Bc. **Václav Kukačka**, M2, Ing. Ladislav Fišer, Ph.D., *Sběr dat z reaktivního motoru*
- **Jiří Kuthan**, B2, Ing. Jan Hrudka, *Charakterizace fyzikálních vlastností raketových paliv na bázi cukrů*
- **Michal Roštejnský**, B2, Ing. Jan Hrudka, *Vývoj řídicí jednotky pro bezpilotní letoun*
- **David Soukup**, B2, Ing. Jan Hrudka, *Návrh reaktoru na syntézu tuhé raketové pohonné hmoty*

Vývoj a testování nízkonákladových raketových pohonných hmot

Martin Jakšík (B3)

Školitel: Ing. Jan Hrudka.

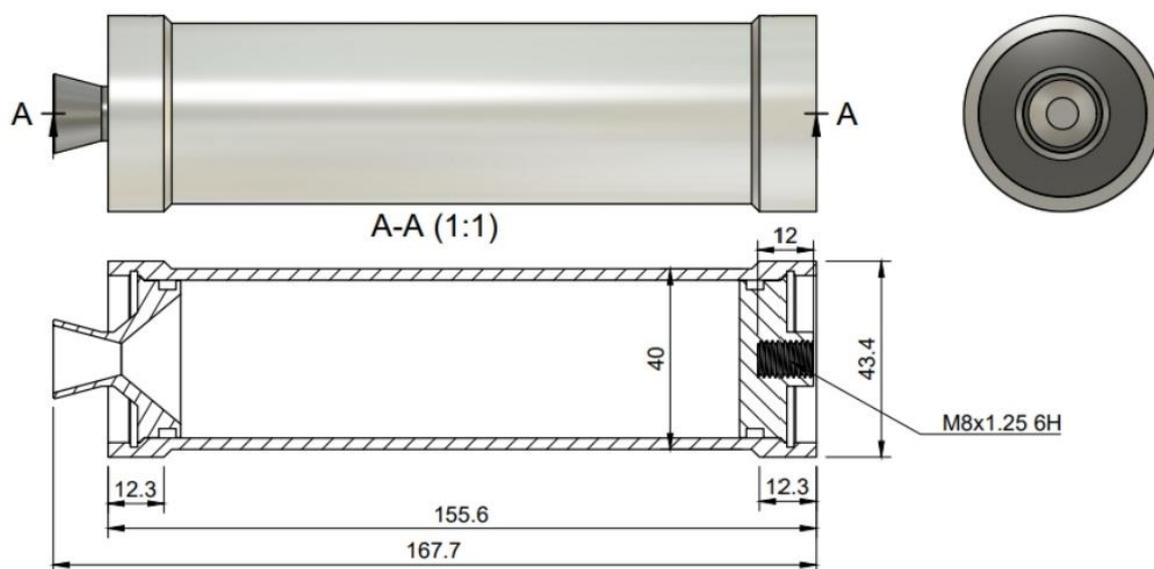
Tato práce vznikla s motivací najít alternativní způsob výroby raketového paliva, který bude technicky i finančně méně náročný než konvenční produkty na trhu. Cílem je navrhnout směs, která bude stabilní, účinná, cenově dostupná a vhodná pro snadnou přípravu a skladování v rámci masové výroby. Zaměřuji se na stabilitu tuhé pohonné hmoty, konkrétně na odolnost a chování směsi v extrémních podmínkách s cílem zajistit její spolehlivost při praktickém využití. Degradace tuhé pohonné hmoty bude testována za různých teplotních podmínek, počínaje sníženými teplotami, které simulují podmínky ve vyšších nadmořských výškách. Testy budou provedeny v několika opakováních, aby byly maximalizovány negativní efekty. Výsledky budou následně porovnány s kontrolními vzorky paliva, uchovávanými v ideálních podmínkách. Dále bude testována odolnost směsi proti mikrobiologickým organismům, včetně vlivu antiseptických přísad, které by mohly zpomalit degradaci paliva a výrazně prodloužit jeho trvanlivost. Tyto výsledky přispějí k vývoji paliv vhodných pro dlouhodobé a spolehlivé použití v náročných podmínkách.

Využití genetických algoritmů k automatizaci návrhu raketových motorů

Bc. Hana Josífková (M2)

Školitel: Ing. Jan Hrudka

Jedním z nejpragmatičtějších způsobů využití výpočetních přístrojů je predikce. Respektive možnost provést simulaci experimentu ještě před jeho zahájením a tím optimalizovat nejen samotný počet experimentů, ale i zvýšit bezpečnost. Návrh a konstrukce raketových motorů má spoustu úskalí spojených s iterativním vývojem, během kterého je každý krok časově i finančně náročný. V mé práci se zabývám vytvořením programu, který bude schopen tento iterativní vývoj urychlit vytvořením lepšího počátečního návrhu raketového motoru. Navržený program bude založen na kombinaci numerických simulací a optimalizačních algoritmů, které umožní rychle vyhodnotit různé konstrukční parametry. Program využije data ze simulovaných experimentů ke zlepšení nových návrhů, čímž zkrátí celkový cyklus vývoje. Na základě mého programu bude navržen a zkonstruován raketový motor, který bude porovnán s výsledky programu pro ověření jeho správnosti.



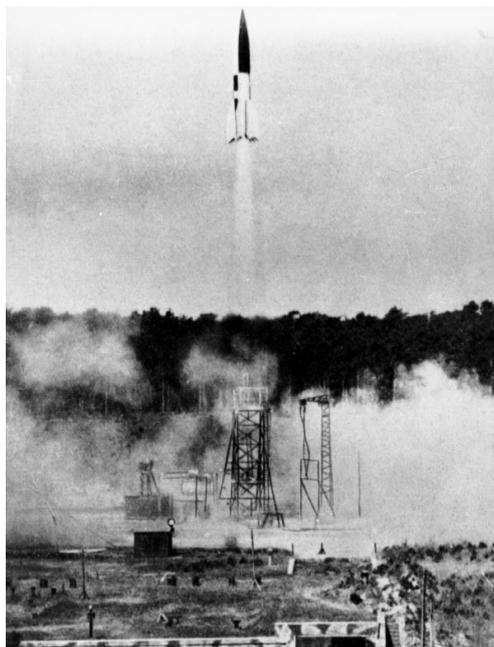
Příklad návrhu raketového motoru CRS

Měření a zpracování dat z letu rakety

Jan Kotrba (B2)

Školitel: Ing. Jan Hrudka

Raketa je již od pradávna klíčovým nástrojem obrany, jehož význam stále roste a stává se jednou z národních priorit pro zajištění naší suverenity. K dosažení požadované rychlosti, doletu a především ovladatelnosti je nezbytné mít spolehlivou a cenově efektivní řídicí jednotku. Ta upravuje trajektorii rakety například pomocí gimbálového řízení tahu nebo aerodynamické stabilizace, čímž umožňuje efektivní doručení nákladu na cílové místo. Cílem této práce je navrhnout lehkou a ekonomicky dostupnou řídicí jednotku pro rakety krátkého až středního doletu, která umožní stabilizaci a základní telemetrii nejen pro dynamické testy, ale i pro budoucí praktické aplikace. K tomu je potřeba, aby jednotka měla vysokou obnovovací frekvenci a byla schopna vyhodnocovat data z akcelerometru a gyroskopu i při vysokém přetížení. Na základě těchto dat bude vypočítán potřebný moment síly pro korekci trajektorie a vektor síly pro stabilizační prvky. Konečnou a zásadní vlastností všech komponent je jejich kompaktní rozměr, což umožní využití jednotky i pro navádění raket s menším průměrem.



Raketa V2 čtyři sekundy po startu (zdroj: www.bundesarchiv.de)

Simulace charakteristik pohonné hmoty pro raketové motory

Eliška Koželuhová (B2)

Školitel: Ing. Jan Hrudka

Tuhá pohonná hmota je stále často využívána ve vojenském, vesmírném či zábavní průmyslu. Studie složení a výkonu tuhých pohonných hmot je nedílnou součástí raketového inženýrství, experimentální část výzkumu je však časově i finančně náročná. Cílem této práce je usnadnění experimentální části výzkumu zapojením simulačních technik. Práce bude modelovat různá složení a poměry palivové a oxidační části tuhých pohonných hmot za účelem určení jejich výkonu. Analýzou a komparací získaných dat můžeme optimalizovat volbu a vývoj potřebné pohonné hmoty. Pro validaci budeme data získaná simulacemi porovnávat s výsledky reálných experimentů. Modelování by mělo prohloubit pochopení vlivu složení tuhé pohonné hmoty na výkon reaktivních motorů a urychlit výrobní proces.

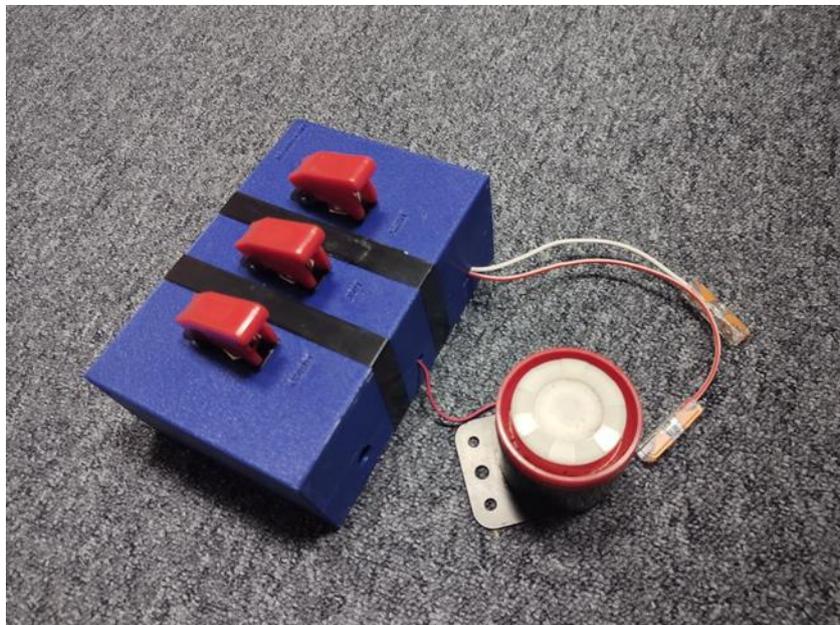


Sběr dat z reaktivního motoru

Bc. Václav Kukačka (M2)

Školitel: Ing. Ladislav Fišer Ph.D.

Projekt se soustředí na návrh a konstrukci specializovaného měřicího zařízení pro přesné hodnocení výkonu raketových motorů na tuhé pohonné hmoty, které jsou v posledních letech častým objektem nízkonákladového vývoje. Zařízení umožňuje shromažďovat a analyzovat klíčové parametry výkonu, jako je tah, tlak a teplota, což je nezbytné pro optimalizaci konstrukce a paliva raketového motoru. Vedle samotného měřicího zařízení je součástí projektu i vývoj bezpečného a spolehlivého odpalovacího mechanismu. Tento mechanismus je vybaven několika bezpečnostními spínači a akustickým varovným systémem pro ochranu obsluhy i okolí během testování. Elektronický modul zařízení zajišťuje automatizované spouštění motoru a simultánní sběr dat, která jsou klíčová pro zpětnou analýzu chování motoru za různých podmínek. Cílem tohoto projektu je nejen vytvořit dostupné zařízení, které umožní bezpečné a precizní měření výkonnostních parametrů raketových motorů, ale i přispět k rozvoji nízkonákladových technologií v oblasti raketového inženýrství. Výstupy projektu mohou být využity při vývoji malých raketových systémů a jako základ pro další výzkum a optimalizaci motorů na tuhé pohonné hmoty.



Odpalovací zařízení

Charakterizace fyzikálních vlastností raketových paliv na bázi cukrů

Jiří Kuthan (B2)

Školitel: Ing. Jan Hrudka

Nejjednodušší raketová paliva jsou v dnešní době směsi cukrů a dusičnanu draselného. Tato práce se zabývá srovnáním dvou konkrétních cukrů v této roli – sorbitolu a sacharózy. V případě čistých látek má sacharóza větší celkový impuls, ale jejich směs má lepší vlastnosti. Cílem práce je popsat tento efekt, vysvětlit co ho způsobuje a najít optimální směs. Kromě rozdílných vlastností při samotném spalování mají paliva i odlišné vlastnosti při přípravě a požadavky na ní. Například rozdílnou teplotu tání a viskozitu, což ovlivňuje kvalitu palivového článku při jeho odlití heterogenním rozložením palivové hmoty. Tato heterogenita vede k nerovnoměrnému hoření, což vede k vibracím, snížené stabilitě motoru a zvýšenému riziku exploze. Proto je důležité srovnat nejen spalné, ale i produkční vlastnosti různých směsí.



Vývoj řídicí jednotky pro bezpilotní letoun

Michal Roštejnský (B2)

Školitel: Ing. Jan Hrudka

Drony, neboli bezpilotní létající prostředky, prošly v posledních desetiletích dynamickým vývojem a staly se klíčovým nástrojem nejen v armádě a průmyslu, ale také v civilním sektoru. Dnes hrají zásadní roli v různých oblastech – od zábavy a sportu přes průzkumné mise až po záchranné operace či přepravu zásilek. Základem jejich pohybu jsou rychle rotující vrtule, které kompenzují tíhovou sílu a umožňují dronu levitovat, přičemž poskytují vysokou ovladatelnost, a to i při nižší vzorkovací frekvenci řídicí jednotky, avšak za cenu vyšší spotřeby energie. Díky sensorům, jako je akcelerometr, gyroskop nebo kamera, mohou drony stabilně létat desítky minut a operovat i v uzavřených prostorách. S technologickým pokrokem se konstrukce dronů neustále zlepšuje, což přináší vyšší přesnost, delší výdrž baterie a více funkcí. Cílem této práce je prozkoumat možnosti této technologie a navrhnout dron schopný přenášet náklad o hmotnosti 2,5 kg. První kroky zahrnují návrh dronu z komerčně dostupných součástek a použití veřejně dostupných softwarových knihoven pro ovládání motorů, čtení dat z akcelerometru a gyroskopu a komunikaci s řídicí jednotkou. Dlouhodobým cílem je snížit výrobní náklady, například 3D tiskem rámu a vrtulí, nebo vývojem vlastní řídicí jednotky s akcelerometrem a gyroskopem.



