



FAKULTA
CHEMICKO-INŽENÝRSKÁ
VŠCHT PRAHA

Studentská Vědecká Konference

2021

2. 12. 2021

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.
- [445](#) Ústav počítačové a řídicí techniky
Ing. Iva Nachtigalová, Ph.D.

SPONZOŘI FAKULTY CHEMICKO-INŽENÝRSKÉ



ŠKODA



Ústav analytické chemie (402)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Martin Člupek, Ph.D.

SEZNAM SEKCI

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

SPONZOŘI ÚSTAVU ANALYTICKÉ CHEMIE



NICOLET CZ
MOLECULAR SPECTROSCOPY



LECO



zeNTIVA



vesmír



Analytická chemie I

MÍSTO: A105

KOMISE

doc. RNDr. Pavel Řezanka, Ph.D. (předseda)

Ing. Jan Koucký, Ph.D.

Ing. Vadim Prokopec, Ph.D.

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

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:40 [Bc. Ondřej Dvořák](#) (M2, Ing. Martin Člupek, Ph.D.)

Vývoj zlatého substrátu pro povrchem zesílenou vibrační spektroskopii riboflavinu

09:00 [Jakub Harvalík](#) (B3, prof. Ing. Vladimír Setnička, Ph.D.)

Studium využitelnosti koloidních roztoků Au a Ag nanočástic pro povrchem zesílenou Ramanovu spektroskopii krevní plazmy

09:20 [Yuliya Hryhoryeva](#) (M2, doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.)

Teplotní koeficienty ^1H NMR signálu 4-(dimethylamino)pyridinu v závislosti na rozpouštědle

09:40 [Bc. Adéla Koryťáková](#) (M2, Ing. Marie Švecová, Ph.D.)

Studium vlivu složení substrátu na galvanickou depozici tradičních SERS aktivních vrstev

10:00 [Yejune Lee](#) (B3, doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.)

Přednosti a úskalí 2D ^1H - ^{13}C HSQC NMR spekter v kvantitativní analýze

10:20 [Bc. Simona Protivínská](#) (M2, doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.)

Analýza vonných látek ovocných destilátů metodou NMR

10:40 [Bc. Valerie Smeliková](#) (M2, Ing. Martin Člupek, Ph.D.)

SERS studie návykových stimulantů

vyhlášení výsledků

Vývoj zlatého substrátu pro povrchem zesílenou vibrační spektroskopii riboflavinu

Bc. Ondřej Dvořák (M2)

Školitel: Ing. Martin Člupek, Ph.D.

Povrchem zesílené metody vibrační spektroskopie, konkrétně povrchem zesílená Ramanova spektroskopie a povrchem zesílená infračervená absorpce nabízejí možnost zesílení analytického signálu v rozmezí 10^2 - 10^{11} oproti svým základním metodám. Aby bylo možné provést kvalitativní a alespoň semi-kvantitativní analýzu vybraného vzorku pomocí povrchem zesílených metod, je potřeba mít kvalitní, na povrchu nanostrukturovaný, plasmonický substrát. Cílem této práce je vyvinout zlatý substrát, který bude co nejlépe zesilovat Ramanův rozptyl a absorpci infračerveného záření riboflavinem. Substráty byly připravovány metodou katodické redukce chloridu tetraamminzlatitého na platinovém terčíku. K charakterizaci substrátů byla využita na nich naměřená Ramanova a infračervená spektra riboflavinu zpracovaná pomocí statistických metod. Ukázalo se, že všechny připravené substráty zesilují Ramanův rozptyl, avšak homogenita výsledků měření se u jednotlivých substrátů mírně liší. Pro povrchem zesílenou infračervenou absorpci se připravené zlaté substráty ukazují jako nevhodné, tudíž hlavní pole jejich využití bude povrchem zesílená Ramanova spektroskopie.

Studium využitelnosti koloidních roztoků Au a Ag nanočástic pro povrchem zesílenou Ramanovu spektroskopii krevní plazmy

Jakub Harvalík (B3)

Školitel: prof. Ing. Vladimír Setnička, Ph.D.

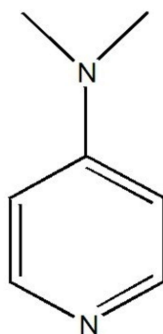
Spektroskopická analýza krevní plazmy za účelem klinické diagnostiky patří v poslední době k oblastem, v nichž probíhá intenzivní výzkum. Spektroskopické techniky umožňují detekci malých změn ve složení krevní plazmy vznikajících v důsledku rozvíjejících se závažných onemocnění, a mají tak potenciál stát se rychlou a levnou alternativou stávajících diagnostických metod. Jednou z nejčastěji využívaných spektroskopických technik pro analýzy biologických materiálů, jako je krevní plazma, je Ramanova spektroskopie. Intenzitu Ramanova rozptylu lze navíc zvýšit použitím substrátů vykazujících lokální povrchovou plasmonovou rezonanci, což umožňuje detekci analytů s velice nízkou koncentrací (řádově okolo 10^{-8} mol/l). V této práci byla testována využitelnost koloidních roztoků Au a Ag nanočástic pro povrchem zesílenou Ramanovu spektroskopii krevní plazmy. Byly studovány jejich zesilující schopnosti v závislosti na směšovacím poměru, formě vzorku (roztok či zaschlá kapka) a přídavku agregačního činidla (NaCl). Cílem je nalézt vhodnou kombinaci typu plasmonických nanočástic a experimentálních podmínek měření k maximalizaci efektu zesílení Ramanova rozptylu krevní plazmy, což by mohlo přispět k získání nových spektrálních informací využitelných pro rozpoznávání závažných onemocnění.

Teplotní koeficienty ^1H NMR signálu 4-(dimethylamino)pyridinu v závislosti na rozpouštědle

Yuliya Hryhoryeva (M2)

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

Cílem práce je studovat vliv teploty na chemický posun ^1H NMR signálů (tzv. teplotní koeficienty, $\Delta\delta/\Delta T$) a na interakční konstanty $^1J_{\text{HC}}$ v různých rozpouštědlech. Obecně je známo, že chemický posun jádra v NMR spektru má přímou spojitost s chemickým okolím daného jádra, které můžeme rozdělit na: a) intramolekulární, které je dáno strukturou molekuly, např. vazebné délky a úhly; b) intermolekulární, které je dáno jinými molekulami v okolí, např. rozpouštědla. Chemické okolí není statické, ale je průměrem jednotlivých zastoupených stavů. Pozorovaný chemický posun je tedy průměrem v důsledku rychlé chemické výměny. Závislost chemického posunu na teplotě je částečně prostudována v případě ^1H signálů jader účastnících se vodíkové vazby, čehož je využíváno k jejich identifikaci. Hodnota $\Delta\delta/\Delta T < -3$ ppb/K je spojována se silnou vodíkovou vazbou, obvykle intramolekulární a hodnota $\Delta\delta/\Delta T < -5$ ppb/K s intermolekulární vodíkovou vazbou. Teplotní závislost chemického posunu a interakčních konstant u jader, které se neúčastní vodíkové vazby, je téměř opomíjena a nebyla doposud systematicky studována. V této práci byli studovány teplotní koeficienty 4-(dimethylamino)pyridinu (DMAP) v toluenu- d_8 (25-105°C), v DMSO- d_6 (25-145°C) a v $\text{CD}_3\text{CD}_2\text{OD}$ (25-75°C).



Studium vlivu složení substrátu na galvanickou depozici tradičních SERS aktivních vrstev

Bc. Adéla Koryťáková (M2)

Školitel: Ing. Marie Švecová, Ph.D.

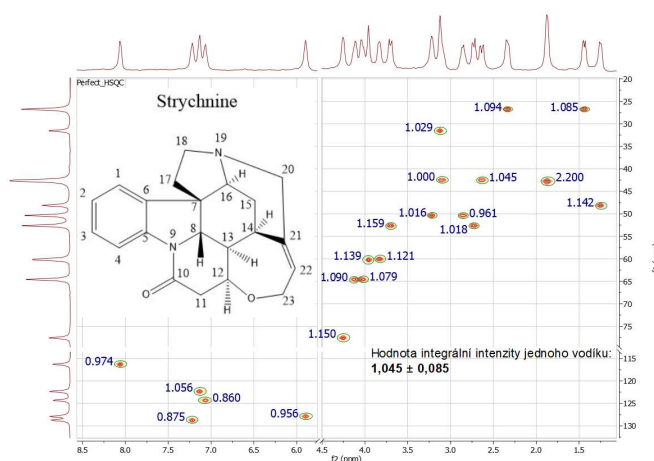
Jednou z metod, které lze využívat pro stopovou analýzu, je spektroskopie povrchem zesíleného Ramanova rozptylu (Surface-Enhanced Raman Scattering, SERS). Nejdůležitějším krokem při aplikaci této metody je příprava vzorků, která vyžaduje hluboké pochopení samotného principu SERS spektroskopie. Hlavním projevem této metody je několikanásobné zvýšení optické odezvy studovaných analytů, které jsou deponovány na nanostrukturované SERS-aktivní povrchy plasmonických kovů. Tyto povrchy lze jednoduše a rychle připravit bezproudovou depozicí, která je mimo jiné podmíněná složením materiálu, na který je plasmonický kov vylučován. Výběr vhodného povrchu probíhá na základě spektrální odezvy analytů adsorbovaných na jednotlivé vzorky. Pro tyto potřeby se nejčastěji využívají tzv. modelové analyty, jež mají vhodné optické vlastnosti. V rámci této práce byly připraveny Ag, Au a Cu plasmonické substráty galvanickou depozicí na různé typy povrchů (jednosložkové podklady Al a Zn, slitina AlMg). Jednotlivá SERS spektra byla měřena s využitím excitační vlnové délky 1064 nm pro minimalizaci vlivu fluorescence. Cílem předkládané práce je porovnat vliv složení podkladového materiálu na galvanickou depozici SERS-aktivních vrstev s ohledem na spektrální odezvu modelového analytu riboflavinu.