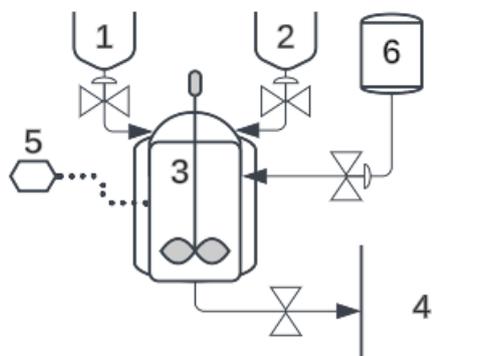
Klíčové komponenty pohonné jednotky dronu

Návrh reaktoru na syntézu tuhé raketové pohonné hmoty

David Soukup (B2)

Školitel: Ing. Jan Hrudka

Stav aktuálního světa nám připomíná, jak důležité je vyvíjet a zlepšovat obranné technologie, kdy se klade důraz na efektivitu a cenu. Jednou z kategorií jsou raketové technologie a s nimi se pojí levné experimentální pohonné hmoty, ale laboratorní výroba je nákladná, a proto je nutné přemýšlet i o průmyslové výrobě. Neoddělitelnou součástí průmyslových výrob jsou i stroje a zařízení, určené pro vlastní výrobu, a právě toto téma je náplní mé práce. Samotné výrobní zařízení je dvouplášťový míchaný reaktor, protože je jednoduchý na konstrukci a provoz. Tento typ je výhodný z hlediska zahřívání směsi odporovým drátem v plášti, tak i chlazením pomocí cirkulace vody. Se zahříváním se pojí i bezpečnost, kdy budou zahrnuty aktivní i pasivní prvky ochrany před vzplanutím směsi. Další část reaktoru je vypouštění a forma na palivové články. Posledním prvkem je samotné řízení reaktoru, které bude realizováno jak manuálně přes centrální řízení u reaktoru, tak i poloautomatickým systémem ovládaným počítačově.



1 - blokové schéma reaktoru (1 - zásobník na palivovou složku, 2 - zásobník na oxidant, 3 - reaktor, 4 - formy na články, 5 - centrální řízení a elektronika, 6 - zásobník na chladicí vodu)

Fyzika a měřicí technika II

MÍSTO: B224

KOMISE

Předseda komise: prof. Dr. Ing. Martin Vrnáta

Členové komise:

- Ing. Bc. Michal Novotný, Ph.D.
- Ing. Ladislav Fišer, Ph.D.
- Ing. Laura Thonova
- RNDr. Kateřina Kůsová, Ph.D. (FZU AVČR)

SEZNAM SOUTĚŽÍCÍCH

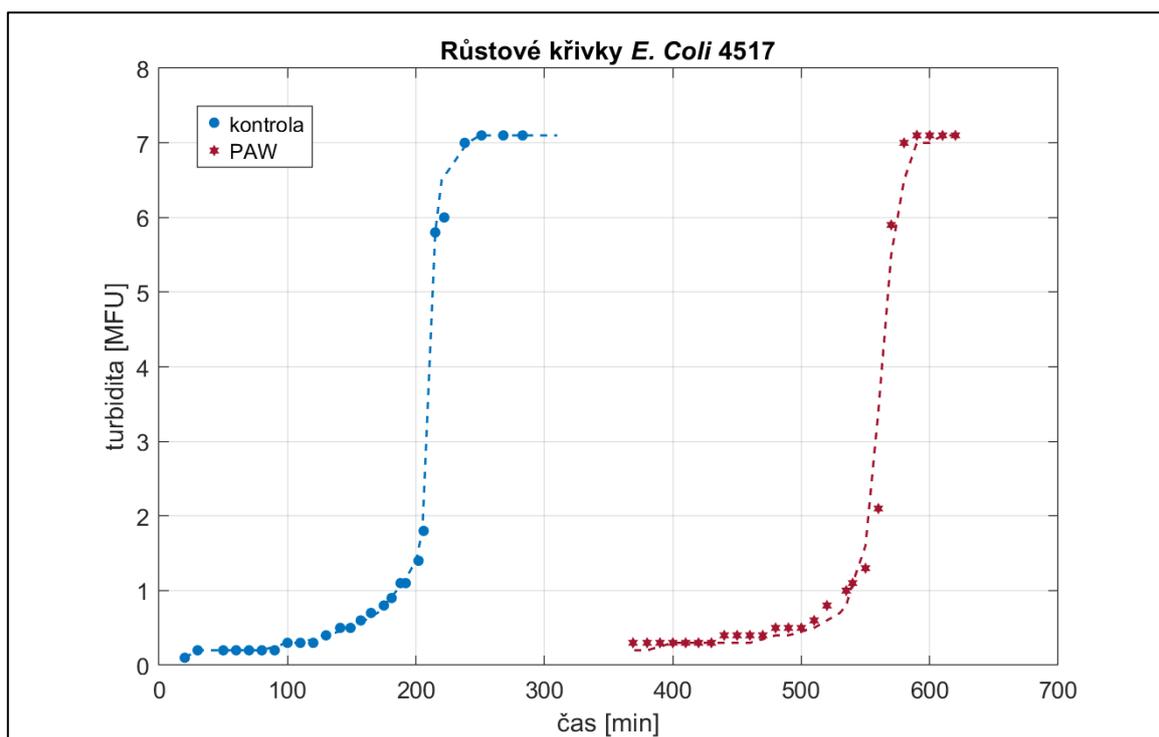
- Bc. **Lucie Dorazilová**, M1, Dr. Mgr. Jana Jirešová, *Získávají bakterie rezistenci na netermální plazma?*
- **Christopher William Heinz**, B3, Dr. Mgr. Jana Jirešová, *Vliv netermálního plazmatu na klíčivost semen Albízie růžové*
- **Lucie Kasýková**, B3, RNDr. Pavel Galář, Ph.D., *Příprava křemíkových nano-heterostruktur pomocí dvoustupňového plazmatického reaktoru*
- **Iveta Pršalová**, B3, doc. Ing. Vladimír Scholtz, PhD, *Zviditelňování latentních otisků prstů na nábojnicích pomocí nízkoteplotního plazmatu*
- **Adriana Šedová**, B3, Dr. Mgr. Jana Jirešová, *Porovnání různých způsobů ošetření potravin netermálním plazmatem a plazmatem aktivovanou vodou*
- **Hana Šikolová**, B3, Ing. Ladislav Fišer, Ph.D., *Vliv netermálního plazmatu na elektroniku*
- **Michal Vašíček**, B3, RNDr. Pavel Galář, Ph.D., *Příprava křemíkových kvantových teček o efektivní luminiscenci a dobré dispersibilitě*

Získávají bakterie rezistenci na netermální plazma?

Bc. Lucie Dorazilová (M1)

Školitel: Dr. Mgr. Jana Jirešová

Antibiotická rezistence bakterií představuje v současné době velkou výzvu pro zdravotnictví. A proto se neustále hledají nové spolehlivé metody dekontaminace, na které si bakterie nebudou vytvářet rezistenci. Jednou ze slibných metod je použití netermálního plazmatu. Mikrobicidní účinky nevykazuje pouze přímé ošetření netermálním plazmatem, ale také přidání plazmatem aktivované vody (PAW – plasma activated water) k suspenzi bakterií. PAW vzniká působením plazmatu na vodu nebo i jiné druhy roztoků (PAL – plasma activated liquid). Jejich účinky jsou pravděpodobně způsobeny lehce zvýšeným obsahem peroxidu vodíku a kyseliny dusičné. V této práci je používána PAW, která vzniká působením koronového výboje v konfiguraci hrot-hladina v režimu přechodové jiskry na destilovanou vodu. Cílem je ověření mikrobicidních účinků PAW i jejich jednotlivých složek a možnosti vytvoření rezistence na PAW u bakterie *Escherichia Coli* (*E. Coli*). Tato bakterie je velmi dobře prostudovaná a vytváří si rezistenci na různá antibiotika. V této práci jsem používala dva různé kmeny této bakterie.



Vliv netermálního plazmatu na klíčivost semen Albízie růžové

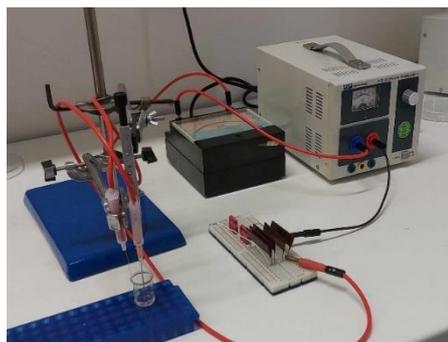
Christopher William Heinz (B3)

Školitel: Dr. Mgr. Jana Jirešová

Lidé se po staletí báli blesků a obdivovali polární záře a my dnes dokážeme jejich sílu a krásu využít k léčení a růstu života. Plazma se nachází na světě v různých podobách a způsobuje odlišné jevy. Netermální plazma, které při mé práci využívám, má potenciál poskytnout užitečné benefity. Jedna z výhod jím vytvořená je podpora klíčivosti rostlin a také jejich růstu. Existuje spousta zástupců flóry, kteří nedokážou úspěšně vyklíčit při běžných podmínkách a musejí být vystaveny extrémnímu prostředí (např. silným kyselinám). Jednou z takových rostlin je Albízie růžová, u které musejí být její semínka namočená v kyselině sírové, aby byla schopná v dostatečném počtu vyklíčit. Ale ošetřením netermálním plazmatem se můžeme této metodě naprosto vyhnout a také získat lepší výsledky. Tato práce se zaměřuje na působení netermálního plazmatu na klíčivost a růst Albízie růžové. Netermální plazma se generuje v sestavě hrot-hladina, kdy je vysoké napětí přivedeno na hrot jehly a hladina slouží jako opačně nabitá část systému. Na rozdíl od vysokoteplotního plazmatu jsou elektrony v plazmatu sice excitované na vysokou energii a udržují si značnou teplotu ale neutrální částice (atomy) mají pokojovou teplotu. Experimenty ukázaly, že klíčivost rostlin je kladně ovlivněna plazmatem. Příčinou by mohla být vysoká generace H_2O_2 a iontů NO_3^- , které naruší povrch semen a dále zvýšená smáčivost jejich povrchu.



Obr.1 – Koronový výboj na hrotu jehly



Obr.2 – Sestava na generaci plazmatu



Obr. 3 – Albízie růžová

Příprava křemíkových nano-heterostruktur pomocí dvoustupňového plazmatického reaktoru

Lucie Kasýková (B3)

Školitel: RNDr. Pavel Galář, Ph.D.

S rozvojem technologií se zvyšuje význam polovodičových nanočástic, přičemž křemíkové nanočástice (SiNPs) se ukazují jako jeden z klíčových materiálů. Potenciál vyplývá z jejich netoxicity, optických a elektrických vlastností a možnosti účinné povrchové úpravy. Díky těmto vlastnostem nacházejí uplatnění v řadě aplikací včetně anod lithiových baterií. Zásadním předpokladem pro dosažení dlouhodobé stability a vysoké kapacity baterií je odolnost SiNPs vůči opakovaným cyklům lithiace a delithiace, kde dochází k jejich značné objemové expanzi. Tomuto problému lze předcházet dosažením amorfnní struktury SiNPs, která je schopna objemovým změnám odolávat.

Cílem této práce je demonstrovat standardní metodu přípravy krystalických SiNPs prostřednictvím jednostupňového plazmatického reaktoru, poté ilustrovat možnosti optimalizace této syntézy pomocí dvoustupňového plazmatického reaktoru a případné geometrie jednotlivých částí. Tento přístup umožňuje překonat omezení jednostupňového reaktoru, zejména co se týče maximální velikosti SiNPs a vytváření heterostruktur typu core/shell, které splňují požadované podmínky amorfnní struktury pro aplikace v lithiových bateriích. Vyrobené SiNPs jsou analyzovány pomocí SEM a TEM mikroskopie, které poskytují detailní pohled na jejich morfologii a strukturu.

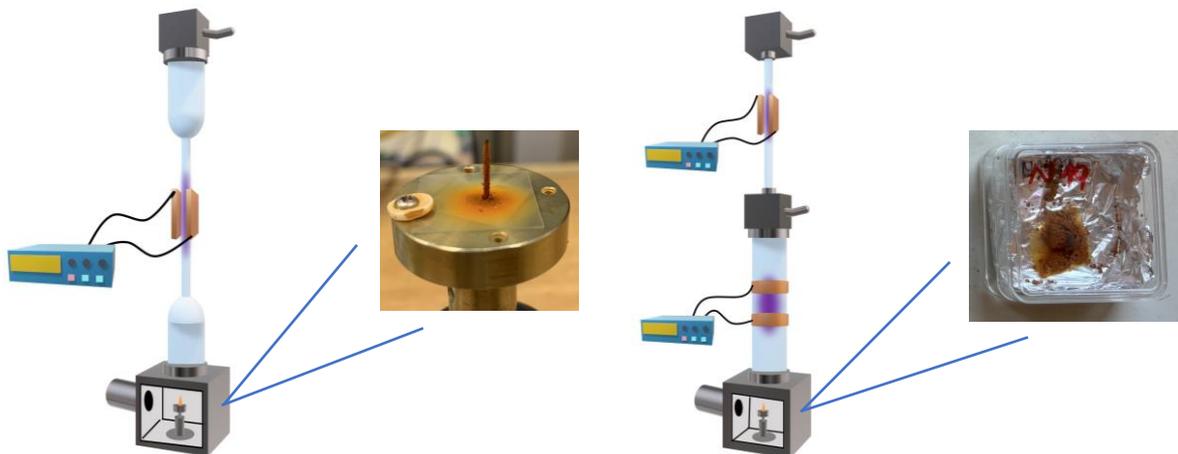


Schéma jednostupňové aparatury se vzorkem (vlevo) a schéma dvoustupňové aparatury se vzorkem (vpravo)

Zviditelňování latentních otisků prstů na nábojnicích pomocí nízkotermálního plazmatu

Iveta Pršalová (B3)

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

V této práci se soustředím na zviditelňování otisků prstů na nábojnicích. Zkoumáním otisků prstů se zabývá kriminalistická metoda zvaná daktyloskopie, díky které lze individuálně identifikovat jedince. Významně přispívá k objasnění širokého spektra trestné činnosti. Analyzuje papilární linie, vzory na povrchu kůže prstů, dlaní a chodidel, které jsou pro každého člověka zcela jedinečné a neměnné po celý život. V budoucnosti by nízkotermální plazma mohlo sloužit jako doplňková metoda pro stávající postupy. Výhoda tkví v jednoduchosti použití a absence daktyloskopického prášku. Pro zviditelnění otisku prstu používám nízkotermální plazma což je kvazineutrální plyn, který obsahuje radikály, ionty a excitované molekuly, oxidující povrch kovu okolo otisku prstu. Nízkotermální plazma bylo v této práci generováno několika zdroji, Teslovým transformátorem, aparaturou s elektronovou konfigurací hrot proti prstenci (Point to Ring) a jejím komerčním prototypem Plasmatico. Tyto zdroje porovnávám a určuji, který z nich je nejúčinnější. Nábojnice vystavuji plazmatu v různých časových intervalech a pozoruji, jak rychle se otisky na nábojnici objeví. Používám dva druhy nábojnic, nontoxické a klasické. Snažím se zjistit, zda-li rozdílné složení střelného prachu ovlivňuje kvalitu otisku prstu.



Otisk prstu na nábojnici

Porovnání různých způsobů ošetření potravin netermálním plazmatem a plazmatem aktivovanou vodou

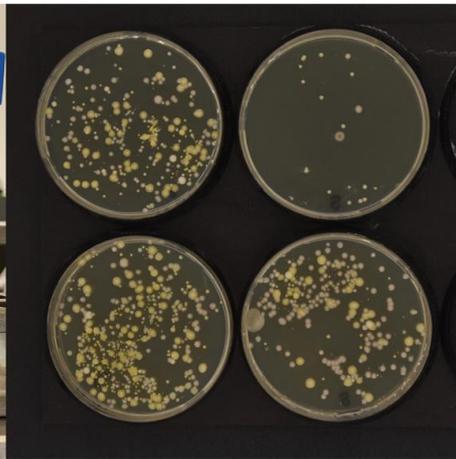
Adriana Šedová (B3)

Školitel: Dr. Mgr. Jana Jirešová

Listové saláty jako je polníček, rukola nebo ledový salát se dnes prodávají ve formě určené k okamžitému použití bez nutnosti oplachu, přesto obsahují značné množství mikroorganismů a vykazují nízkou trvanlivost. Neustále se vyvíjí nové technologie pro ošetření a konzervaci potravin, mezi které patří také metody ošetření netermálním plazmatem (NTP) a plazmatem aktivovanou vodou (PAW). Obě technologie představují alternativu k tradičním způsobům konzervace a mohou výrazně přispět k prodloužení trvanlivosti salátů při zachování jejich nutričních hodnot a zajištění mikrobiologické bezpečnosti salátů, které jsou náchylné k rychlé kontaminaci. Netermální plazma je ionizovaný plyn, generovaný pomocí elektrického výboje ve vzduchu. Je zdrojem velkého množství reaktivních částic, díky čemuž je schopné eliminovat široké spektrum nežádoucích mikroorganismů. V plazmatem aktivované vodě se působením plazmatu vytvářejí především peroxid vodíku a dusičnanové ionty, které mají antimikrobiální účinky a mohou být použity k dezinfekci salátů. Cílem této práce je porovnat vliv obou metod na mikrobiální kontaminaci a změny v organoleptických vlastnostech salátů, jako je vzhled, textura a chuť.



Obrázek 1: Vzorky různých druhů salátů před ošetřením



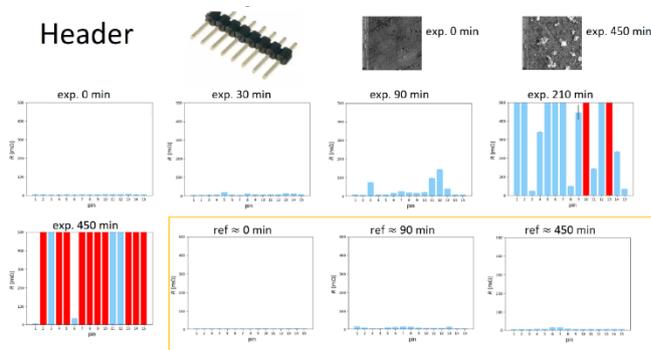
Obrázek 2: Kontaminace ledového salátu

Vliv netermální plazmy na elektroniku

Hana Šikolová (B3)

Školitel: Ing. Ladislav Fišer, Ph.D.

Netermální plazma (NTP) je hojně využíváno k povrchovým úpravám bez výrazného ohřevu materiálů a také k efektivní dezinfekci povrchů, což přináší řadu výhod, ale také určitá rizika. Při působení NTP dochází ke generování reaktivních částic, jako jsou ionty a radikály, které mohou způsobovat korozi a oxidaci povrchů, což například snižuje vodivost a může zhoršit mechanickou stabilitu spojů. Tyto procesy mění povrchové napětí materiálů, ale mohou i zvyšovat přechodový odpor v kontaktech. Dlouhodobé vystavení NTP navíc může vést k mikroskopickým poškozením v materiálových vrstvách konektorů, což snižuje jejich životnost a spolehlivost v citlivých elektronických obvodech. Z těchto důvodů byly vybrané vzorky exponovány reaktivními částicemi produkovanými netermálním plazmatem bipolárního korónového výboje. Následně bylo provedeno testování vlivů NTP na vybrané parametry těchto vzorků.



Obrázek 3: předběžný experiment (červené sloupce označují poruchu – poškozený kontakt)



Obrázek 2: přehled testovaných součástek

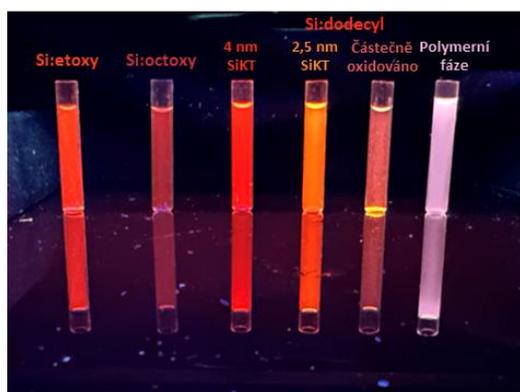
Příprava křemíkových kvantových teček o efektivní luminiscenci a dobré dispersibilitě

Michal Vašíček (B3)

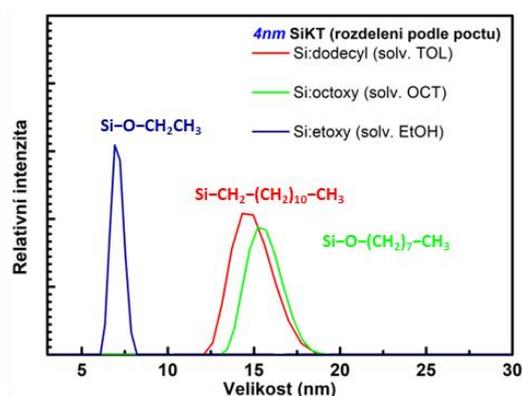
Školitel: RNDr. Pavel Galář, Ph.D.

Křemíkové kvantové tečky (SiKT) vynikají unikátními optickými vlastnostmi, jednoduchou přípravou a nízkou toxicitou, což je činí ideálními pro aplikace, jako jsou senzory, fotovoltaika nebo cílené doručování léčiv. Cílem našeho výzkumu je zlepšit efektivitu luminiscence a dispersibilitu SiKT pomocí pokročilých metod povrchových modifikací (PM).

Námi využívanými metodami PM jsme schopni vytvořit stabilní monodisperse SiKT v širokém rozsahu polarit prostředí. Pomocí netermálního plazmatu kovalentně navazujeme etoxy a octoxy skupiny odštěpením H z OH skupiny, odpovídající polárnímu a středně polárnímu prostředí. Takto terminované SiKT dosahují kvantových výtěžků (QY) až 18 %. Dispersibilitu SiKT v nepolárním prostředí zajišťujeme navázáním dodecylových skupin na povrch SiKT metodou termální hydrosilylace, kdy QY dosahuje až 19 %. U této metody se aktivují vazby Si-H a násobné vazby uhlíkovíku při teplotách nad 150 °C. Mnoho organických látek má teplotu varu nižší, proto je využito radikálové iniciace pomocí látek, jako je 2-Azobis-(2-methylpropionitril) (AIBN). Takto rozšiřujeme spektrum látek vhodných pro PM. Využitím těchto metod významně zvyšujeme QY a zlepšujeme dispersibilitu v různých prostředích. To vede k podpoře širší využitelnosti SiKT v moderních aplikacích.



Obr. 1: Fotografie 2,5 – 4 nm SiKT s různými povrchovými modifikacemi pod UV (366 nm) osvětlením.



Obr. 2: Srovnání disperzí SiKT pomocí DLS v různě polárních prostředích s odpovídající povrchovou modifikací.

Fyzika a měřicí technika III

MÍSTO: B220

KOMISE

Předseda komise: doc. Ing. Jaroslav Hofmann, CSc.

Členové komise:

- doc. Ing. Vladimír Myslík, CSc.
- Ing. Jitka Kopecká, Ph.D.
- Ing. Martin Straka, Ph.D. (ÚJV Řež)
- Ing. Tereza Svatoňová (ExPS, s.r.o.)

SEZNAM SOUTĚŽÍCÍCH

- **Amálie Burešová**, B3, Ing. Bc. Michal Novotný, Ph.D., *Nanodrátky na povrchu tenkých vrstev kovů*
- **Ondřej Grundfest**, B3, RNDr. Pavel Galář, Ph.D., *Optimalizace perovskitových vrstev pro fotovoltaické využití*
- Bc. **Patrik Kula**, M1, Ing. Přemysl Fitl, Ph.D., *Simulace SAW senzorů pro detekci plynu*
- Bc. **Miriám Magočiová**, M2, prof. Dr. Ing. Martin Vrňata, *Zlepšenie parametrov detekcie na chemirezistoroch pomocou algoritmov strojového učenia*
- **Jan Mišek**, B3, Ing. Ladislav Fišer, Ph.D., *Optimalizace aparatury pro senzory s nanostrukturovanou vrstvou*
- Bc. **Denis Najman**, M1, Ing. Bc. Michal Novotný, Ph.D., *Materiál Cu₃N a problematika nitridových senzorů*
- Bc. **Tomáš Albert Štefanov**, M2, prof. Dr. Ing. Martin Vrňata, *Návrh a realizace měřících systémů pro senzory na bázi iontových kapalin*
- Bc. **Radim Weissner**, M2, RNDr. Pavel Galář, Ph.D., *Hybridní bateriové a superkondenzátorové systémy založené na vysoce koncentrovaných vodných elektrolytech*

Růst nanodrátků na tenkovrstvých černých kovech

Amálie Burešová (B3)

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

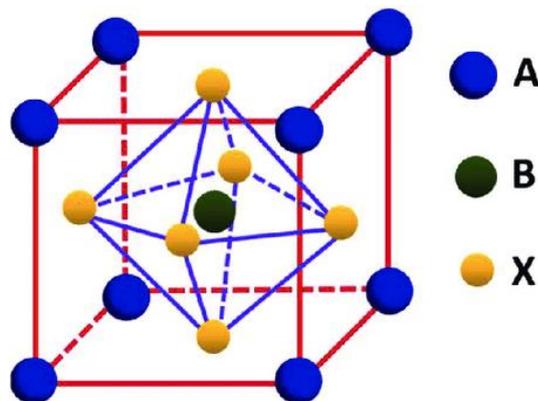
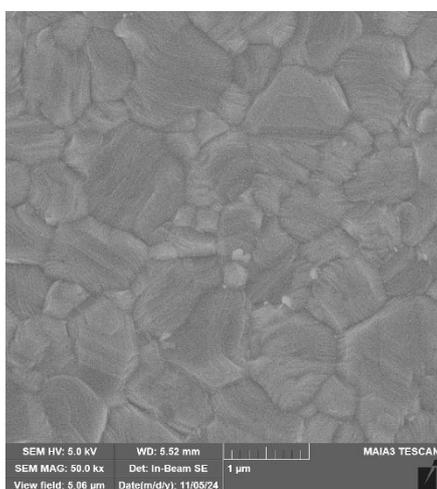
Tato práce je věnována porovnání růstu nanodrátků na vzorcích vyrobených zde, a na vzorcích vyrobených v partnerské laboratoři v Japonsku. Dále se pak věnujeme charakterizaci nanodrátků na černé hliníkové vrstvě. Pozorována byla intenzita růstu drátků v závislosti na teplotě vzorku. Současně byl testován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

Optimalizace perovskitových vrstev pro fotovoltaické využití

Ondřej Grundfest (B3)

Školitel: RNDr. Pavel Galář, Ph.D.