Přednosti a úskalí 2D ^1H - ^{13}C HSQC NMR spekter v kvantitativní analýze

Yejune Lee (B3)

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

Metoda 1D ^1H kvantitativní NMR, se za poslední dekádu vyvinula ve standardní nástroj kvantitativní analýza organických látek. Analýza složitých směsí je však často komplikována překryvem signálů nebo doporučených integračních mezí. Ve 2D NMR spektru jsou takové signály často odděleny, avšak zatím není zcela vyřešeno, jak z těchto spekter získat kvantitativní obsah látek. V této práci uvádím přednosti a úskalí 2D kvantitativních ^1H - ^{13}C HSQC NMR spekter, kde signály ^1H jsou v druhé dimenzi rozděleny podle chemického posunu uhlíku, na který jsou vázány. Pro získání kvantitativní odezvy ve 2D ^1H - ^{13}C HSQC NMR je zásadní provést optimalizaci parametrů pulzní sekvence, jakož i sekvence samotné. Nejdůležitější jsou kompenzace závislosti integrační intenzity krosipíku na $^1J_{\text{CH}}$ interakční konstantě, zohlednění relaxačních časů T_1 a T_2 , a potlačení off-resonance efektu. V této práci porovnávám výsledky integrace ^1H - ^{13}C krosipíku strychninu z různých typů HSQC sekvencí a jejich různém nastavení. Studuji zejména vliv zpracování spektra, způsobu integrace krosipíků, kompenzace vlivu hodnoty $^1J_{\text{CH}}$, nastavení ^{13}C offsetu. Cílem je optimalizovat měření a zpracování tak, aby byla zajištěná správnost integrační hodnoty a její reprodukovatelnost.

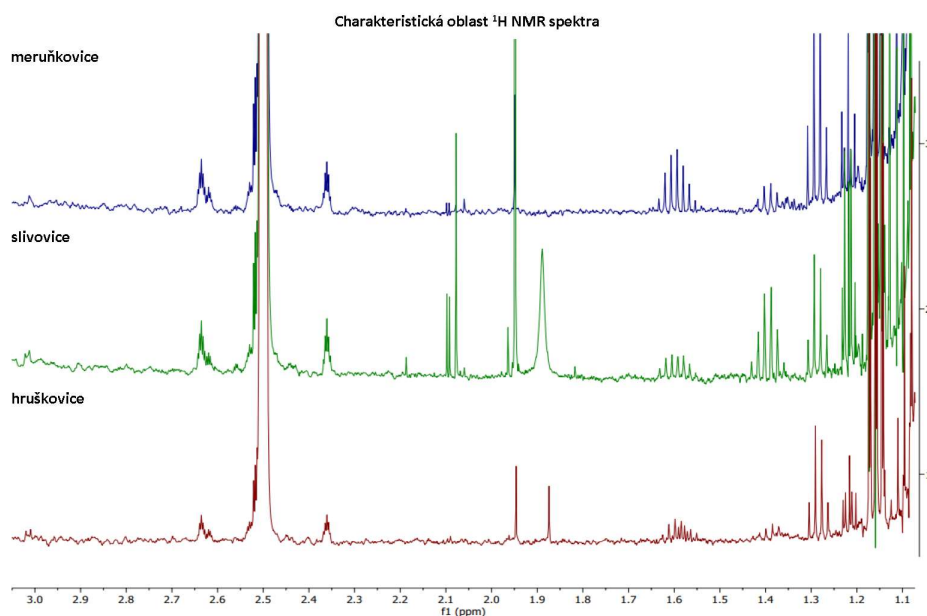


Analýza vonných látek ovocných destilátů metodou NMR

Bc. Simona Protivínská (M2)

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

Současná forenzní analýza destilátů pomocí NMR spektroskopie zahrnuje téměř výhradně identifikaci původu obsaženého etanolu (syntetický vs. kvasný) stanovením obsahu deuteria. Ve vývoji jsou postupy umožňující kontrolu kvality destilátů, či postupy umožňující identifikaci druhu ovoce, které bylo k přípravě destilátu použito. Identifikace ovoce lze dosáhnout stanovením obsahu minoritních látek v destilátech, které přímo souvisí s použitým ovocem a zodpovídají i za organoleptické vlastnosti ovocných destilátů, tedy aroma, chuť a vzhled. Analýza minoritních látek obsažených přibližně v 1 % obsahu je komplikována přítomností značného množství etanolu a vody. V této práci porovnávám ^1H NMR spektra vzorků hruškovice, slivovice a meruňkovice (viz obrázek). Zaměřuji se i na identifikaci minoritních látek již zmíněných destilátů pomocí ^1H - ^1H COSY a NOESY, a ^1H - ^{13}C HSQC a HMBC NMR spekter. Rušivý vliv vody a etanolu se snažím eliminovat: a) extrakcí mezi H_2O a CDCl_3 , díky níž mohu analyzovat hydrofobní látky, b) extrakcí mezi D_2O a CHCl_3 , díky níž analyzuji hydrofilní látky, c) zachycením těkavých látek jejich vytěsněním inertním plynem a jejich kondenzací za teploty kapalného oxidu uhličitého.



SERS studie návykových stimulantů

Bc. Valerie Smeliková (M2)

Školitel: Ing. Martin Člupek, Ph.D.

Důsledky spojené s užíváním návykových látek (drog) neznamenají pouze zdravotní komplikace pro uživatele, ale často s sebou přináší i další společenské problémy, jako je zvýšená kriminalita v důsledku agresivního chování jedinců pod vlivem dané látky. V rámci prevence a zamezení těmto problémům, je již samotné držení návykových látek trestným činem. Ačkoliv se stále objevují nové látky, které nejsou postihnutelné zákony, popularita tradičních drog neklesá, ovšem prokázání takovýchto látek bývá pro orgány činné v trestném řízení stále nelehké z důvodu cíleného obsahu různých příměsí či minimálního množství zadrženého vzorku. Aby byly státní složky schopny reagovat na proměnlivou situaci ilegálního trhu, je nutné vyvíjet neustále nové analytické postupy a upravovat ty současné. Ramanova spektroskopie je pro tyto účely atraktivní volbou díky specifické odezvě jednotlivých sloučenin, nicméně pro účely stopové analýzy je nezbytné upravit detekční limity základní metody, čehož lze dosáhnout adsorpcí analytu na nanostrukturované plasmonické povrchy. Tato práce je zaměřena na průzkum možností aplikace povrchem zesílené Ramanovy spektroskopie pro detekci návykových stimulantů na bázi amfetaminu, především podle typu zesilujícího povrchu.

Analytická chemie II

MÍSTO: A21

KOMISE

doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D. (předseda)

Ing. Veronika Škeříková, Ph.D.

Ing. Magda Vosmanská, CSc.

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

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:40 [Karolína Amblerová](#) (B2, Ing. Martin Havlík, Ph.D.)

Příprava chirální stacionární fáze pro chromatografické separace na bázi chirální bis-Troegerovy báze

09:00 [Ondřej Bilák](#) (B3, Ing. Jan Hajduch, PhD)

Příprava porfyrinových konjugátů s peptidy pro rozpoznávání rakovinných buněk

09:20 [Bc. Pavlína Kvášová](#) (M2, prof. Ing. Oto Mestek, CSc.)

Aplikace pomocného plynu v hmotnostní spektrometrii s indukčně vázaným plazmatem

09:40 [Bc. Aneta Myšková](#) (M2, doc. Dr. RNDr. David Sýkora)

Analýza syntetických lipidovaných analogů peptidu CART

10:00 [Bc. Jakub Marián Páleš](#) (M2, doc. Mgr. Taťjana Šiškanova, CSc.)

Spectroscopic binding studies of Neuroblastoma disease markers by novel thiophene based receptors-Precursors for the electrochemical sensors

10:20 [Markéta Šimková](#) (B3, doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.)

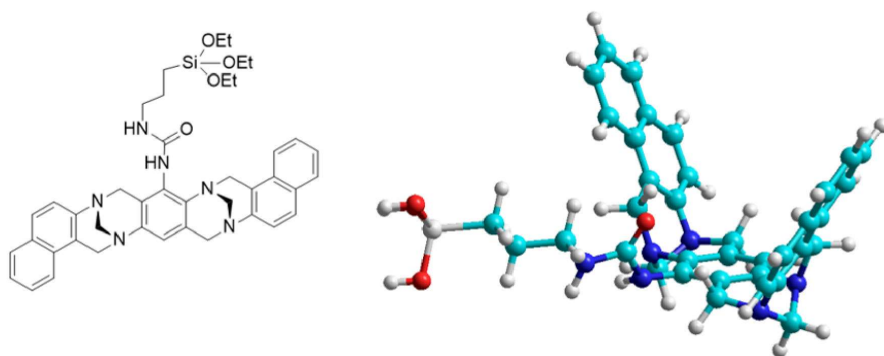
Vývoj metody pro chirální separaci vybraných kationů kapilární elektroforézou

Příprava chirální stacionární fáze pro chromatografické separace na bázi chirální bis-Trögerovy báze

Karolína Amblerová (B2)

Školitel: Ing. Martin Havlík, Ph.D.

Stanovení enantiomerní čistoty chirálních látek je pro jejich možné použití a kontrolu zcela zásadní. Nejrozšířenější analytickou metodou je chromatografie využívající chirální stacionární fázi. Chirální stacionární fáze se obvykle připravuje kovalentním připojením čistého enantiomeru chirální látky (selektoru) na silikagel. Selektory mají různé chemické struktury a liší se tedy typem mezimolekulárních interakcí, které se mohou uplatnit při interakci s dělenými látkami. Pro různé typy analyzovaných látek je tedy nezbytné použít selektor efektivní pro dané strukturní typy, neboť univerzální selektor neexistuje. Cílem této práce je příprava a studium silikagelové stacionární fáze modifikované kovalentním navázáním chirální bis-Trögerovy báze (bis-TB), která je tzv. molekulární pinzetou schopnou významné interakce zejména s planárními elektronově-deficitními molekulami. Díky předchozím experimentům víme, že připojení bis-TB na povrch silikagelu prostřednictvím skupin na vazebných naftalenových částech může zcela zamezit požadovanému vazebnému mechanismu. Tato práce se zaměřuje na přípravu bis-TB, která by byla navázána na stacionární fázi za středovou část molekuly (viz Obrázek).