Perovskitové FAPbI_3 vrstvy se vyznačují vynikajícími elektrickými, magnetickými a optickými vlastnostmi z pohledu fotovoltaických aplikací. Solární články připravené z tohoto materiálu dosahují účinností vyšších než 26 %, což je hodnota srovnatelná s krystalickým křemíkem. K zásadním problémům přípravy FAPbI_3 vrstev mimo jiné patří koexistence dvou polymorfních fází, alfa a delta, kdy pouze alfa fáze má požadované vlastnosti. Tato práce je zaměřena na přípravu perovskitových FAPbI_3 vrstev a jejich optimalizaci na základě přidávání rozdílného množství MACl . Toto aditivum podporuje růst požadované alfa fáze, čímž se snižuje počet nežádoucích rekombinačních center ve vrstvě a účinnost vrstvy se tím zvýší. Pro analýzu vrstev k nalezení ideálního množství přidaného MACl byla použita kombinace několika metod: Skenovací elektronová mikroskopie a mapování fotoluminiscence ve vzorku byly použity pro zjištění homogenity vrstvy, zatímco kvantový výtěžek fotoluminiscence byl využit pro určení celkové účinnosti vrstvy.



SEM snímek FAPbI_3 vrstvy (vlevo), Schéma perovskitové struktury¹ (vpravo)

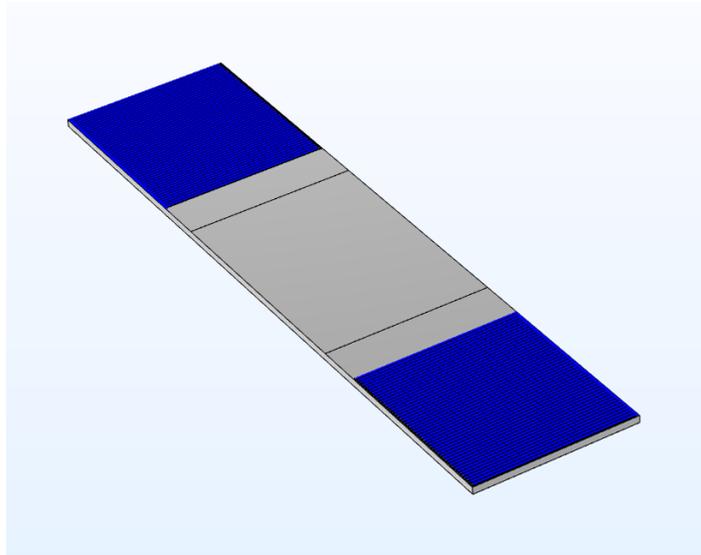
(1) Aslam, M.; Mahmood, T.; Naeem, A. Organic Inorganic Perovskites: A Low-Cost-Efficient Photovoltaic Material. **2021**. DOI: 10.5772/intechopen.94104.

Simulace SAW senzorů pro detekci plynu

Bc. Patrik Kula (M1)

Školitel: Ing. Přemysl Fitl, Ph.D.

Tato práce se zaměřuje na simulaci senzorů využívajících povrchové akustické vlny (Surface Acoustic Wave – SAW) pro detekci plynných a kapalných látek. SAW senzory generují akustické vlny na povrchu piezoelektrického krystalu, které následně putují přes absorpční vrstvu. Při absorpci molekul měřené látky dochází ke změnám mechanických vlastností substrátu, což ovlivňuje frekvenci, rychlost šíření a tlumení akustických vln. Tento jev umožňuje moderní a efektivní metodu pro detekci a monitorování plynů. Cílem studie bylo simulovat odezvu SAW senzorů při použití různých typů absorpčních substrátů, piezoelektrických krystalů a za různých koncentrací analyzovaných látek. Simulace probíhala pomocí numerických metod, zejména metodou konečných prvků, což přineslo hlubší porozumění procesu detekce a optimalizaci citlivosti senzorů. Výsledky této studie poslouží jako základ pro experimentální testování SAW senzorů připravených lithografickým procesem s cílem zvýšit přesnost a efektivitu jejich aplikací v praxi.



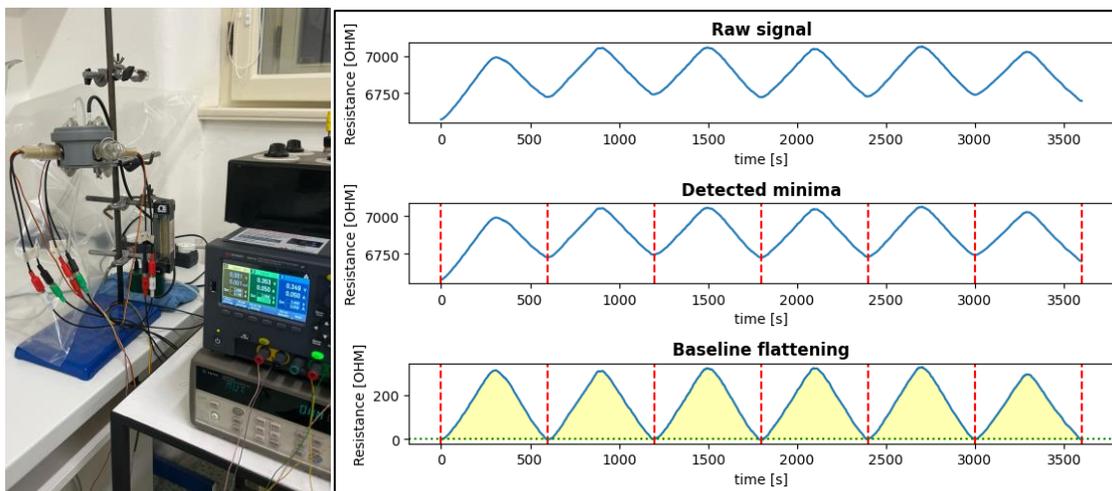
Zlepšenie parametrov detekcie na chemirezistoroch pomocou algoritmov strojového učenia

Bc. Miriam Magočiová (M2)

Školiteľ: prof. Dr. Ing. Martin Vrňata

Chemirezistory určené na detekciu plynov sú cenovo dostupné senzory s jednoduchou obslužnou elektronikou prevádzajúce chemickú vstupnú informáciu na elektrický výstupný signál. Ich hlavným neduhom je však nízka rozlišovacia schopnosť medzi jednotlivými analytmi. Častým riešením tohto problému je vytvorenie veľkého sensorového poľa, čím sa ale razantne zvyšujú náklady na obstaranie a prevádzku. Alternatívny prístup je zachovanie malého počtu chemirezistorov a spracovanie výstupných dát pomocou algoritmov strojového učenia.

Cieľom tejto práce je zlepšiť rozlišovaciu schopnosť jednoduchého sensorového poľa medzi štyrmi zvolenými analytmi – metanol, etanol, propanol a acetón. Na periodicky získaných signáloch prebehlo najskôr predspracovanie dát a extrakcia relevantných príznakov zo sensorovej odpovede. Následne boli testované rôzne klasifikačné algoritmy strojového učenia, pričom najlepšie výsledky boli dosiahnuté kombináciou vhodného výberu príznakov a optimalizáciou hyperparametrov modelu, čo viedlo k lepšiemu rozlíšeniu jednotlivých analytov priamo zo signálov chemirezistorov. Výsledky tejto práce naznačujú, že algoritmy strojového učenia v kombinácii s nižším počtom chemirezistorov v sensorovom poli predstavujú perspektívnu a cenovo dostupnú alternatívu ku klasickým analyzátorom pre laboratórnu aj priemyselnú prax.



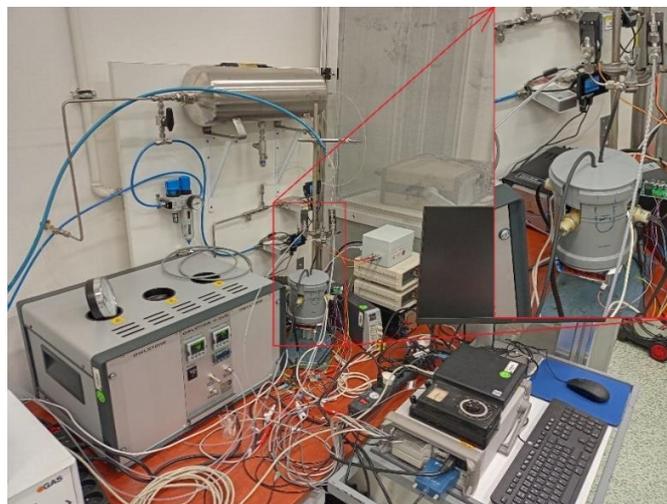
Obr.1a) Aparatúra využitá pre meranie, 1b) ilustrácia spracovania signálu

Optimalizace aparatury pro senzory s nanostrukturovanou aktivní vrstvou

Jan Mišek (B3)

Školitel: Ing. Ladislav Fišer, Ph.D.

V rámci projektu OP JAK SenDiSo je potřeba měřit vlastnosti senzorů – chemirezistorů s nanostrukturovanou aktivní vrstvou. Princip senzorů je takový, že aktivní vrstva mění svůj elektrický odpor podle koncentrace analytu přítomného v jejím okolí. Pro správnou činnost je nutné aktivní vrstvu udržovat na pracovní teplotě, proto jsou senzory vybaveny i odporovým topným elementem a případně senzorem teploty. Kolísání teploty a případně další vnější vlivy mají také vliv na odpor aktivní vrstvy, a proto je snaha tyto vlivy eliminovat. Měřicí aparatura je založená na měřicí ústředně *Agilent 34970A*, která snímá odpor aktivní vrstvy a zaznamenává teplotu senzoru. Optimalizovaná měřicí komora je opatřena plastovým neprůhledným krytem, což eliminuje vliv světla na senzory. Pro lepší stabilitu měřeného odporu je prostor s komorou temperován na 45 °C. Plynové hospodářství je realizováno jako podtlakové, alternativně jako přetlakové. Při podtlakovém uspořádání je vzorek z tedlarového vaku nasáván do měřicí komory membránovým čerpadlem. Při přetlakovém provedení se vzorek vede do měřicí komory ze systému Owlstone, kde je vytvářen konstantním průtokem syntetického vzduchu kolem permeační trubice. Pro snadné přepínání vzorek/reference je aparatura doplněna automatickými ventily.



Optimalizovaná aparatura v přetlakovém provedení; foto a úprava Mišek J.

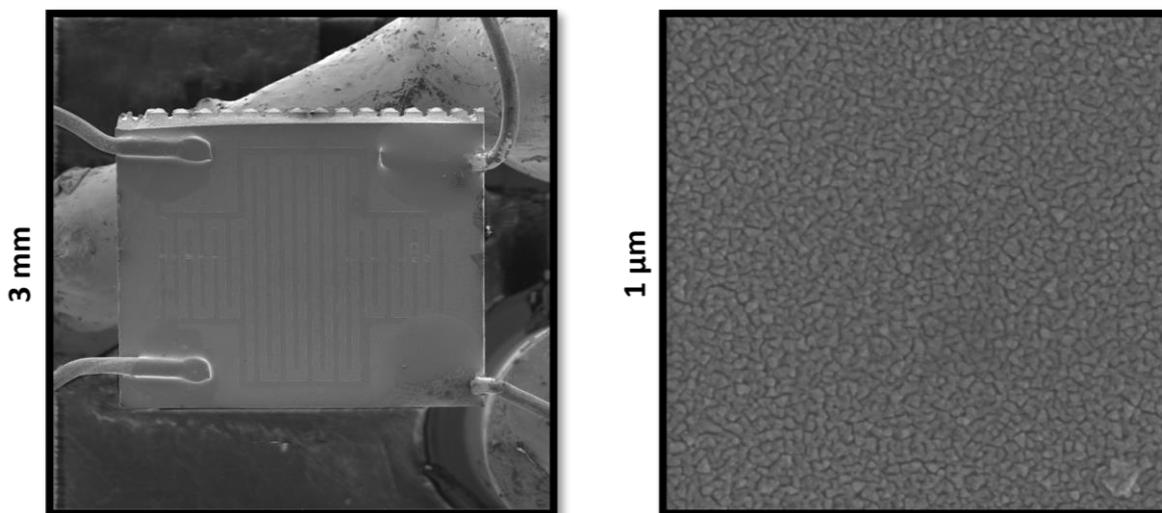
Materiál Cu_3N a problematika nitridových senzorů

Bc. Denis Najman (M1)

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

Zemřelé tělo kanárka v uhelném dole, signalizující vzrůst koncentrace životu nebezpečných plynů (např. oxidu uhelnatého, methanu) či poutavost much a mravenců ke sladší moči lidí trpících cukrovkou. To jsou příklady, kdy lidé v historii zneužívali různé formy živých organismů ke své potřebě monitorovat prostředí a zdraví. Až s příchodem průmyslové revoluce ve 20. století byli vyvíjeny první elektronické chemické plynové senzory. Hojnější využití těchto senzorů na bázi oxidů (kovů) je patrné při pohledu na první navrhnuté chemirezistor (Seyama – ZnO), první patentovaný chemirezistor (Taguchi – SnO_2) či vlastní kategorii v klasifikaci chemických plynových senzorů dle IUPAC se zkratkou „MOS“ (z anglického „*Metal Oxide Semiconductors*“). Protože jsou tyto senzory dobře prozkoumány, zaměřuje se tato práce na chemirezistory z nitridů, které jsou výjimečné, méně prozkoumané a vykazují obdobné chování.

Cílem této práce je získat vybrané statické a dynamické charakteristiky chemických plynových senzorů (chemirezistorů) založených na materiálu Cu_3N a TiN_xO_y . V práci je zahrnuta příprava tenkých vrstev vybraných materiálů technikami fyzikální depozice z plynné fáze a jejich charakterizace pomocí rentgenového difraktometru či skenovacího elektronového mikroskopu (SEM).



Obr. 1: a) SEM snímek celého chemirezistoru.

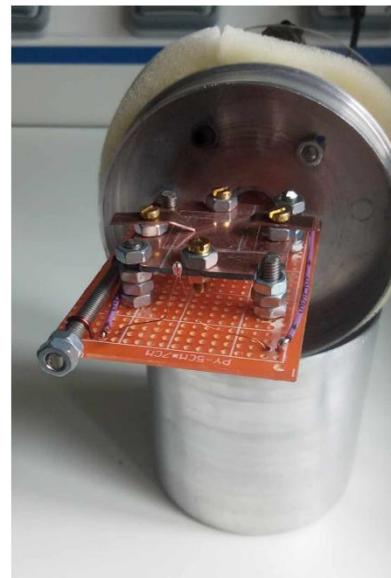
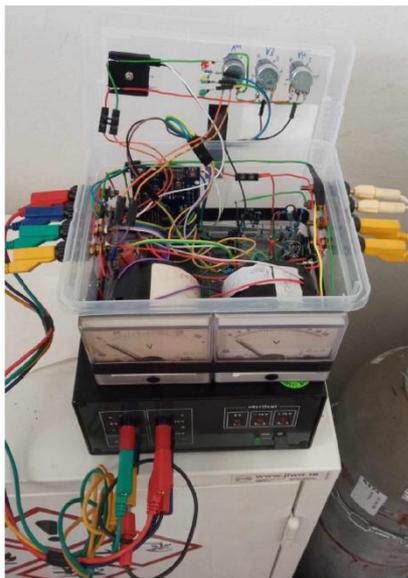
b) SEM snímek materiálu Cu_3N .

Návrh a realizace měřicích systémů pro senzory na bázi iontových kapalin

Bc. Tomáš Albert Štefanov (M2)

Školitel: prof. Dr. Ing. Martin Vršata

Organické chemirezistory (dále OCH) představují cenově dostupnou alternativu k mnoha polovodičovým sensorům plynů, které potřebují pracovat při vyšších teplotách, někdy až 1100 °C, což je činí jednoduššími na provoz i realizaci. Tyto senzory jsou však stále málo prozkoumané, a tedy atraktivní jak z pohledu výzkumu, tak i potenciálního průmyslového využití. Náplní práce byl návrh a realizace měřicích systémů a obvodů pro OCH na bázi kompozitu polymer – iontová kapalina, které jsou schopny získávat relevantní data o impedančním chování sensorů. Podstata OCH však přinesla i technické výzvy, jako nutnost práce se střídavým proudem, použití nekatalytických elektrod odolných vůči korozi a řešení teplotní závislosti a parazitních proudů. Práce ukázala vynikající sensorické vlastnosti pro detekci vody a alifatických monoalkoholů v širokém intervalu koncentrací od 0 do 3000 ppm. Výsledky byly použity k návrhu a ověření fyzikálně-chemických modelů statických i dynamických vlastností OCH. Finálním výstupem mé práce byla výroba OCH s vyšší citlivostí a spolehlivostí a také návrh jednoduchého hardwaru, který dokázal převést odezvu senzoru na zpracovatelný signál, což je nezbytné pro jejich potenciální aplikaci v technologické praxi.



Hybridní bateriové a superkondenzátorové systémy založené na vysoce koncentrovaných vodných elektrolytech

Bc. Radim Weisser (M2)

Školitel: RNDr. Pavel Galář, Ph.D.

Současné nároky na uchovávání elektrické energie vyžadují efektivní metody, k nimž se běžně používají baterie. Ty však mají své nevýhody, které mohou v některých aplikacích účinně překonat superkondenzátory, ukládající energii pomocí elektrostatického pole nebo rychlých redoxních reakcí na povrchu elektrody. Tato práce se zaměřuje na hybridní superkondenzátorové systémy, využívající jako aktivní materiály elektrod aktivní uhlík a organickou látku PTCDI. Elektrolytem je vysoce koncentrovaný vodný roztok chloristanové soli (tzv. „water in salt“), konkrétně $\text{Ca}(\text{ClO}_4)_2$ o molalitě 7 mol/kg, který zajišťuje široké potenciálové okno až 2,4 V. Elektroda s aktivním uhlíkem funguje jako kondenzátor s elektrickou dvojrůstkou (EDLC), zatímco PTCDI elektroda pracuje na principu pseudokondenzátoru s rychlými redoxními reakcemi na svém povrchu. Cílem je vylepšit tento systém optimalizací hmotnostního poměru elektrod, nastavením optimálního rozsahu potenciálů a zvýšit celkovou kapacitu. K dosažení těchto cílů jsou použity testovací metody jako cyklická voltametrie a galvanostatické nabíjení a vybíjení. Výsledný systém by měl být schopen uchovávat více energie než běžné kondenzátory a zároveň ji dodat rychleji než tradiční baterie, což z něj dělá atraktivní volbu pro moderní energetické aplikace.

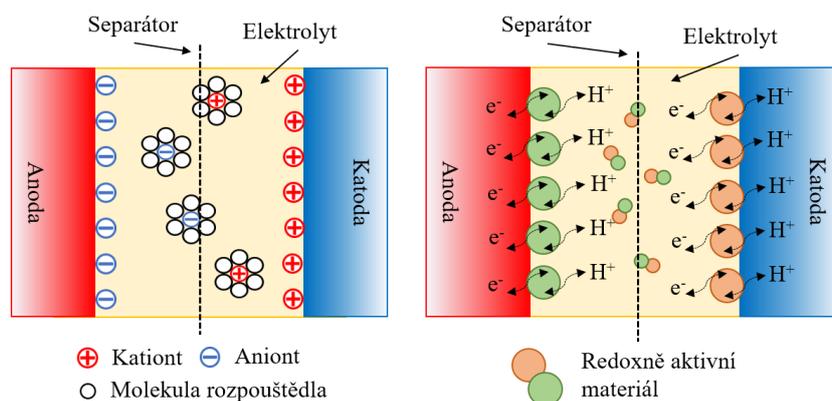


Schéma EDLC (vlevo) a pseudokondenzátoru (vpravo).

Ústav matematiky, informatiky a kybernetiky (446)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Iva Nachtigalová, Ph.D.

SEZNAM SEKČÍ

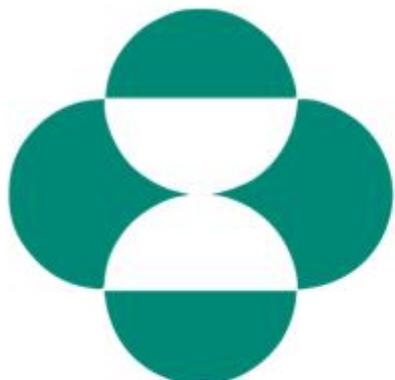
19. [Aplikovaná matematika, informatika a kybernetika I](#)
20. [Aplikovaná matematika, informatika a kybernetika II](#)
21. [Aplikovaná matematika, informatika a kybernetika III](#)

SEZNAM SOUTĚŽÍCÍCH

- Bc. **Vladislav Bulgakov**, M2, Ing. Martin Schätz, Ph.D., *Prompt Engineering for Signal Analysis Code Generation*
- Bc. **Jakub Ciler**, M2, Ing. Jan Kohout, Ph.D., *Analýza biomedicínských signálů obličeje u pacientů s parézou pomocí metod umělé inteligence*
- Bc. **Eva Didenko**, M2, Ing. Martin Schätz, Ph.D., *Quality assessment of scientific images*
- **Ivana Havlenová**, B3, Ing. Martin Isoz, Ph.D., *Vliv hyperparametrů genetického algoritmu na průběh topologické optimalizace mikrofluidní cely*
- Bc. **Alexandra Hlaváčová**, M1, doc. Fatima Hassouna, Ph.D., *Příprava a charakterizace elektricky vodivých celulózových hydrogelů podobných kůži*
- Bc. **Šimon Hudínek**, M1, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D., *Vývoj modelu filtru pevných částic s katalyticky aktivní vrstvou pro snížení emisí NOx*
- **Jiří Ingr**, B3, Ing. Jan Vrba, Ph.D., *Detekce hlasivek v laryngoskopických obrazech pomocí neuronových sítí*
- Bc. **Jana Jarolímková**, M1, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D., *Paralelizace výpočtu elektrostatického pole generovaného nábojem na stěnách porézního filtru pevných částic*
- Bc. **David Kavka**, M2, Ing. Lukáš Mrazík, *Modelování systémů se závislými parametry*
- Bc. **Štěpán Koblé**, M2, Ing. Jan Vrba, Ph.D., *Predikce studijních výsledků studentů VŠCHT Praha*
- Bc. **Lucie Kolumpková**, M2, Ing. Jan Vrba, Ph.D., *Detekce parézy hlasivky z laryngoskopických videí*
- Bc. **Magdaléna Menčíková**, M1, doc. Fatima Hassouna, Ph.D., *Vývoj amorfních pevných disperzí pomocí in situ tepelného zesíťování: fyzikální stabilita a disoluční profil*
- Bc. **Eliška Paulíková**, M2, doc. Ing. Jitka Čejková, Ph.D., *Automatizované řízení a vizuální navigace robota*

- **Adam Benjamin Plšek**, B2, Ing. Anna Kovárnová, *Can neural networks help us with model order reduction of particle-laden flows?*
- Bc. **Vítek Průša**, M2, Ing. Jan Vrba, Ph.D., *Řízení laserového zaměření pomocí zpětnovazebního učení*
- Bc. **Jakub Seiner**, M2, Ing. Jan Vrba, Ph.D., *Detekce patologie hlasu pomocí Kolmogorov-Arnold sítě*
- Bc. **Anna Šebestíková**, M2, Ing. Lukáš Hájek, Ph.D., *Vývoj softwaru pro vyhodnocování výkonových a hemodynamických parametrů svalů předloktí*
- Bc. **David Tichý**, M2, Ing. Mgr. Darina Bártová, Ph.D., *Měření a řízení vsádkové rektifikace pyrolýzního oleje*
- Bc. **Tereza Tumová**, M1, Prof. Ing. Aleš Procházka, CSc., *Detekce poruch chůze pomocí akcelerometrických senzorů*
- **Jakub Vencel**, B2, Ing. Lukáš Mrazík, *Digitalizace dat pomocí metody OCR do databázového systému s uživatelským rozhraním*
- Bc. **Jan Vyčítal**, M2, prof. Ing. Jan Mareš, Ph.D., *Tvorba Arduino shieldů pro výuku teorie řízení dynamických systémů*

SPONZOŘI ÚSTAVU MATEMATIKY, INFORMATIKY A
KYBERNETIKY



MSD

SIDAT
AUTOMATION-INFORMATICS

EAT•N
Powering Business Worldwide


ORLEN Unipetrol

 **HUMUSOFT®**

 **MathWorks®**

EXPS
Engineering Technology

 **Pilsner Urquell.**

vesmír

Aplikovaná matematika, informatika a kybernetika I

MÍSTO: A335

KOMISE

Předseda komise: Ing. Jakub Steinbach

Členové komise:

- Ing. Tomáš Jirsa
- Ing. Lukáš Mrazík
- Ing. Jakub Tomeš

SEZNAM SOUTĚŽÍCÍCH

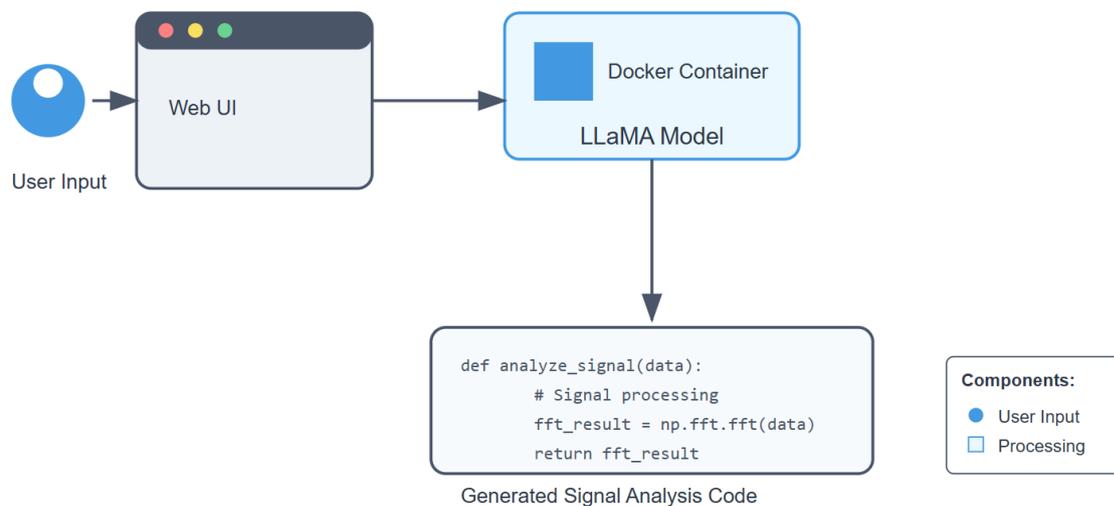
- Bc. **Vladislav Bulgakov**, M2, Ing. Martin Schätz, Ph.D., *Prompt Engineering for Signal Analysis Code Generation*
- Bc. **Jakub Ciler**, M2, Ing. Jan Kohout, Ph.D., *Analýza biomedicínských signálů obličeje u pacientů s parézou pomocí metod umělé inteligence*
- Bc. **Eva Didenko**, M2, Ing. Martin Schätz, Ph.D., *Quality assessment of scientific images*
- **Jiří Ingr**, B3, Ing. Jan Vrba, Ph.D., *Detekce hlasivek v laryngoskopických obrazech pomocí neuronových sítí*
- Bc. **Štěpán Koblre**, M2, Ing. Jan Vrba, Ph.D., *Predikce studijních výsledků studentů VŠCHT Praha*
- Bc. **Jakub Seiner**, M2, Ing. Jan Vrba, Ph.D., *Detekce patologie hlasu pomocí Kolmogorov-Arnold sítě*
- Bc. **Anna Šebestíková**, M2, Ing. Lukáš Hájek, Ph.D., *Vývoj softwaru pro vyhodnocování výkonových a hemodynamických parametrů svalů předloktí*

Prompt Engineering for Signal Analysis Code Generation

Bc. Vladislav Bulgakov (M2)

Ing. Martin Schätz, Ph.D.