Obrázek 1: Struktura a model cílené chirální syn-bis-Trögerovy báze

Příprava porfyrinových konjugátů s peptidy pro rozpoznávání rakovinných buněk

Ondřej Bilák (B3)

Školitel: Ing. Jan Hajduch, PhD

Porfyriny jsou makrocyclické sloučeniny založené na tetrapyrolovém uskupení, ve kterém jsou jednotlivé pyrroly spojeny pomocí methinových můstků. Tyto látky mají významnou úlohu v metabolismu živých organismů, ve kterých vznikají spontánní oxidací porfyrinogenů. Mezi významné biochemické procesy, kterých se porfyriny aktivně účastní, patří zejména transport kyslíku hemoglobinem a absorpce záření ve světelné fázi fotosyntézy. Unikátních fotochemických vlastností porfyrinů se využívá v mnoha oblastech analytické a medicínské chemie, ať už se jedná o senzorovou analýzu, terapii nebo diagnostiku. Cílem práce je příprava konjugátů vybraných porfyrinů s RGD peptidy a testování jejich biologické aktivity vůči nádorovým buňkám. Strategie této přípravy je založena na přípravě porfyrinových derivátů s karboxylovou funkční skupinou pro konjugaci peptidové části. V prvním kroku byl připraven výchozí porfyrin, který byl z reakční směsi separován pomocí sloupcové chromatografie a následně byl podroben ^1H NMR analýze. V současné době probíhá příprava dalších výše zmíněných porfyrinových derivátů.

Aplikace pomocného plynu v hmotnostní spektrometrii s indukčně vázaným plazmatem

Bc. Pavlína Kvášová (M2)

Školitel: prof. Ing. Oto Mestek, CSc.

Hmotnostní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem je velmi vhodnou technikou pro stanovení stopových koncentrací prvků. Tato metoda je však zatížena spektrálními a nespektrálními interferencemi. Mezi nespektrální interference patří i přenos náboje z iontů matričních prvků (zejména uhlíku) na atomy analytů, při kterém dochází ke zvýšení počtu ionizovaných atomů. Tento efekt se projeví zejména u prvků, které se v Ar plazmatu obtížně ionizují a je možné ho využít pro zvýšení citlivosti stanovení. Mezi prvky, které se obtížně ionizují v Ar plazmatu, patří arsen nebo selen. Cílem předložené práce bylo sestavit aparaturu umožňující přidávat malá množství CO_2 do Ar plazmatu a ověřit jeho vliv na stanovení arsenu. Také byl vybrán vhodný vnitřní standard pro stanovení As v různých maticích. Následně byla metoda validována a byla zjištěna mez detekce, ověřena linearita kalibrační závislosti As a ověřena přesnost stanovení As analýzou CRM.

Analýza syntetických lipidovaných analogů peptidu CART

Bc. Aneta Myšková (M2)

Školitel: doc. Dr. RNDr. David Sýkora

Tato práce se věnuje především tématice analytické charakterizace vlastností nově syntetizovaných lipidovaných analogů CART peptidu (CARTp) (kokainem a amfetaminem regulovaný transkript). CARTp je exprimován v periférii a v centrální nervové soustavě, kde také působí. Patří do skupiny anorexigenních látek a spolu s dalšími neuropeptidy se podílí na regulaci příjmu potravy. Tyto látky, přesněji jejich analoga, se jeví jako potenciální léčiva proti obezitě, nicméně v přirozené formě nejsou schopné prostupovat přes hematoencefalickou bariéru. Pomocí lipidace mastnými kyselinami dochází ke zvýšení jejich stability, lepší vazbě na transportní bílkoviny a k dosažení centrálního účinku po periferním podání. Cílem této studie je především zjištění stability těchto lipidovaných analogů CARTp v krevní plasmě myší/potkanů s využitím techniky LC-MS. Doposud byly dosaženy dílčí výsledky, které naznačují vyšší stabilitu lipidovaných analogů oproti jeho přirozené formě.

Spectroscopic binding studies of Neuroblastoma disease markers by novel thiophene based receptors- Precursors for the electrochemical sensors

Bc. Jakub Marián Páleš (M2)

Školitel: doc. Mgr. Taťjana Šiškanova, CSc.

The key role of anionic species in biological and environmental issues is well recognized and the problems associated with disrupted balance of anion in the nature represent currently a hot topic. Besides that, multitude of the negatively charged species are also known as precursors of various illnesses and the monitoring and sensing of these structures could be useful in diagnostic. Nowadays one group of promising and successful material are electrochemical sensors. These sensors using conducting polymers such as polypyrrole (PPy), polythiophene (PT) etc. are low-cost, portable and successful instruments generally adopted in clinical analysis. Therefore, the aim of this research is preparation of anionic receptors utilizing the thiophene skeleton as polymerizable carrier. New receptors were designed and synthesized according to required binding features. The anionic metabolites, known as tumour markers of neuroblastoma such as homovanillic acid (HVA) and vanillylmandelic acid (VMA) were screened by the monomeric thiophene-based receptors with urea binding site. Complexation properties and association constants were then evaluated using the NMR and UV-Vis titration experiments. Finally, receptor selectivity to HVA and VMA among other carboxylates was assessed.

Vývoj metody pro chirální separaci vybraných kathinonů kapilární elektroforézou

Markéta Šimková (B3)

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

Kathinon je alkaloid vyskytující se v listech keře katy jedlé (*Catha edulis*). Působí stimulačně na centrální nervovou soustavu a způsobuje uvolňování katecholaminů do CNS a periferního nervového systému. Úpravou struktury přírodního kathinonu vznikají nové psychoaktivní látky – syntetické kathinony. Tyto deriváty se obvykle připravují za účelem obejít národní legislativní normy a vyrobit analoga kontrolovaných látek drog se stejným či vyšším farmakologickým účinkem. Proto se řadí do skupiny tzv. „designer drugs“. Zatímco přírodní kathinon se vyskytuje pouze ve formě (S)-enantiomeru, syntézou jeho derivátů vzniká racemická směs. Cílem této práce bylo vyvinout metodu pro enantioseparaci sedmi vybraných kathinonů kapilární elektroforézou tak, aby bylo dosaženo co nejvyšší účinnosti separace, potažmo rozlišení. Optimalizováno bylo pH základního elektrolytu a koncentrace cyklodextrinů (CD) jakožto chirálních selektorů, přičemž byly použity β -CD, karboxymethylovaný β -CD, γ -CD a karboxymethylovaný γ -CD. Získané výsledky budou použity v dalších studiích, ve kterých bude zkoumán metabolismus vybraných kathinonů.

Ústav fyzikální chemie (403)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

doc. Ing. Ondřej Vopička, Ph.D.

SEZNAM SEKCI

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

SPONZOŘI ÚSTAVU FYZIKÁLNÍ CHEMIE



ZENTIVA



vesmír



Fyzikální chemie I

MÍSTO: A135

KOMISE

doc. Mgr. Michal Straka, Ph. D. (předseda)

Ing. Martin Klajmon, Ph.D.

Ing. Vojtěch Štejfa, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Simona Dubcová](#) (B3, prof. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.)

Photodynamics of germanium based photoinitiators

09:20 [Karolína Fárníková](#) (B2, Mgr. Ing. Eva Krupičková Pluhařová, Ph.D.)

Molecular simulations of the active site of the lipase CALB

09:40 [Veronika Kostková](#) (B3, Ing. Ctirad Červinka, Ph. D.)

Hledání efektivních výpočetních cest pro predikci polymorfismu molekulárních krystalů

10:00 [Patrik Kula](#) (B2, prof. Mgr. Pavel Jungwirth, CSc., DSc.)

Curvy vs flat, which model is better?

10:20 [Petr Linhart](#) (B3, RNDr. Michal Kolář, Ph.D.)

Conformational states of the uL22 protein

10:40 [Martin Procházka](#) (B3, prof. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.)

Simulating photoemission in polar liquids: The case of nimorazole

11:00 [Gabriela Želonková](#) (B3, RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.)

Theoretical study of neopentanol hydration

vyhlášení výsledků

Photodynamics of germanium based photoinitiators

Simona Dubcová (B3)

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

Dentistry is not everyone's cup of tea, but tooth decays and dental fillings are part of our life. Nowadays plenty of materials are used as dental fillings. One of them are resin-based composites, which benefits from the white colour, absence of mercury and electric nonconductivity. In contrast, the composites are more expensive and have worse mechanical properties. Tooth reparation is not only a subject of interest of dentists but also theoretical photochemists because of the chemical reaction - photoinduced polymerisation. Photoinitiators are crucial substances for photoinduced polymerisation as they absorb the UV/VIS light and decompose themselves forming reactive species to start polymerisation. In this work we took a look into novel potential photoinitiators: germanium based compounds. Using the techniques of computational chemistry we examined and compared the properties of acetophenone and its germanium derivate benzoyl germane. We modelled electron absorption spectra using the nuclear ensemble method with and without spin orbital couplings. Next step was to run dynamical simulations using Landau Zener Hopping scheme, which allows theoretical investigation of the processes following the irradiation of the molecule and possible formation of reactive forms.

Molecular simulations of the active site of the lipase CALB

Karolína Fárníková (B2)

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

Lipases are enzymes that catalyze hydrolysis of the ester bonds in fats. They are an essential part of lipid metabolism of the living organisms, but they also have industrial applications. They can be utilized for synthesis such as transesterification or aminolysis, due to their ability to function in both polar and organic solvents. Our research focuses on the modeling of transesterification catalyzed by *Candida Antarctica* lipase B, which contains the Asp-His-Ser catalytic triad. Transesterification is a transformation, where the alcohol group of an ester is exchanged by another, usually more complex, group. The rate-limiting step of the reaction is the formation of the second tetrahedral intermediate, which we investigated in detail in different solvents. At first, we studied whether this step is sequential or concerted. For that, we investigated the nucleophilic attack of the alcohol and the proton transfer from alcohol to the histidine by QM/MM. Classical molecular dynamics was also used to sample the interactions of the substrate with its environment – the solvent and the protein. The results of this work are the potential energy surfaces of the formation of the second tetrahedral intermediate and the quantification of its interactions with its surroundings.

Hledání efektivních výpočetních cest pro predikci polymorfismu molekulárních krystalů

Veronika Kostková (B3)

Školitel: Ing. Ctirad Červinka, Ph. D.

Polymorfismus organických sloučenin je častým jevem a jednotlivé polymorfy dané látky se mnohdy zásadně liší svými fyzikálně-chemickými vlastnostmi, na kterých závisí možné využití těchto polymorfů v nejrůznějších oborech. Zároveň bývá velmi pracné experimentálně nalézt jak všechny polymorfy, které sloučenina může tvořit, tak jejich termodynamické vlastnosti a stabilitu (určenou Gibbsovou energií). Proto je snaha najít dostatečně přesné a zároveň efektivní výpočetní cesty pro predikci polymorfismu a souvisejících termodynamických vlastností. V této práci byly metodou založenou na teorii funkcionálu hustoty (DFT) optimalizované geometrie tří polymorfů modelové sloučeniny, sulfathiazolu. Stejně výpočty byly pro srovnání provedeny také semiempirickou metodou DFTB3. Těmito teoretickými postupy byla vypočtena závislost elektronové energie na objemu a pomocí kvazi-harmonické aproximace byly modelovány vibrační stupně volnosti krystalů. Na základě těchto mikroskopických charakteristik krystalů jsou predikovány jejich makroskopické vlastnosti jako např. rovnovážný objem, tepelná kapacita či Gibbsova energie jako funkce teploty a tlaku. Z porovnání Gibbsových energií je predikována relativní stabilita tří polymorfů sulfathiazolu za různých podmínek.

Curvy vs flat, which model is better?

Patrik Kula (B2)

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

Density profiles of liquid-vapor interfaces far from their critical points are readily measured by X-ray scattering experiments. The results are commonly interpreted in the context of capillary wave theory (CWT). CWT describes the interface in terms of thermally activated capillary waves which corrugate an otherwise sharp surface. However, as one approaches the critical point of the liquid-vapor coexistence, the characteristic width of the interface increases along with a decrease in the surface tension until it goes to zero. This behavior suggests the breakdown of CWT close to the critical point. Here, we investigate the behavior of liquid-vapor interfaces close to their critical points, and the validity of CWT at high temperatures. To test the physical quality of the interface, we compare density profiles obtained from MD simulations of argon close its critical point to two reference systems. The first model is the CWT predicted sharp surfaces, while the second one assumes an essentially flat region that continuously transitions between the liquid and vapor densities. According to our results, the surfaces $1-T/T_c = 0.013$ can still well be represented by a sharp, undulating surface, beyond which the distinction between the models becomes increasingly meaningless.

Conformational states of the uL22 protein

Petr Linhart (B3)

Školitel: RNDr. Michal Kolář, Ph.D.

Ribosomes are essential organelles for every living organism. Their significance lies in their ability to perform translation, a process where information encoded in mRNA is transformed into proteins, the most versatile biomolecules found in organisms. They consist of ribosomal RNA (rRNA) and ribosomal proteins. One of these proteins, uL22, is the subject of our research. It consists of 4 main parts: 3 alpha helices incorporated in the rRNA and one beta sheet, which reaches into a narrow space through which nascent proteins leave the organelle – the exit tunnel. It has been determined that the protruding parts are essential for formation and functionality of ribosomes and that they are evolutionarily very old. Our aim was to assess the isolated protruding part's propensity for secondary structures. To this aim, we have performed unbiased MD simulations and also Hamiltonian Replica Exchange simulations, both in 3 different force fields. The obtained propensity qualitatively agrees with estimates obtained from NMR chemical shifts. We have determined that the protruding protein sequence, when isolated and dissolved in water, has only a little secondary structure preference. Its beta sheet conformation, observed in the ribosome, is probably induced by interactions with the organelle.

Simulating photoemission in polar liquids: The case of nimorazole

Martin Procházka (B3)

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

This work explores the possibilities and limitations of various computational techniques to simulate photoemission spectra. Nimorazole (nitroimidazolic compound) was chosen as a testing system since it plays an important role in radiotherapy as a radiosensitizer. Moreover, new experimental data are available for this molecule in a cooperating laboratory. Here, we provide the performance of several approaches of simulating valence and core ionizations of nimorazole in both the gas and the liquid phase. We involve the commonly used methods of modeling ionizations such as the time-dependent density functional theory, but also the less conventional approaches like the maximum overlap method and the ionization as an excitation to a distant center with optimally tuned range separated functionals. Furthermore, we investigate different models of solvation such as the polarizable continuum model with variant cavity radii specifications. We also examined the cluster-continuum model of solvation, particularly the effect on solvating different parts of the molecule. Our results show the comparison of tested techniques and provide the guide to efficiently simulate the whole photoemission spectrum of molecules in both the gas and the liquid phase.

Theoretical study of neopentanol hydration

Gabriela Želonková (B3)

Školitel: RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.

Water is the primary solvent of most biological processes and as such it permanently receives widespread research attention. In a recent systematic study of the volumetric properties of hydroxy- substituted neopentanes in water ($\text{C}(\text{CH}_3)_{4-n}(\text{CH}_2\text{OH})_n$), it was shown that introduction of polar hydroxy- groups has a significant impact on the temperature dependence of partial molar volumes at elevated temperatures and pressures. In order to interpret the experimental results on theoretical grounds, we have performed molecular dynamics simulations of hydroxy- substituted neopentanes in TIP4P-2005 water over a broad range of temperatures and pressures. Solutes partial molar volumes have been calculated from the water structure in the solute vicinity employing the Kirkwood–Buff theory and from system volumes via finite differences. Both approaches agree well with the experimental data. Furthermore, we have investigated the water structure in the proximity of methyl- and hydroxymethyl- groups. Namely, we have calculated directional radial distribution functions and tetrahedral order parameter of water in the solvation shell. Lastly, we have qualitatively compared solvation properties of the studied solutes by means of spatially resolved density distributions of water.

Fyzikální chemie II

MÍSTO: B37

KOMISE

doc. Ing. Karel Řehák, CSc. (předseda)

Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.

Ing. Pavel Morávek, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Bc. Laura Bábanová](#) (M1, prof. Ing. Karel Friess, Ph.D.)

Kompozitní materiály na bázi grafenoxidu pro membránové separace plynů

09:20 [Bc. Jana Floreková](#) (M1, prof. Ing. Karel Friess, Ph.D.)

Výroba nových typů PVDF membrán: charakterizácia, modifikácia a separácia plynů

09:40 [Bc. Phuong Hoang](#) (M1, Ing. Petr Kovaříček, Ph.D.)

Mikrolitografie vrstev perovskitu a grafenu na křemíkovém substrátu

10:00 [Jordan Janák](#) (B3, doc. Ing. Ondřej Vopička, Ph.D.)

Pervaporace směsí acetonitril – methanol membránami na bázi triacetátu celulózy

10:20 [Bc. Klára Obrusníková](#) (M1, Ing. Jiří Smilek, Ph.D. , Vysoké učení technické v Brně)

Studium relaxačních vlastností hydrogelových systémů s využitím reometru

10:40 [Vladimír Pouzar](#) (B3, Ing. Vojtěch Štejfa, Ph.D.)

Měření a korelace sublimačních tlaků trans-stilbenu a bifenyly

11:00 [Bc. Zuzana Součková](#) (M1, Dr. Ing. Pavel Vrbka)

Reinkarnace aparatury pro stanovení nízkých rozpustností metodou kapalinové chromatografie

Kompozitní materiály na bázi grafenoxidu pro membránové separace plynů

Bc. Laura Bábanová (M1)

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

Tato práce se zabývá měřením stability propustnosti a selektivity GO a SWCNT-GO membrán v průběhu měsíce a vlivu vlhkosti na permeační vlastnosti membrán. GO značí grafenoxid a SWCNT-GO je grafenoxidová kompozitní membrána s podpůrnou vrstvou připravenou z jednotěnných uhlíkových nanotubic. Propustnost membrán se měřila pomocí integrálního permeametry pro plyny H_2 , CO_2 a CH_4 a selektivita se vyhodnotila pro H_2/CO_2 , H_2/CH_4 a CH_4/CO_2 . Struktura membrán byla vyhodnocena prostřednictvím jednotlivých analytických metod. Pomocí skenovací elektronové mikroskopie (SEM) se zkoumala morfologie a odhalili se rozdíly ve struktuře GO a SWCNT-GO membrán. Topografie povrchů membrán byla snímána 3D profilometrem. Jednotlivé vibrační pásy a defekty membrán se vyhodnotili pomocí Ramanovy spektroskopie (RAMAN). Krystalografická struktura byla studována rentgenovou difrakční analýzou (XRD). Pomocí infračervené spektroskopie s Fourierovou transformací (FTIR-ATR) se charakterizovali jednotlivé funkční skupiny v membránách. Výsledky permeačních měření a výsledky analýz byly porovnány s hodnotami v literatuře.