The adoption of AI has transformed productivity significantly. But organizations in regulated sectors face a challenge: leveraging AI's capabilities while ensuring data privacy and regulatory compliance. This case study looks at how *Large Language Models* (LLMs) like *LLaMA* can offer a secure, locally run alternative to cloud-based AI. They can be used to customize models for specific domains, technical applications like code generation. The implementation leverages *Docker* containerization for reproducible environments and model deployment, while a custom web-based interface (*Web UI*) facilitates seamless interaction with the LLMs. The research evaluates various locally run models' effectiveness in generating signal analysis code, assessing task interpretation accuracy, code quality and code optimization. The research shows that locally run LLMs can be used for specialized technical tasks, offering a secure AI solution for organizations who want to control their data and infrastructure. This research adds to knowledge on secure AI deployment, which is particularly relevant for data-privacy-sensitive industries.



Analýza biomedicínských signálů obličeje u pacientů s parézou pomocí metod umělé inteligence

Bc. Jakub Ciler (M2)

Školitel: Ing. Jan Kohout, Ph. D.

V dnešní digitální éře jsou mnohá medicínská vyšetření stále vyhodnocována manuálně a podléhají lidskému faktoru. Příkladem je situace, kdy při operaci rovnovážného ústrojí dojde k přerušení lícního nervu, což vede k ochrnutí obličeje. Posouzení, zda se stav pacienta po operaci zlepšuje, bývá tradičně založeno na subjektivním hodnocení cvičení před lékařem. Naším cílem je proto vyvinout aplikaci, která by dokázala tato cvičení objektivně vyhodnocovat. Data jsou předzpracovávána pomocí metod jako je PCA (Principal Component Analysis) nebo data-whitening, což pomáhá zredukovat šum a zvýraznit relevantní rysy pro další analýzu. Na takto získané příznaky jsou poté aplikovány metody umělé inteligence pro klasifikaci. Tento přístup umožňuje objektivní hodnocení pacientova pokroku, čímž snižuje riziko subjektivního zkreslení a zvyšuje spolehlivost diagnostiky.

Quality assessment of scientific images

Bc. Eva Didenko (M2)

Ing. Martin Schätz, Ph.D.

Scientific images need to be assessed for quality to ensure reliable data processing and analysis, but most current workflows use pre-defined standards or a reference image for comparison, which is usually absent or not comparable in different scientific contexts. In this case study we would like to present a new workflow to assess general levels of image quality based on independent global features as generated directly from the images in specialized open source software (FIJI). A custom benchmarking dataset was developed to support this approach, including both quantitatively scored images and synthetic unqualified images with added noise, Gaussian blur and other distortions that can happen in image acquisition phase. The proposed workflow, which is open to further exploration and analysis, involves feature extraction and the application of advanced analytical techniques within a Python environment. These techniques include correlation analysis, dimensionality reduction via UMAP, and cluster analysis, which are used to categorize images based on quality attributes. In theory, the data independence of this workflow will allow its wide application in various fields. Furthermore, the use of powerful statistical and machine learning methods can improve its accuracy and generality in dynamic systems. We suggest that this method holds great promise as an adaptable and scalable solution for scientific image quality assessment. It provides a data-driven alternative to traditional benchmark-based workflows and pre-established standards, which are often impractical and context-dependent.

Detekce hlasivek v laryngoskopických obrazech pomocí neuronových sítí

Jiří Ingr (B3)

Školitel: Ing. Jan Vrba, Ph.D.

Při zdravotních obtížích týkajících se hlasového ústrojí je postižená osoba vyšetřována pomocí metody přímé laryngoskopie. Tato práce se zaměřuje na vyhodnocení výsledků laryngoskopického vyšetření pomocí metod umělé inteligence, konkrétně analýzou obrazu využívající model YOLOv11. Účelem tohoto modelu je detekce oblasti hlasivek v laryngoskopických obrazech. Jako vstupní obrazová data pro trénink a testování modelu byly použity video záznamy hrtanu z vyšetření pacientů, v jejichž snímcích byly vyznačeny obě hlasivky a glotická štěrbina. YOLOv11 pro detekci objektů umožňuje rychlou a efektivní identifikaci objektů v reálném čase. Zdokonalování detekčního modelu je zajištěno postupným optimalizováním tréninkového procesu a rozšiřováním vstupního datasetu. Cílem práce je vytvoření modelů pro detekci hlasivek, jejich porovnání z hlediska přesnosti a rychlosti inference. Vytvoření modelu s vysokou mírou spolehlivosti umožní vývoj metod pro objektivní analýzu hlasového ústrojí v reálném čase a přispěje k efektivnějšímu a rychlejšímu vyhodnocení laryngoskopických vyšetření.

Predikce studijních výsledků studentů VŠCHT Praha

Bc. Štěpán Kobrle (M2)

Školitel: Ing. Jan Vrba, Ph.D.

Tato práce analyzuje faktory ovlivňující akademický úspěch studentů pomocí metod strojového učení. Cílem je identifikovat klíčové faktory, které ovlivňují úspěšnost u závěrečných zkoušek z matematiky a obecné a anorganické chemie. Analýza zahrnuje vliv dílčích testů, fakulty, pohlaví, vzdělání rodičů a průměru známek ze střední školy. Klíčovou částí práce byla i exploratorní analýza dat, která odhalila významné korelační vztahy mezi faktory. Zejména se ukázalo, že testy z matematiky lépe predikují úspěch u závěrečné zkoušky než testy z chemie. Dále bylo zkoumáno, zda zájem studentů o strukturu studijního programu ovlivňuje jejich studijní výsledky. Výsledky naznačují, že informovaní studenti mají větší šanci na úspěch. Pro klasifikaci byly použity modely jako náhodný les, podpůrné vektory, logistická regrese, naivní Bayesův klasifikátor, lineární diskriminační analýza, kvadratická diskriminační analýza, metoda K-nearest neighbors, XGBoost, LightGBM, Gradient Boosting a dopředná neuronová síť. Výkonnost modelů byla porovnávána pomocí Matthewsova korelačního koeficientu. Modely pro matematiku obecně dosáhly vyšší přesnosti než modely pro chemii, přičemž nejlepší výsledky byly dosaženy při kombinaci testů a docházky. Získané poznatky mohou přispět k optimalizaci studijních programů a zlepšení testování.

Detekce patologie hlasu pomocí Kolmogorov-Arnold sítě

Bc. Jakub Seiner (M2)

Školitel: Ing. Jan Vrba, Ph.D.

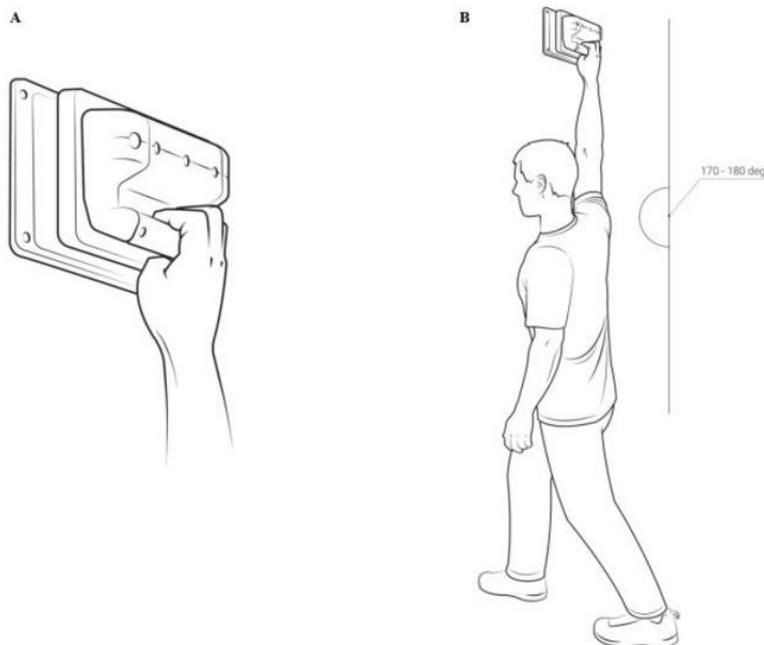
V dospělé populaci do věku 26 let trpí až 6 % lidí poruchou hlasu. Toto procento nadále roste s věkem a u některých profesí (např. učitelé, zpěváci) může být až trojnásobné. Tradičně klinickou diagnostiku provádějí vyškolení experti převážně za užití svého sluchu, což může být zatíženo subjektivní chybou. Tento příspěvek se zaměřuje na inovativní využití neuronové sítě typu Kolmogorov-Arnold, která umožňuje zachytit komplexní nelineární závislosti. Tato síť je trénována na široké škále akustických příznaků, včetně mel-frekvenčních cepstrálních koeficientů (MFCC). Cílem je vyvinout nástroj pro spolehlivé rozlišení mezi zdravými a nemocnými pacienty.

Vývoj softwaru pro vyhodnocování výkonových a hemodynamických parametrů svalů předloktí

Bc. Anna Šebestíková (M2)

Školitel: Ing. Lukáš Hájek, Ph.D.

Lezení je sportovní disciplínou, při které dochází k přerušovaným kontrakcím svalů předloktí. Hraje zde důležitou roli správný krevní oběh a vhodné vyvinutí síly pro odpovídající úkony. Nejčastěji se pro testování lezců při vědeckých výzkumech a optimalizaci lezeckého výkonu využívají testy reflektující práci svalů předloktí (např. All-out test). Testovací aparaturu tvoří dřevěná lišta, která je propojena se senzory síly. Kromě síly je důležité okysličení svalů předloktí, které se měří pomocí blízké infračervené spektrometrie (NIRS). Náplní této práce je získávání dat z měření právě těchto dvou parametrů a podání okamžité i dlouhodobé zpětné vazby výzkumníkům i samotným lezcům, a to včetně vizualizací. Pro zjednodušení testování bude vše dostupné v jedné aplikaci. V tuto chvíli je připravena základní struktura aplikace. Výsledný program bude veřejně přístupný a předpokládá se jeho využití na pracovištích na Univerzitě v Innsbrucku a na Univerzitě Karlově v Praze.



Aplikovaná matematika, informatika a kybernetika II

MÍSTO: A40

KOMISE

Předseda komise: Ing. Jan Vrba. Ph.D.

Členové komise:

- Ing. Lukáš Hájek, Ph.D.
- Ing. Karel Štícha
- Ing. Šimon Axmann, Ph.D.

SEZNAM SOUTĚŽÍCÍCH

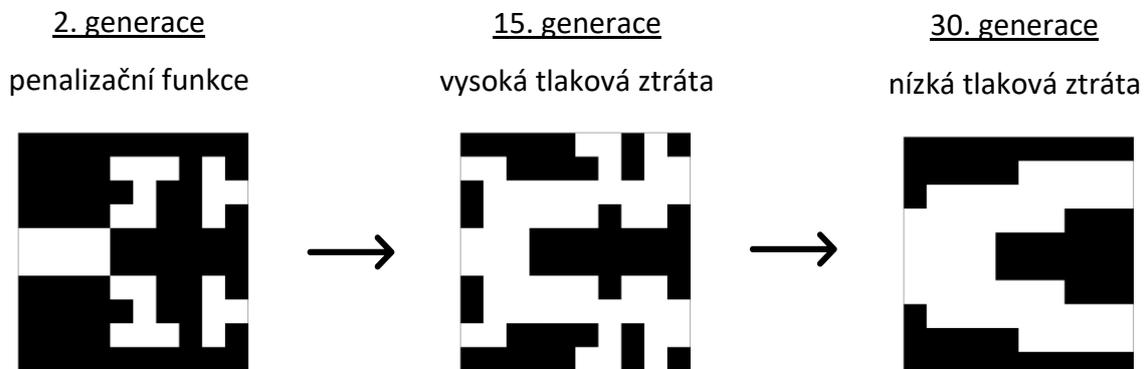
- **Ivana Havlenová**, B3, Ing. Martin Isoz, Ph.D., *Vliv hyperparametrů genetického algoritmu na průběh topologické optimalizace mikrofluidní cely*
- Bc. **Šimon Hudínek**, M1, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D., *Vývoj modelu filtru pevných částic s katalyticky aktivní vrstvou pro snížení emisí NO_x*
- Bc. **Jana Jarolímková**, M1, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D., *Paralelizace výpočtu elektrostatického pole generovaného nábojem na stěnách porézního filtru pevných částic*
- Bc. **David Kavka**, M2, Ing. Lukáš Mrazík, *Modelování systémů se závislými parametry*
- **Adam Benjamin Plšek**, B2, Ing. Anna Kovárnová, *Can neural networks help us with model order reduction of particle-laden flows?*
- Bc. **David Tichý**, M2, Ing. Mgr. Darina Bártová, Ph.D., *Měření a řízení vsádkové rektifikace pyrolýzního oleje*
- **Jakub Vencel**, B2, Ing. Lukáš Mrazík, *Digitalizace dat pomocí metody OCR do databázového systému s uživatelským rozhraním*

Vliv hyperparametrů genetického algoritmu na průběh topologické optimalizace mikrofluidní cely

Ivana Havlenová (B3)

Školitel: Ing. Martin Isoz, Ph.D.