Výroba nových typov PVDF membrán: charakterizácia, modifikácia a separácia plynov

Bc. Jana Floreková (M1)

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

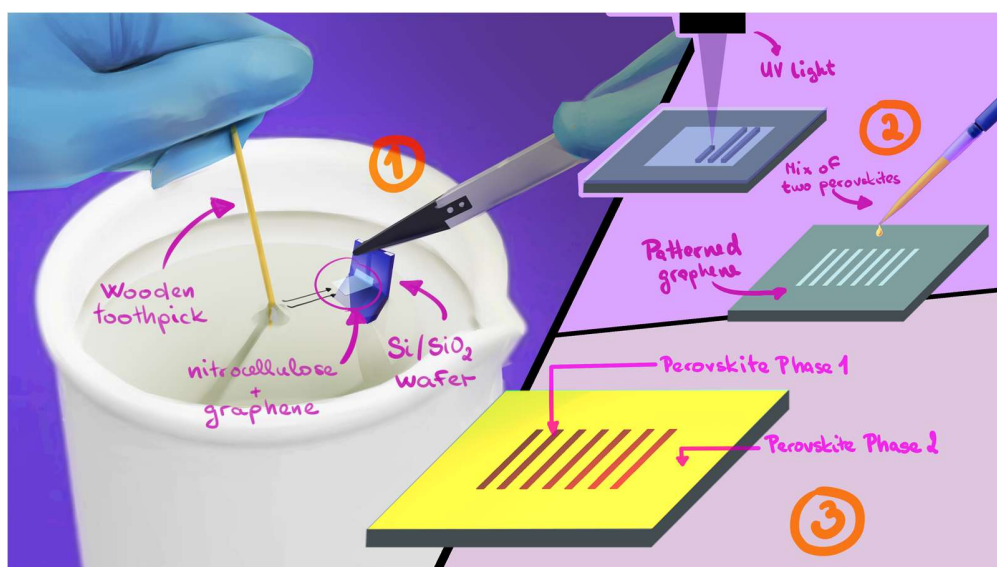
Táto práca sa zaoberá prípravou a štúdiom vlastností membrán pripravených z polyvinyliden fluoridu (PVDF) s cieľom zlepšiť ich permeačné a selektívne vlastnosti. Selektivnosť a priepustnosť polymérnych membrán boli študované prostredníctvom testovaných plynov: H₂, O₂, N₂, CO₂, CH₄ a ich permeácií. Kľúčový faktor pre zlepšenie selektivity týchto polymérnych membrán spočíva v cielenom riadení ich morfológie a modifikovaní povrchu. Membrány boli pripravené dvoma rôznymi technikami: (i) NIPS (Non-solvent induced phase separation) metódou a (ii) TIPS (Thermally induced phase separation) metódou. Povrch membrán bol modifikovaný nanosením tenkej vrstvy polyméru polydimethylsiloxanu (PDMS) pomocou metódy (i) spray-coating alebo (ii) spin-coating. Podľa permeačných výsledkov je zrejmé, že najlepšie hodnoty vykazovala membrána pripravená NIPS metódou s povrchovou vrstvou PDMS. Napríklad, selektivita oxidu uhličitého od dusíka bola pred modifikáciou 1,7 a po modifikácii vzrástla na hodnotu 35,6. Pokrok sa zaznamenal aj pri separácii dusíka od vodíka a kyslíka. Morfológia membrány a jej chemické zloženie boli skúmané analytickými metódami: ATR-FTIR, XRD, 3D profilometrom, SEM a SEM-EDS analýzami.

Mikrolitografie vrstev perovskitu a grafenu na křemíkovém substrátu

Bc. Phuong Hoang (M1)

Školitel: Ing. Petr Kovaříček, Ph.D.

This work aims to use graphene and hybrid lead halide perovskites, to take a step towards optical materials which consist of periodically changing refractive index in the volume - the volume Bragg filter. This study consists of interaction between Si/SiO₂ wafer surface partially covered by graphene and mixed perovskite. Perovskite mixture varied in the cation (Piperonylammonium, PipA⁺ and methylammonium, MA⁺) or anion (iodide and bromide) characterized by measurement of photoluminescence spectra. A periodically modulated surface was created on which perovskite mixtures were deposited. Initial studies found out that different perovskites do in fact grow on various surfaces. In the case of cation-varied perovskite mixtures, MA⁺ had its preferred surface to be SiO₂ while PipA⁺ outcompeted MA⁺ on graphene. In case of anion varied perovskite mixtures, a mixture deposited on graphene and SiO₂ resulted in MAPbBr_{3-x}I_x perovskite strongly shifted towards MAPbI₃ on both surfaces and small amount of MAPbBr₃ formed only on graphene. Studies on patterned graphene resulted in the same outcome. Thorough investigation of the pattern size influence on a stripe-patterned graphene found that phase-separation is observed at shorter distances while uniform mixed phase dominates at longer ones.



Pervaporace směsí acetonitril – methanol membránami na bázi triacetátu celulózy

Jordan Janák (B3)

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

Práce je zaměřena na problematiku separace směsí azeotrop tvořící dvojice látek methanol – acetonitril pomocí pervaporace přes polymerní membrány na bázi triacetátu celulózy. Tento polymer je hojně používán pro přípravu pervaporačních membrán zejména při dělení směsí látek hydrofilních a organofilních, cílem práce je prostudovat jeho vlastnosti pro uvedenou dvojici a možnosti modifikace polymeru energetickým zářením (UV 254 nm), které tento polymer absorbuje. Nejprve byla pro membránu z neozářeného CTA studována pervaporace čistých látek (acetonitril a methanol) při třech teplotách (35,0 , 45,0 °C a 52,9 °C), což umožnilo určení doby potřebné k dosažení ustáleného stavu a aktivační energie koeficientu propustnosti. Předmětem dalšího zkoumání bude vyhodnocení uvedených charakteristik pro ozářené CTA, určení jejich závislosti na době expozice, a porovnání koeficientů propustnosti zjištěných měřením s čistými látkami s koeficienty propustnosti určenými měřením pervaporace směsí, zejména směsí azeotropické.

Studium relaxačních vlastností hydrogelových systémů s využitím reometru

Bc. Klára Obrusníková (M1, Vysoké učení technické v Brně)

Školitel: Ing. Jiří Smilek, Ph.D.

Práce se zabývá studiem viskoelastických (konkrétně relaxačních) vlastností vybraného hydrogelového systému pomocí tříintervalových tixotropních testů. Zkoumaným hydrogelem byl kolagenový gel a jeho viskoelastické vlastnosti byly sledovány v závislosti na čase a na skladování při různých teplotních podmínkách. Kolagenový gel je tixotropní, deformací se jeho struktura naruší a po jejím odeznění se obnovuje (relaxuje), ale jen do určité míry. V závislosti na čase je kolagenový hydrogel velice stabilní, v průběhu dvou měsíců nedocházelo téměř k žádným změnám mechanických vlastností. Závislost na teplotě je naopak poměrně výrazná. Po vystavení teplotám pod bodem mrazu se struktura kolagenu stabilizuje, což se projevuje nárůstem komplexního modulu, při vyšších teplotách blízkých teplotě lidského těla se naopak rozkládá, což se naopak projevuje poklesem komplexního modulu. Podle předložených výsledků relaxuje kolagenový gel nejlépe při skladování při laboratorní teplotě, zároveň je ale při této teplotě nejméně elastický. Při teplotě skladování okolo $-5\text{ }^{\circ}\text{C}$ je naopak gel nejvíce elastický, zároveň ale relaxuje nejhůře. Optimální je pro daný gel, podle výsledků práce, uchovávání při teplotě okolo $5\text{ }^{\circ}\text{C}$.

Měření a korelace sublimačních tlaků *trans*-stilbenu a bifenyly

Vladimír Pouzar (B3)

Školitel: Ing. Vojtěch Štejfa, Ph.D.

Tato práce je zaměřena na určení tlaku nasycených par a jejich následné kritické srovnání s literárními daty. Studovanými látkami jsou dva aromatické uhlovodíky: Bifenyl a *trans*-stilben. Oba dva jsou mimo jiné prekurzory k mnoha organickým syntézám. Vzhledem k tomu, že existovalo mnoho na tehdejší dobu přesných měření, byly tyto látky v roce 1999 označeny jako kalorimetrické standardy pro sublimační entalpii. Mezi jednotlivými datovými sadami jsou ale při detailnějším zpracování znatelné rozpory, a proto je nutné tato data kriticky zhodnotit a vybrat, která jsou dostatečně důvěryhodná. U bifenyly (na rozdíl od *trans*-stilbenu) jsou navíc k dispozici velice přesná měření pro tlaky par v kapalině, jejichž konzistenci s popisem pevné fáze je třeba zajistit. Měření tlaků par proběhlo na nekomerční statické aparatuře určené k měření tlaků par. Dále jsem změřil tepelnou kapacitu pevné a kapalné fáze bifenyly na kalorimetru typu Tian-Calvet. Všechna experimentální a vybraná literární data byla zpracována metodou simultánní korelace tlaků nasycených par a souvisejících vlastností. Toto zpracování zajistí konzistenci mezi tlaky par pro pevnou a kapalnou fázi, entalpií tání a rozdílem v tepelných kapacitách mezi kondenzovanou a plynnou fází.

Reinkarnace aparatury pro stanovení nízkých rozpustností metodou kapalinové chromatografie

Bc. Zuzana Součková (M1)

Školitel: Dr. Ing. Pavel Vrbka

V rámci práce byla po 20 letech nečinnosti uváděna do provozu aparatura ke stanovení rozpustností velmi málo rozpustných látek ve vodě metodou kapalinové chromatografie. Metoda využívá systému propojených kolon IN²LINE generující pravý roztok rozpuštěné látky. Postupně byly zprovozněny všechny základní části aparatury a nefuknčí prvky byly obměněny. Dalším krokem je ověření funkce aparatury opakováním stanovení pro jednu vybranou látku.

Fyzikální chemie III

MÍSTO: A125

KOMISE

prof. Ing. Květoslav Růžička, CSc. (předseda)

Ing. Marcela Tkadlecová, CSc.

Dr. Ing. Pavel Vrbka

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Bc. Vendula Janoušková](#) (M1, doc. Ing. Filip Mravec, Ph.D., Vysoké učení technické v Brně)

Inkorporace malých organických hydrofilních látek do vezikulárních systémů

09:20 [Bc. Matěj Kmetík](#) (M1, Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.)

Nanoskopická studie vrstev polydopaminů na titanovém povrchu

09:40 [Bc. Ivan Kopal](#) (M2, Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.)

Studium dílčích mechanismů fenoménu povrchem zesíleného Ramanova rozptylu

10:00 [Bc. Denisa Lacinová](#) (M1, Ing. Daniel Ondo, Ph.D.)

Vliv elektrolytů na separaci ethylenglykolů z vodných roztoků

10:20 [Bc. Anežka Losová](#) (M1, Ing. Michal Kalina, Ph.D., Vysoké učení technické v Brně)

Vliv biouhlu na mikrobiální pochody v půdě

10:40 [Bc. Vendula Palatová](#) (M1, Ing. Pavel Morávek, Ph.D.)

Ovlivnění rovnováhy N-isopropylakrylamid – voda přídatkem NaCl

11:00 [Bc. Nikola Polášková](#) (M1, Ing. Jiří Smilek, Ph.D., Vysoké učení technické v Brně)

Vliv biouhlu na fyzikálně-chemické charakteristiky půdy

vyhlášení výsledků

Inkorporace malých organických hydrofilních látek do vezikulárních systémů

Bc. Vendula Janoušková (M1, Vysoké učení technické v Brně)

Školitel: doc. Ing. Filip Mravec, Ph.D.

V současné době se v medicíně stále více upřednostňuje použití lipozomální formy léčiv z důvodu ochrany zdravých lidských tkání před toxicitou volného léčiva, prodloužené doby cirkulace v krvi a cíleného či řízeného uvolňování léčiva. Do popředí se dostává i inhalační podávání léčiv, jehož hlavním pozitivem je vyhnutí se „first-pass“ efektu po průchodu játry. Tato vědecká práce se zabývá studiem enkapsulační účinnosti hydrofilní látky a jejím uvolňováním z vodného středu lipozomů v závislosti na odlišném složení komponent jednotlivých lipozomálních systémů. Základní komponentu lipozomálního systému tvořil fosfatidylcholin, přesněji DPPC, který je nejhojněji zastoupeným fosfolipidem vyskytujícím se v surfaktantu plicních alveol. K této základní komponentě byly jednotlivě nebo kombinovaně přidány přísady cholesterolu, kyseliny fosfatidové, polyethylenglykolu a nakonec trimethylchitosanu. Jako modelové léčivo vhodné pro enkapsulaci byla zvolena hydrofilní fluorescenční sonda zvaná 8-hydroxypyren-1,3,6-trisulfonová kyselina (HPTS). Z hlediska všech fyzikálně-chemických se nám podařilo připravit lipozomální systémy s enkapsulovaným modelovým léčivem, které by byly vhodné pro inhalační podávání. Dále se nám podařilo potvrdit nízkou enkapsulační účinnost hydrofilních látek.

Nanoskopická studie vrstev polydopaminů na titanovém povrchu

Bc. Matěj Kmetík (M1)

Školitel: Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.

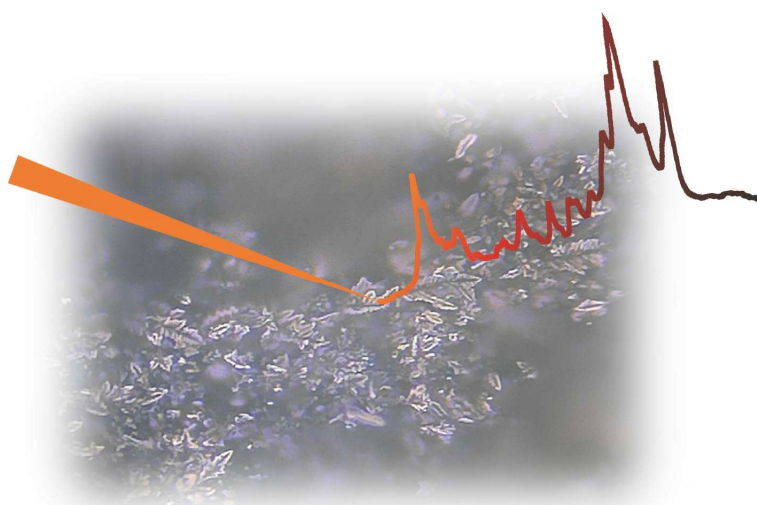
Polydopamin je polymer hojně využívaný pro přípravu adhezních vrstev např. v tkáňovém inženýrství, biomedicině nebo v tribologii, a to především díky jednoduchosti a všestrannosti jeho použití. Způsob, jakým dochází k vazbě polymeru na substrát, však stále není dostatečně popsán. Na úrovni nanometrů není známo přesné prostorové uspořádání jednotlivých molekul ani vliv podložního materiálu na růst vrstev polydopaminu. V rámci této práce byly vrstvy polydopaminu analyzovány technikou skenovací infračervené mikroskopie blízkého pole, jež umožňuje studium morfologie, fyzikálních a chemických vlastností povrchu materiálu s nanorozlišením. Jako podložní materiál pro přípravu adhezních vrstev byly použity křemíkové destičky s vrstvou oxidu titaničitého dopovaného dusíkem. Na tyto destičky byl poté deponován dopamin s různou dobu polymerace, a to 2,5; 5; 10; 30 a 60 minut. Plošné skeny byly zaznamenávány při vlnočtech 1100, 1510, 1600 a 1740 cm^{-1} , které byly zvoleny podle absorpčních pásů polydopaminu a meziproductů jeho polymerizace. Na jednotlivých skenech bylo možné pozorovat agregáty obsahující meziproducty a produkty v různých fázích reakce. Na základě získaných dat tak lze popsat vliv délky polymerizace na depozici a růst vrstvy/nanoagregátů polydopaminu.

Studium dílčích mechanismů fenoménu povrchem zesíleného Ramanova rozptylu

Bc. Ivan Kopal (M2)

Školitel: Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.

Jev povrchem zesíleného Ramanova rozptylu je již od časů svého prvního pozorování neodmyslitelně spojen s atypickým chováním, které do značné míry pramení z podstaty fyzikálního původu této spektroskopické techniky. Již samotný mechanismus nárůstu intenzity Ramanova signálu je pro svoji komplexnost i po téměř padesáti letech od svého objevu ne zcela jednoznačně rozklíčován. Na celkovém zesílení pozorovaného signálu molekul adsorbovaných na kovové substráty se podílí hned několik dílčích mechanismů, z nichž nejdůležitější role je standardně přisuzována elektromagnetickému mechanismu, který souvisí například s vlastnostmi materiálu a morfologií kovových nosičů. Naproti tomu, chemickému mechanismu bývá připisována pouze minoritní funkce, ačkoliv ve specifických případech může být jeho příspěvek značný, a to například v případech molekul způsobující rezonanční efekt. Cílem této práce je prozkoumat proměnlivost zaznamenávaných zesílených spekter methylenové modři deponované na povrch kompozitních Au/Cu struktur, a definovat jednotlivé příspěvky zesílení. Bylo zjištěno, že charakter zaznamenávaných zesílených spekter je značně závislý na rezonančních frekvencích povrchových plasmonů a absorpčních pásech studované molekuly, neméně pak na hodnotě vlnové délky excitačního záření.



Vliv elektrolytů na separaci ethylenglykolů z vodných roztoků

Bc. Denisa Lacinová (M1)

Školitel: Ing. Daniel Ondo, Ph.D.

V rámci této práce jsou prezentovány výsledky experimentálního měření vlivu elektrolytů NaCl, Na₂SO₄, NaSCN, GndSCN, Gnd₂SO₄ a GndCl na separaci ethylenglykolů z vodných roztoků. Měřeny byly dva extrémní případy. Polyethylenglykol o molární hmotnosti 100 000 g/mol a jeho monomer 1,2-dimethoxyethan. Těkavost 1,2-dimethoxyethanu z vodného roztoku byla měřena metodou headspace plynové chromatografie a výsledky byly analyzovány pomocí Sečenovovy rovnice. Zákalovou metodou na bodotávku byly následně měřeny vodné roztoky polyethylenglykolu. Změna dolní kritické rozpouštěcí teploty byla vyhodnocena solvatačním modelem.

Vliv biouhlu na mikrobiální pochody v půdě

Bc. Anežka Losová (M1, Vysoké učení technické v Brně)

Školitel: Ing. Michal Kalina, Ph.D.

Půda je důležité útočiště nejen pro rostliny, ale také pro mikroorganismy. Mikrobiální pochody ovlivňují vlastnosti a kvalitu půdy, proto je důležité zaměřit se na jejich chování. Tato práce slouží k posouzení vlivu biouhlu na rychlost mineralizace půdní organické hmoty tím, že sleduje uvolňování oxidu uhličitého v půdě bez přítomnosti biouhlu a po následné aplikaci biouhlu a hnojiva NPK. Oxid uhličitý se během inkubace sorbuje do hydroxidu sodného a následně se stanovuje titračně. V další části práce se experimenty zaměřují na posouzení vlivu zvýšené teploty a vlhkosti půdy na množství uvolněného CO₂. Z experimentálních dat vyplývá, že biouhel podporuje mikrobiální aktivitu a přidáním hnojiva NPK k definovanému množství biouhlu se účinnost zesílí. Zvýšená teplota působí převážně negativně na mikrobiální pochody v půdě, jelikož dochází k poklesu rychlosti půdní respirace oxidu uhličitého. Rovněž nadměrná vlhkost půdy má negativní vliv na mikrobiální aktivitu, což se projevilo zpomalením rychlosti půdní respirace. Biouhel má však v definovaném množství za příznivých podmínek pozitivní vliv na mikrobiální aktivitu a je vhodným půdním kondicionérem využitelným v zemědělství.

Ovlivnění rovnováhy N-isopropylakrylamid – voda přídavkem NaCl

Bc. Vendula Palatová (M1)

Školitel: Ing. Pavel Morávek, Ph.D.