Nejuniverzálnějším, ale zároveň nejkompexnějším přístupem k optimalizaci geometrie součástek je topologická optimalizace. Vzhledem k její komplexnosti jsou její průběh i výsledky při použití genetických algoritmů silně závislé na nastavení hyperparametrů (velikost populace a počet generací). Cílem této práce je analýza vlivu vybraných hyperparametrů na topologickou optimalizaci mikrofluidního rozdělovače, jejímž účelem je minimalizace tlakové ztráty. Tlaková ztráta je vyhodnocena s využitím výpočetní dynamiky tekutin (CFD). Pro topologie, u nichž není možné spočítat tlakovou ztrátu (na obrázku vlevo) bylo nutné vhodným způsobem nastavit penalizační funkci. Jako nejlepší nastavení hyperparametrů jsme určili takovou sestavu hodnot, která potřebuje nejkratší výpočetní čas a podporuje opakovatelnost optimalizace. Nejkritičtější se ukázalo být správné nastavení penalizační funkce. Nastavení jsme nakonec testovali na několika různých rozlišeních topologického prostoru a ve většině případů optimalizace došla k podobné optimální geometrii.

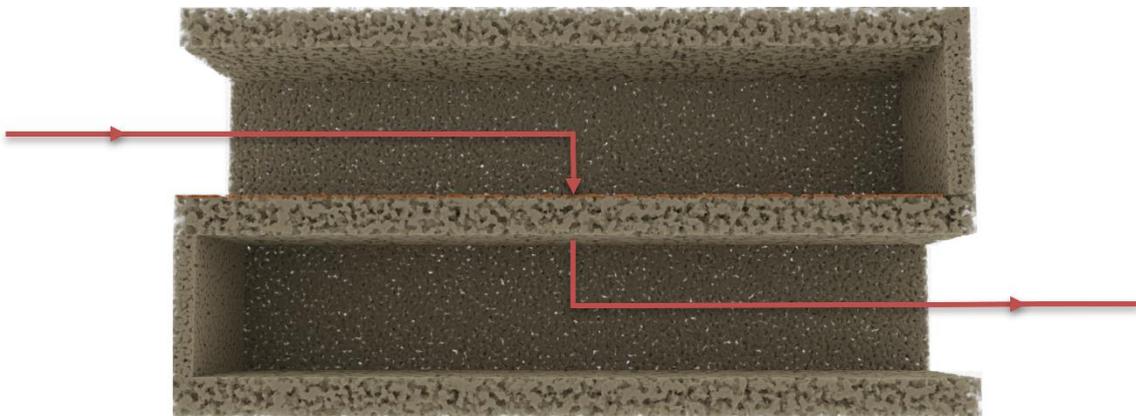


Vývoj modelu filtru pevných částic s katalyticky aktivní vrstvou pro snížení emisí NO_x

Bc. Šimon Hudínek (M1)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Redukce emisí oxidu dusíku (NO_x) je velkou výzvou doprovázející provoz všech spalovacích procesů, zejména s ohledem na zpřísnování emisních norem v průmyslovém sektoru. V rámci vývoje nového typu dieselgenerátoru s maximálním výkonem 750 kW je nutné navrhnout filtr pevných částic s aktivní vrstvou katalyzátoru pro selektivní redukci NO_x (SCR) tak, aby splnil emisní normu STAGE V. Mým úkolem bylo rozšířit stávající matematický 1D+1D model filtru pevných částic, aby kromě výpočtu zachytu částic a tlakové ztráty dokázal předpovědět i průběh povrchových reakcí na naneseném katalyzátoru pro selektivní redukci NO_x . 1D+1D model předpokládá pístový tok výfukových plynů kanálkem a na něj kolmý konvekčně-difúzní 1D transport přes stěnu filtru s naneseným katalyzátorem, kde probíhají chemické reakce. Výpočty jsou realizovány metodou konečných objemů. Sestavený dynamický model s nízkou výpočetní náročností umožňuje analyzovat vliv parametrů filtru na konverzi NO_x při různých provozních podmínkách. Na základě počítačových simulací byla nalezena vhodná konfigurace katalytického filtru pro účinné snížení emisí NO_x i pevných částic a splnění dané normy.

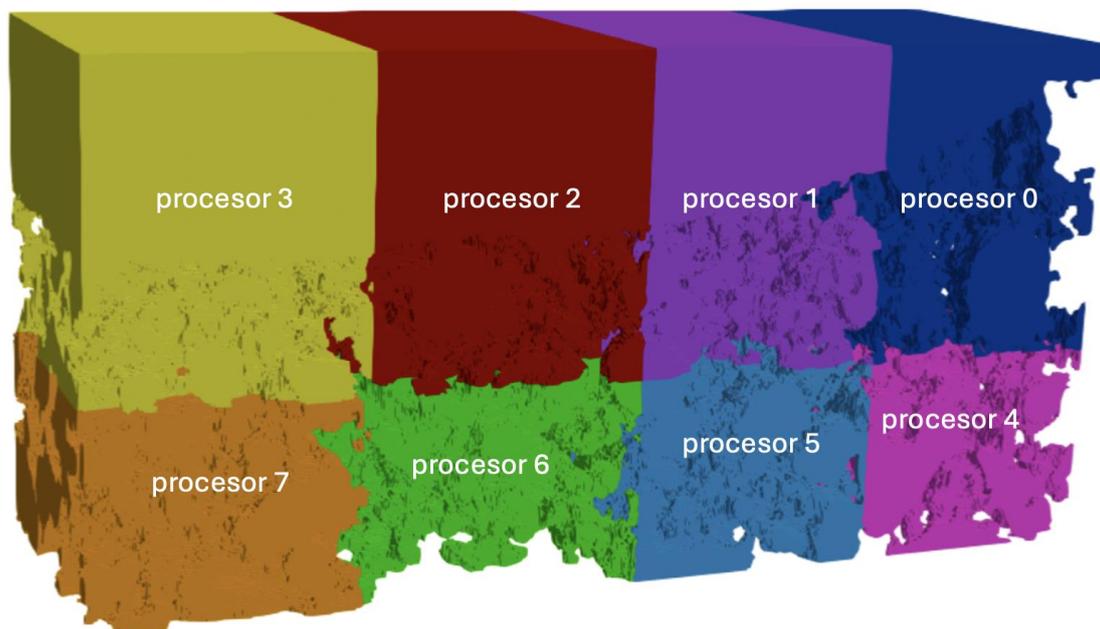


Paralelizace výpočtu elektrostatického pole generovaného nábojem na stěnách porézního filtru pevných částic

Bc. Jana Jarolímková (M1)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Tento příspěvek se zaměřuje na výpočet elektrostatického pole generovaného náboji na stěnách katalytického filtru pevných částic, konkrétně na urychlení generování tohoto pole pomocí paralelizace. Během tohoto procesu dochází k rozdělení výpočetní domény mezi daný počet procesorů a následnému souběžnému výpočtu v rámci jednotlivých částí. Pro správnou funkčnost implementace je zapotřebí zajistit přístup jednotlivých procesorů k datům v celé výpočetní doméně, protože náboj v jedné části domény ovlivňuje hodnotu pole v ostatních částech. Správnou implementací v prostředí OpenFOAM bylo dosaženo optimálního škálování, což bylo ověřeno ve srovnávacích simulacích na 1, 2, 4, 8 a 16 jádrech procesoru. Díky úspěšné paralelizaci bylo dosaženo mnohonásobného zrychlení výpočetního procesu, takže mohla být provedena simulační studie filtrace pevných částic ve větší části 3D zrekonstruované stěny katalytického filtru.



Ukázka rozdělení výpočetní domény mezi jednotlivé procesory

Modelování systémů se závislými parametry

Bc. David Kavka

Školitel: Ing. Lukáš Mrazík

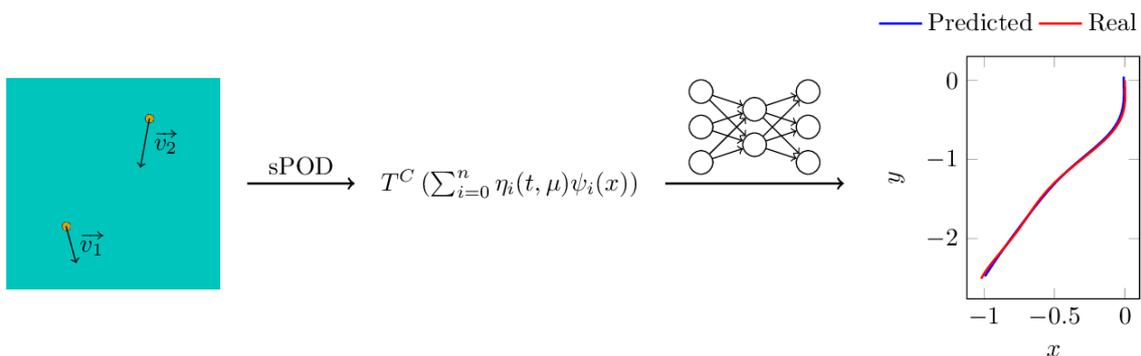
Matematické modely v řízení procesů často spoléhají na zjednodušující předpoklady, jako jsou například konstantní hustota nezávislá na koncentraci nebo neměnná tepelná kapacita média vůči teplotě. Tato práce si klade za cíl prozkoumat, jak opomíjené závislosti parametrů ovlivňují přesnost linearizovaných modelů. Zaměří se na systematickou analýzu různých vztahů mezi parametry a stavovými proměnnými systému a jejich vliv na přesnost a složitost modelu. Součástí práce je také vývoj grafického uživatelského rozhraní, které umožní vizualizaci dopadu jednotlivých zjednodušení. Cílem je přinést obecné poznatky o tom, kdy a jak může zohlednění proměnných závislostí parametrů přispět k přesnějším modelům.

Can neural networks help us with model order reduction of particle-laden flows?

Adam Benjamin Plšek (B2)

Školitel: Ing. Anna Kovárnová

Most models describing real-world phenomena are high-dimensional and computationally complex, an issue especially significant in optimization and control problems. Model order reduction is a general approach for tackling this issue as it strives to replace the original costly model by a computationally cheap surrogate while retaining most of the information. In long-term research, we are developing methods for model order reduction for particle-laden flows. The methods are based on combining the shifted proper orthogonal decomposition, which is capable of treating the convection-dominated particle-laden flows and provides low-rank approximation of the pre-computed system solutions; with interpolation between the available low-rank solution approximations. In this work, we compare several conventional interpolation tools with the use of neural networks as interpolators and show that neural networks outperform all the tested conventional interpolators.



Měření a řízení vsádkové rektifikace pyrolýzního oleje

Bc. David Tichý (M2)

Školitel: Ing. Mgr. Darina Bártová, Ph.D.

Problematika odpadních mikroplastů a gumového odpadu, zejména z automobilových pneumatik, se stává stále naléhavějším ekologickým problémem. Pneumatiky obsahují škodlivé látky, jako jsou těžké kovy, které se mohou uvolňovat do půdy a vodních zdrojů, čímž představují dlouhodobé ekologické riziko. Současné technologie nakládání s odpadem nejsou schopny plně zvládnout tuto problematiku, což zvyšuje potřebu efektivních a udržitelných řešení. Perspektivní metodou je pyrolýza, termochemický proces umožňující rozklad organických materiálů bez přítomnosti kyslíku. Pyrolýza gumového odpadu vede k produkci pyrolýzního oleje, který má potenciální využití jako druhotná surovina. Tato práce se zaměřuje na získání a zpracování pyrolýzního oleje z pneumatik, s cílem analyzovat jeho chemické a fyzikální vlastnosti a stanovit jeho vhodné využití. Hlavní pozornost je věnována modelování vsádkové rektifikace jako technologického kroku pro optimalizaci zpracování pyrolýzního oleje. Byla provedena analýza pyrolýzního oleje dle normy ASTM D2887. Došlo k nadefinování vstupní vsádky, velikosti zařízení a omezujících podmínek. Následně byl vytvořen matematický model vsádkové rektifikace pro vhodné dimenzování zařízení. Vzniklo výtěžkové schéma, které slouží jako podklad pro výpočet návratnosti investice do stavby zařízení.

Digitalizace dat pomocí metody OCR do databázového systému s uživatelským rozhraním

Jakub Vencel (B2)

Školitel: Ing. Lukáš Mrazík

Tato práce se zabývala digitalizací knih popisující chování vodných elektrolytů. Jednotlivé svazky obsahují tabelovaná data regresních modelů statistické termodynamiky, které slouží k výpočtům rozpustností anorganických látek a hustot vzniklých roztoků. Stránky knih byly naskenovány a za účelem extrakce výpočetních parametrů byla napsána aplikace v programovacím jazyce Python, jejíž součástí bylo počítačové zpracování fotografií pomocí modulu OpenCV a čtení textu z nich metodou OCR (Optical Character Recognition) s využitím knihovny Pytesseract. Ke skladování získaných dat byl vytvořen lokální databázový model. Nedílnou součástí procesu byla i normalizace vytvořené databáze do normální formy. Při tomto úkonu bylo nutné zachovat integritu dat, aby nedošlo ke ztrátě informací primárně u složitějších fázových chování. Na závěr bylo naprogramováno GUI (Graphical User Interface), do něhož byly implementovány algoritmy ke zpětnému výpočtu výše zmíněných veličin. Digitalizovaná data jsou vhodná například pro teoretickou práci s elektrolyty, modelování krystalizačních zařízení a odhadování fázového chování.