Tato práce se zaměřuje na experimentální stanovení fázových rovnováh v systémech obsahujících N-isopropylakrylamid (NIPAM). V literatuře jsou dostupná data popisující binární systém NIPAM – voda, data popisující interakce s jinými látkami dosud nebyla publikována. Cílem práce je rozšířit znalosti o popis vlivu přídavku další látky na rovnováhu N-isopropylakrylamid – voda. Konkrétně se práce zabývá stanovením fázové rovnováhy kapalina – kapalina v ternárním systému NIPAM – NaCl – voda při teplotě 25 °C.

Vliv biouhlu na fyzikálně-chemické charakteristiky půdy

Bc. Nikola Polášková (M1, Vysoké učení technické v Brně)

Školitel: Ing. Jiří Smilek, Ph.D.

Práce je zaměřena na posouzení vlivu biouhlu na vybrané fyzikálně-chemické charakteristiky půdy (měrná hmotnost, objemová hmotnost redukováná, pórovitost, retenční vodní a maximální vodní kapacita, obsah oxidovatelného uhlíku, obsah celkového dusíku, obsah fosforu, draslíku a hořčíku). Mezi zkoumané půdní typy byly vybrány následující: kambizem modální, fluvizem/černice glejová, černozem arenická a regozem písčité. K analýze byly použity dva typy biouhlu – NovoTerra a Sonnenerde. Vzorky byly vysušeny do konstantní hmotnosti a následně upraveny na jemnozem I, resp. jemnozem II. Obsah oxidovatelného uhlíku byl stanoven oxidací chromsírovou směsí (Walkley-Blackova metoda), obsah celkového dusíku kjeldahlizací a obsah prvků P, K a Mg pomocí extrakce dle Mehlich 3 a následnou analýzou na ICP-OES spektrometru. Pro doplnění byla využita elementární analýza a termogravimetrie ke stanovení obsahu dalších prvků. Výsledky ukazují, že biouhel má vliv na vlastnosti půdy. Závisí však na použitém biouhlu a typu půdy, do které biouhel aplikujeme. Práce může sloužit k objasnění komplexní problematiky, co se týče půd v ČR, k porozumění mechanismu působení, nebo také zemědělcům, kteří uvažují o použití biouhlu jako půdního aditiva se záměrem zvýšit produktivitu a úrodnost půdy.

Fyzikální chemie IV

MÍSTO: B32 (POBLÍŽ ÚSTAVU JAZYKŮ)

KOMISE

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

RNDr. Michal Kolář, Ph.D.

Ing. Daniel Ondo, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Bc. Dominik Bubák](#) (M2, RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.)

Interactions in aqueous urea-betaine solutions: Completed experimental and computational study

09:20 [Bc. Tereza Dolečková](#) (M1, RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.)

Ion-specific group contributions to salting-out of methyl tert-butyl ether

09:40 [Bc. Lucie Draslarová](#) (M1, Ing. Ctirad Červinka, Ph. D.)

Theoretical predictions of sublimation and conformation analysis for selected vitamins

10:00 [Bc. Lucie Fardová](#) (M1, doc. Ing. Filip Mravec, Ph.D., Vysoké učení technické v Brně)

Interakce záporně nabitých vezikulárních systémů na bázi iontových amfifilních párů s polykationty

10:20 [Bc. Natálie Štorková](#) (M1, Ing. Michal Kalina, Ph.D., Vysoké učení technické v Brně)

Optimalizace metod pro posouzení vlivu biouhlu na růst modelových rostlin

10:40 [Bc. Petr Touš](#) (M2, Ing. Ctirad Červinka, Ph. D.)

Sublimation, strain energies and rotational disorder of caged hydrocarbons studied using first principles

vyhlášení výsledků

Interactions in aqueous urea-betaine solutions: Completed experimental and computational study

Bc. Dominik Bubák (M2)

Školitel: RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.

Osmolytes, well-soluble small organic molecules, are used by living organisms to control the solubility and structure of biomolecules in complex cell environments. Two groups of osmolytes are available, denaturing agents, such as urea, or short alcohols, and protecting agents, e.g., TMAO (*N,N,N*-trimethylamine *N*-oxide), betaine, etc. While TMAO compensates for the enormous hydrostatic pressure in deep-sea fish, betaine zwitterion is responsible for similar action in plants. Interestingly, TMAO also counteracts the denaturing ability of urea. Yet, joint experimental and theoretical research revealed the mechanism only recently. The mechanism of betaine counteraction is still unknown. In this work, we completed the whole experimental data set by performing vapor pressure osmometry and density measurements to gather a complete thermodynamic description of urea-betaine aqueous mixtures up to 3 mol kg⁻¹ concentrations. Employing the apparatus of Kirkwood-Buff inversion we have quantified the true pair interactions in the mixed solution, so-called Kirkwood-Buff integrals. These were used by our collaborators in urea-betaine force-field calibration. Our collaborative work opens the path towards the microscopic investigation of how betaine counteracts urea denaturation of proteins.

Ion-specific group contributions to salting-out of methyl tert-butyl ether

Bc. Tereza Dolečková (M1)

Školitel: RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.

Solubility is a basic physico-chemical property which is decisive for abundance and distribution of the solute in the aqueous environment. In natural and industrial systems, the solubility is modulated by the addition of salts or osmolytes. The responsible salt-solute interactions are often labeled salt-specific and related to the well-known Hofmeister series. Recent progress in all-atom computer simulations allowed to apply exact statistical thermodynamic theory of solutions and develop a link between microscopic solution structure and macroscopic salt-specific effects. This work is concerned with the changes in solubility of technologically relevant gasoline additive – methyl *tert*-butyl-ether – in series of aqueous solutions of various potassium salts. Employing apparatus of molecular dynamics simulations, we quantify ion-specific preferential binding to polar and nonpolar domains of the solute and compare determined Setschenow constants to those reported by our experimental collaborators previously.

Theoretical predictions of sublimation and conformation analysis for selected vitamins

Bc. Lucie Draslarová (M1)

Školitel: Ing. Ctirad Červinka, Ph. D.

Vitamins play a key role in various biochemical processes, the mechanism of which may be governed by thermodynamics. Theoretical predictions of the thermodynamic properties of vitamins then can serve as a valuable source of data for modeling of such processes. Aim of this work are predictions of cohesive properties of the ideal-crystalline form of selected essential vitamins, and optionally also the conformational analysis of such molecules. For the calculations, PBE-D3/PAW level of theory along with the quasiharmonic approximation are used. Particular vitamins are selected according to the availability of the experimental data on crystal structures, and reasonable unit-cell size. Namely, vitamins B6 (pyridoxine), B10 (para-aminobenzoic acid), and C (ascorbic acid) are included. For vitamins B6 and C, the only well-described anhydrate and enantiopure structures are used. For vitamin B10, beta and delta polymorphs are studied. For all considered vitamins, conformation analysis, the structure of the optimised unit cell and its energy, and phonons are calculated, leading together to the thermodynamic properties, such as entropy, enthalpy, and heat capacity as functions of both temperature and pressure.

Interakce záporně nabitých vezikulárních systémů na bázi iontových amfifilních párů s polykationty

Bc. Lucie Fardová (M1, Vysoké učení technické v Brně)

Školitel: doc. Ing. Filip Mravec, Ph.D.

Nosičové systémy se dostávají do popředí nanotechnologií díky cílení léčiva do požadované oblasti a možnosti delší doby uvolňování. Vezikuly z iontového amfifilního páru, které mohou být vytvořeny z nejrozličnějších povrchově aktivních látek, jsou levnější alternativou k liposomům. Cílem práce byla příprava a studium záporně nabitých katanionických vezikulárních systémů s polykationtem. Katanionické vezikulární systémy byly připraveny z levných a dostupných povrchově aktivních látek, kterými jsou cetyltrimethylamonium bromid (CTAB) a dodecylsírán sodný (SDS). Na stabilizaci systémů byl použit cholesterol (ovlivňuje fluiditu) a kyselina fosfatidová (PA), která umožňuje elektrostatickou stabilizaci a navázání modelového polykationtu hydrochloridu diethylaminoethyl-dextranu (DEAE-Dx·HCl). V bakalářské práci se nám podařilo připravit stabilní záporně nabité vezikulární systémy s navázaným polykationtem, zároveň byly získány cenné informace o připravených systémech, které mohou být v dalším výzkumu využity. Mezi hlavní poznatky patří zjištění, že systémy bez kyseliny fosfatidové jsou velmi nestabilní, na hodnotu generalizované polarizace má vliv přídavek cholesterolu, kyseliny fosfatidové i DEAE-Dx·HCl, zatímco anizotropie je ovlivněna pouze přídavkem cholesterolu a kyseliny fosfatidové.

Optimalizace metod pro posouzení vlivu biouhlu na růst modelových rostlin

Bc. Natálie Štorková (M1, Vysoké učení technické v Brně)

Školitel: Ing. Michal Kalina, Ph.D.

Půda je důležitým zdrojem mnoha živin, sídlem mikroorganismů a hraje velkou roli při zemědělské produkci. V důsledku stále rostoucí populace a používání nadměrného množství chemických hnojiv však dochází k velkému úbytku zemědělských ploch a snižování jejich kvality. Půdy mají tedy nedostatek živin a jsou kontaminovány. Použití biouhlu a dalších pomocných půdních látek se jeví jako slibný způsob vylepšení kvality půdy a zvýšení produktivity rostlin. Tato práce studuje vliv biouhlu na růst modelové rostliny (kukuřice setá–*Zea mays*) ve čtyřech odlišných půdách. Použité vzorky biouhlů mají evropský certifikát od EBC (European Biochar Certificate) pro využití v zemědělství. V rámci experimentu byl biouhel do půdy aplikován v dávkách 0, 10 a 20 g na 1 kg půdy. Kultivace probíhala v pěstební boxu s řízeným osvětlením a závlahou. Pro vyhodnocení vlivu biouhlu na kvantitativní a kvalitativní vlastnosti modelových rostlin bylo využito vážení suché hmotnosti, průběžného měření výšky rostlin a také obrazové analýzy kořenového systému. Ze získaných dat je zřejmé, že rozdíly v růstu byly ovlivněny jak aplikační dávkou biouhlu, tak i druhem půdy ve které kultivační experiment probíhal.