1	J O D I D A M O N N Ý
2	MOLEKULOVÁ VÁHA = 144.943
3	HUSTOTA KRystalU = 2515
4	PARAMETRY KRystalICKÉ MODIFIKACE
5	PARAMETRY KRystalOVÉ MŘÍŽKY
7	SOUSTAVA PROSTOROVÁ GRUPOU TYP MŘÍŽKY Z = 4
6	KUBICKÁ O/H/S 102
8	A = 7.244 ALFA = - B = - BETA = - C = - GAMA = -
9	ROVNICE ROZPUSTNOSTI LOG X = 0.15310 - 182.3829 / T - 0.114482 LOG T
10	TEPLOTA 0.0 1.0 2.0 3.0 4.0 5.0 6.0 7.0 8.0 9.0
11	0.0 1.5424 1.5520 1.5616 1.5711 1.5807 1.5902 1.5998 1.6093 1.6189 1.6284 10.0 1.6380 1.6475 1.6570 1.6665 1.6760 1.6855 1.6950 1.7045 1.7140 1.7235 20.0 1.7330 1.7424 1.7519 1.7613 1.7708 1.7802 1.7897 1.7991 1.8085 1.8179 30.0 1.8273 1.8367 1.8461 1.8555 1.8649 1.8742 1.8836 1.8929 1.9023 1.9116 40.0 1.9209 1.9302 1.9396 1.9489 1.9581 1.9674 1.9767 1.9860 1.9952 2.0045 50.0 2.0137 2.0229 2.0322 2.0414 2.0506 2.0598 2.0689 2.0781 2.0873 2.0964 60.0 2.1056 2.1147 2.1238 2.1329 2.1420 2.1511 2.1602 2.1693 2.1784 2.1874 70.0 2.1965 2.2055 2.2145 2.2235 2.2325 2.2415 2.2505 2.2595 2.2684 2.2774 80.0 2.2863 2.2953 2.3042 2.3131 2.3220 2.3309 2.3398 2.3486 2.3575 2.3663 90.0 2.3751 2.3840 2.3928 2.4016 2.4104 2.4191 2.4279 2.4367 2.4454 2.4541 100.0 2.4629
2	TEPLOTNÍ KOEFICIENT ROZPUSTNOSTI TEPLOTA 5.0 15.0 25.0 35.0 45.0 55.0 65.0 75.0 85.0 95.0 Tab. 339 0.00956 0.00950 0.00944 0.00936 0.00928 0.00919 0.00909 0.00899 0.00888 0.00877

Aplikovaná matematika, informatika a kybernetika III

MÍSTO: A330d

KOMISE

Předseda komise: RNDr. Mgr. Pavel Cejnar, Ph.D.

Členové komise:

- Ing. Jan Kohout, Ph.D.
- Mario Vazdar, Ph.D.
- Ing. Daniela Janstová

SEZNAM SOUTĚŽÍCÍCH

- Bc. **Alexandra Hlaváčová**, M1, doc. Fatima Hassouna, Ph.D., *Příprava a charakterizace elektricky vodivých celulózových hydrogelů podobných kůži*
- Bc. **Lucie Kolumpková**, M2, Ing. Jan Vrba, Ph.D., *Detekce parézy hlasivky z laryngoskopických videí*
- Bc. **Magdaléna Menčíková**, M1, doc. Fatima Hassouna, Ph.D., *Vývoj amorfních pevných disperzí pomocí in situ tepelného zesíťování: fyzikální stabilita a disoluční profil*
- Bc. **Eliška Paulíková**, M2, doc. Ing. Jitka Čejková, Ph.D., *Automatizované řízení a vizuální navigace robota*
- Bc. **Vítek Průša**, M2, Ing. Jan Vrba, Ph.D., *Řízení laserového zaměření pomocí zpětnovazebního učení*
- Bc. **Tereza Tumová**, M1, Prof. Ing. Aleš Procházka, CSc., *Detekce poruch chůze pomocí akcelerometrických senzorů*
- Bc. **Jan Vyčítal**, M2, prof. Ing. Jan Mareš, Ph.D., *Tvorba Arduino shieldů pro výuku teorie řízení dynamických systémů*

Příprava a charakterizace elektricky vodivých celulózových hydrogelů podobných kůži

Bc. Alexandra Hlaváčová (M1)

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

Elektronické kůže (e-kůže) jsou umělé pružné kůže napodobující mechanické vlastnosti a senzorní schopnosti přirozené kůže tím, že převádí vnější podněty na elektrické signály. Roztažitelné a stlačitelné hydrogely na bázi biopolymerů přitahují v posledních letech velkou pozornost při vývoji e-kůží pro různé aplikace, jako jsou senzory nositelné lidmi či zpětnovazební senzory v měkké robotice. Mezi těmito polymery je celulóza, hojně rozšířený biopolymer, zajímavým kandidátem pro vývoj ekologicky šetrných a biokompatibilních elektronických zařízení. Tato studie se zaměřuje na návrh a vývoj elektricky vodivých vysoce výkonných hydrogelů na bázi celulózy s využitím hybridní strategie, která kombinuje chemické a fyzikální síťování pomocí samouspořádání pro přípravu celulózové polymerní matrice. Díky *in-situ* potahování povrchu celulózového hydrogelu vodivým polymerem polyanilinem mu jsou dodány elektrické vlastnosti. Za využití rozličných analýz je studován vliv různých experimentálních podmínek, jako je stupeň substituce celulózy allylovými skupinami získanými v prvním kroku chemické reakce, koncentrace reaktantů v druhém kroku reakce, či množství pokrytí hydrogelu polyanilinem na morfologii, fyzikálně-chemické vlastnosti, mechanické vlastnosti či elektrické vlastnosti hydrogelu.

Detekce parézy hlasivky z laryngoskopických videí

Bc. Lucie Kolumpková (M2)

Školitel: Ing. Jan Vrba, Ph.D.

Paréza hlasivek je porucha, která způsobuje částečnou nebo úplnou ztrátu hybnosti hlasivkového svalu, což vede k problémům s hlasem a dýcháním. Tato práce se zaměřuje na vytvoření segmentačního modelu pro detekci hlasivek z laryngoskopických videí s využitím YOLO (You Only Look Once) architektury. Cílem je přesně identifikovat a vymezit hlasivky v jednotlivých snímcích videa, což představuje klíčový krok k automatizované analýze. YOLO, které je známé v oblasti detekce objektů, je v tomto případě použito k segmentaci. Výsledný model umožňuje efektivní rozpoznání a extrakci tvaru hlasivek, což tvoří základ pro budoucí vývoj klasifikačních nástrojů pro přesnější a rychlejší diagnostiku hlasivkových poruch.

Vývoj amorfních pevných disperzí pomocí *in situ* tepelného zesíťování: fyzikální stabilita a disoluční profil

Bc. Magdaléna Menčíková (M1)

Školitel: doc. Fatima Hassouna, Ph.D.

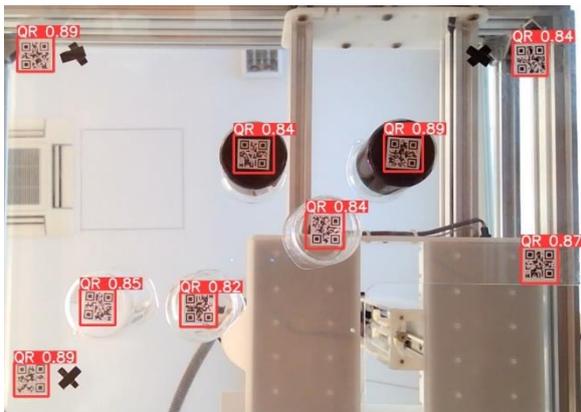
Jednou z nejslibnějších strategií, jak zvýšit biologickou dostupnost aktivních látek (APIs) s velmi omezenou rozpustností ve vodě, je připravit je ve formě amorfních pevných disperzí (ASDs) pomocí polymerní matrice. Z nedávných studií ASDs vyplývá, že k zabránění rizika rekrytalizace API během skladování je často zapotřebí vysoká koncentrace polymeru, a proto je tento přístup nevhodný pro ASDs s vysokým obsahem API (HDL ASDs). Tato práce se zabývá výzkumem jednoho z přístupů přípravy HDL ASDs, čímž je *in situ* tepelné zesíťování polymerní matrice. Pro tento výzkum byly použity dvě modelové látky lišící se sklotvornou schopností, tj. indometacin (IND) a naproxen (NAP). API byly vybrány za účelem zdůraznit vliv jejich sklotvorných schopností na amorfizaci a fyzikální stabilitu výsledných HDL formulací. Nejprve byla však vyhodnocena rozpustnost jednotlivých API v používaných polymerech, a to pomocí fázových diagramů zkonstruovaných kombinací kalorimetrických měření a termodynamického modelování. Již zmíněné formulace byly připraveny pomocí kombinace metody odpařování organického rozpouštědla a hydraulického tavení. Následně byly provedeny studie chemické struktury, vlastností v pevném stavu, fyzikální stability v čase a disolučního profilu pro nenasycené i přesycené systémy.

Automatizované řízení a vizuální navigace robota

Bc. Eliška Paulíková (M2)

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

Pipetovací robot Evobot, pracující v kartézské soustavě souřadnic, je uživatelsky programovatelný, což umožňuje specifikovat různé operace podle potřeb uživatele. Původní verze robota fungovala tak, že se cílové souřadnice zadávaly do řídicího programu, robot se na ně poslal a uživatel fyzicky označil jejich polohu. Takový postup je však zdlouhavý a nepraktický. V rámci předložené práce byl vytvořen řídicí systém, který dokáže samostatně identifikovat kádinky a určit jejich přesné souřadnice pomocí QR kódů umístěných na každé kádince. Tento systém využívá kameru sledující spodní část robota, přičemž neuronová síť zajišťuje detekci a rozpoznání QR kódů. Veškeré zpracování probíhá v Pythonu – software načítá informace z QR kódů, přepočítává a následně přiřazuje souřadnice konkrétním kádkám. Pro snadné ovládání systému byl vytvořen jednoduchý grafický ovládací panel (GUI). Díky němu si uživatel může snadno vybrat z připravených pipetovacích úkonů. Systém tak zajišťuje automatické a efektivní určení polohy i samotné pipetování, aniž by bylo potřeba manuálně zadávat souřadnice.



Řízení laserového zaměření pomocí zpětnovazebního učení

Bc. Vítek Průša (M2)

Školitel: Ing. Jan Vrba, Ph.D.

Cílem práce je demonstrovat výhody zpětnovazebního učení při řešení komplexních úloh v oblasti automatizace a řízení. Tento projekt se konkrétně zaměřuje na aplikaci zpětnovazebního učení při řešení specifického problému přesného laserového zaměření v systému, který tvoří dva lasery ovládané pomocí servomotorů, přičemž červený laser se pohybuje náhodně a zelený laser se snaží co nejpřesněji zaměřovat polohu červené tečky. Použitý postup zahrnuje několik kroků: seznámení se s hardwarem pro laserové zaměření a sběr dat pro tvorbu realistického simulačního modelu, výběr a implementaci algoritmu pro rozpoznávání laserového bodu v obraze a návrh řízení založeného na zpětnovazebním učení, které umožňuje autonomní řízení pohybu laseru s vysokou přesností a adaptací na změny. Pro potřeby učení a ladění algoritmu byl vyvinut simulovaný model, který umožňuje efektivní trénink agenta v softwarovém prostředí. Po dosažení požadované přesnosti a rychlosti zaměření v simulaci bude algoritmus připraven pro přenos do reálného hardwaru, kde bude řízení otestováno.

Detekce poruch chůze pomocí akcelerometrických senzorů

Bc. Tereza Tumová (M1)

Školitel: prof. Ing. Aleš Procházka, CSc.

Analýza chůze je mezioborovým studiem důležitým pro včasnou diagnostiku poruch chůze a jejich následnou korekci. V praxi existuje několik přístupů k detekci těchto poruch, mezi něž patří vizuální analýza, 3D kinematická analýza, využití akcelerometrů a gyroskopů, nositelných zařízení, či elektromyografie. Tato práce se zaměřuje na porovnání možností akcelerometrických senzorů v mobilních telefonech, analyzovaných pomocí mobilní verze MATLABU, s pokročilejšími senzory od společnosti WITMOTION SHENZHEN CO. Profesionální senzory umožňují přesnější měření a lepší nastavení parametrů. Použití dvou senzorů poskytuje možnost porovnat data z obou stran těla a zaměřit se na analýzu symetrie chůze. Současně také zkoumám minimální počet senzorů potřebných k dosažení maximální přesnosti dat, což může přispět k optimalizaci procesu analýzy chůze jak z hlediska nákladů, tak efektivity.

Tvorba Arduino shieldů pro výuku teorie řízení dynamických systémů

Bc. Jan Vyčítal (M2)

Školitel: prof. Ing. Jan Mareš, Ph.D.

Projekt se zaměřuje na návrh Arduino shieldů pro výuku základů teorie řízení. Cílem je vytvořit vlastní PCB, firmware a rozhraní pro Python a MATLAB, které zpřístupní experimenty s dynamickými systémy. Moduly jsou cenově dostupné, snadno vyrobitelné a kompatibilní s Arduino Uno, přičemž většinu konstrukčních částí lze vyrobit pomocí 3D tisku. Díky těmto vlastnostem jsou vhodné pro vzdělávací účely. První modul reguluje vertikální polohu kuličky v průhledné trubici prostřednictvím řízeného proudu vzduchu. Poloha kuličky je snímána ToF senzorem a regulace ventilátoru probíhá pomocí PWM. Druhý modul představuje systém „Ball on Beam,“ kde je poloha ocelové kuličky řízena náklonem trubice servomotorem. Pohyb kuličky je monitorován ToF senzorem, což umožňuje vytvoření nelineárního regulátoru, který je vhodný pro demonstraci pokročilých řídicích metod. Třetí modul demonstruje metody tlumení vibrací u ramene poháněného servomotorem. Oscilace jsou měřeny akcelerometrem a zpětná vazba řídí zásahy servomotoru k maximálnímu útlumu vibrací. Podobné techniky se využívají například v robotických ramenech.