Sublimation, strain energies and rotational disorder of caged hydrocarbons studied using first principles

Bc. Petr Touš (M2)

Školitel: Ing. Ctirad Červinka, Ph. D.

Caged hydrocarbons are a group of compounds whose three-dimensional carbon skeleton is often highly compact and polycyclic, the typical representatives of which are e.g. cubane, adamantane, diamantane, etc. In this work, a first-principles computational scheme, developed in my earlier work for the sublimation properties of cubane, is applied to a group of eleven caged molecules. Despite the curious molecular shapes, some potential applications have been devised for certain caged hydrocarbons, such as energy storage media and precursors of pharmaceuticals or explosives. Most of these uses exploit their frequent unique property – high molecular strain. The nature of their carbon skeleton usually results in a fair molecular rigidity, and possibly unusual bond lengths or angles. This manifests itself in high values of the so-called strain energy, which is also a subject of study in this work. This energy is computed using two approaches: non-strained increments and error-cancelling homodesmotic reactions. Furthermore, caged hydrocarbon molecules exhibit high symmetry, theoretically allowing their molecules to exhibit rotational disorder in the crystalline state in certain cases. This phenomenon is also studied and discussed in this work by means of DFT/PAW-PBE-based calculations.

Fyzikální chemie V

MÍSTO: A402

KOMISE

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

Ing. Ctirad Červinka, Ph.D.

RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Bc. Josef Filgas](#) (M2, prof. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.)

Taje strukturní závislosti spinově-orbitální vazby u derivátů BODIPY

09:20 [Bc. Jiří Janoš](#) (M2, prof. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.)

Disentangling photodynamics with statistical analysis: The case of cyclopropanone

09:40 [Bc. Lukáš Jiříšče](#) (M1, Ing. Martin Klajmon, Ph.D.)

Aplikace stavových rovnic typu PC-SAFT na termodynamické vlastnosti iontových kapalin

10:00 [Bc. Tomáš Ovad](#) (M1, prof. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.)

Electronic excited states and fragmentation channels of C_4F_7N

10:20 [Bc. Jan Polena](#) (M2, prof. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.)

Deriváty azobenzenu jako molekuly vhodné pro studium reaktivity elektronů

10:40 [Bc. Lucie Tučková](#) (M1, prof. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.)

Endohedrální fullereny jako molekulární součástky

vyhlášení výsledků

Taje strukturní závislosti spinově-orbitální vazby u derivátů BODIPY

Bc. Josef Filgas (M2)

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

Deriváty BODIPY jsou usilovně studovanými kandidáty pro použití jako fotosenzitivní látky ve fotodynamické terapii – metodě velmi slibné v léčbě tumorových onemocnění. Klíčovým procesem této techniky je mezisystémové křížení u použité látky. V této práci studuji (v součinnosti s experimenty dr. Slaniny) 9 strukturně podobných derivátů BODIPY, z nichž 7 je různým způsobem jodovaných. Mým cílem je vysvětlit, proč jodace na centrální části struktury těchto derivátů vede ke zvýšení intenzity mezisystémového křížení, přičemž jodace periferních částí nikoli. Potvrdil jsem, že pro popis excitovaných stavů studovaných molekul je potřeba použít multireferenční metody s dynamickou korelací. Excitace při studovaném procesu probíhá do S_1 stavu, přičemž následné mezisystémové křížení nastává jako přechod do T_2 stavu. Důležitou roli zde hraje strukturní závislost velikosti spinově-orbitální vazby, jelikož potřebný efekt nastává až v místě mezisystémového křížení. Důvodem pro pozorovanou závislost na pozici jodace v molekule je, že buďto periferní atomy jodu nepřispívají k zúčastněným molekulovým orbitalům vůbec, či přispívají způsobem, který zanechá maticové elementy operátoru spinově-orbitální vazby nulové, v důsledku čehož periferní atomy jodu neovlivní intenzitu mezisystémového křížení.

Disentangling photodynamics with statistical analysis: The case of cyclopropanone

Bc. Jiří Janoš (M2)

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

Photodynamics play a crucial role in many natural processes. In last decade, direct non-adiabatic simulations became an indispensable tool of photodynamics. One of the continuous challenges in the field is a proper description of the underlying potential energy surfaces that govern the evolution of the molecule. Another challenge is an effective and trustworthy analysis of simulations that can describe even rare events in a large statistical sample. To address these challenges, I have chosen a molecule of cyclopropanone as a test case. In my work, I explore multiple electronic structure theories and show that although the community is still seeking better algorithms for non-adiabatic transitions, the electronic structure is what really governs the quality of our results. To improve and simplify the analysis of simulations, I developed and applied a code using multidimensional scaling (MDS) which projects high-dimensional molecules to a low-dimensional space that is more suitable for analysis. The use of MDS has proved its value in comparing results of different simulations and also in discovering rare events. As a practical outcome of this study, a rarely formed biradical product, which was omitted in previous studies, was discovered.

Aplikace stavových rovnic typu PC-SAFT na termodynamické vlastnosti iontových kapalin

Bc. Lukáš Jiříšně (M1)

Školitel: Ing. Martin Klajmon, Ph.D.

Iontové kapaliny jsou velice specifické látky. Existuje jich nepřeberné množství, z čehož plyne, že je vysoká šance existence takové látky, která má vhodné vlastnosti pro konkrétní využití. Dalším důsledkem je, že hledat tyto výjimečné látky je náročné. Řešení pravděpodobně spočívá v nasazení výpočetních technologií prostřednictvím např. stavových rovnic, které umožňují odhad široké škály vlastností z menšího počtu vstupních dat. V této práci srovnávám několik přístupů k výpočtu termodynamických veličin iontových kapalin v rámci rodiny stavových rovnic PC-SAFT. Ta byla úspěšně aplikovaná na vlastnosti široké řady látek, a její aplikace na tuto oblast se tedy zdá být nadějná. Veličinami zájmu jsou hustoty, tlaky sytých par, výparné entalpie, tepelné kapacity čistých iontových kapalin a rozpustnosti CO₂ v těchto látkách. Parametry modelu jsou získány fitem na hustoty a případně jiné vlastnosti. Z výsledků plyne, že stavové rovnice tohoto typu zatím nejsou dostatečně sofistikované, aby dokázaly spolehlivě predikovat chování takto nevšedních kapalin.

Electronic excited states and fragmentation channels of C₄F₇N

Bc. Tomáš Ovad (M1)

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

SF₆ has been extensively employed as an insulation medium in high-voltage circuit breakers, thanks to its high dielectric strength and low boiling point, as well as low reactivity and toxicity. However, it has been listed as the most potent greenhouse gas, with 22,500 times higher global warming potential than CO₂. As the power industry accounts for 80% of SF₆ consumption, there is a continuing effort to seek alternative dielectric media. Perfluoroisobutyronitrile (C₄F₇N) is one of the most promising candidates for this purpose, as its dielectric strength is even twice higher than that of SF₆, while its GWP is nearly eleven times lower. Although ionic electron-induced fragmentation channels of C₄F₇N have already been reported in literature, little knowledge of the neutral channels is available. In this study, *ab initio* approaches are applied to study the neutral products of electron-impact decomposition of C₄F₇N leading to neutral products. First, position of both singlet and triplet electronic excited states below the ionization threshold was established. Transitions to these states were then identified in electron energy-loss spectra, measured by a collaborating laboratory. Finally, the time evolution of the excited states was studied using the nonadiabatic molecular dynamics.

Deriváty azobenzenu jako molekuly vhodné pro studium reaktivity elektronů

Bc. Jan Polena (M2)

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

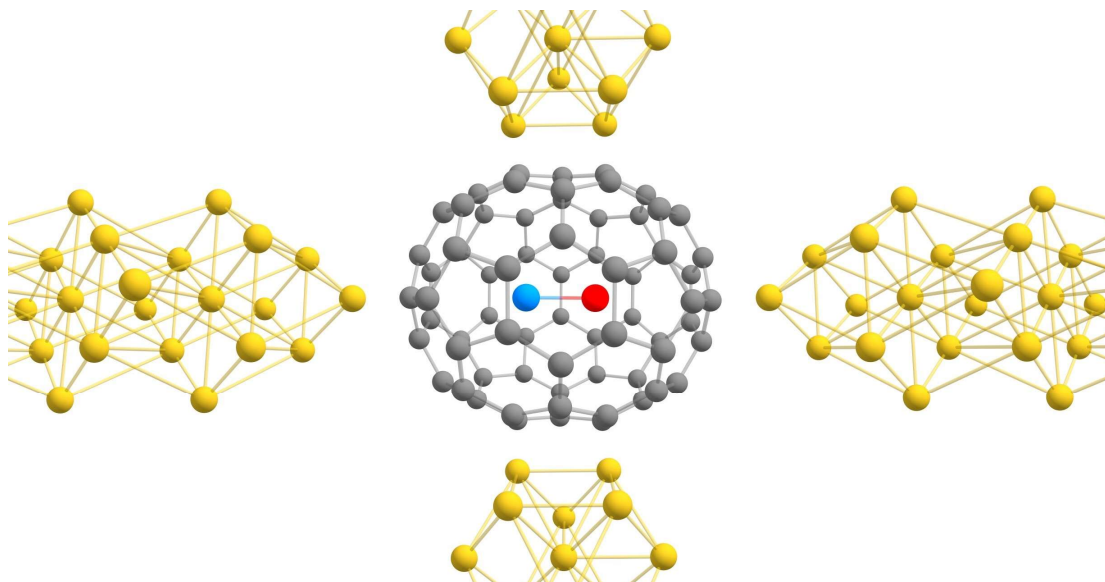
Azobenzen a jeho deriváty jsou známé fotosensitivní molekuly, které při interakci se zářením podléhají izomerizační reakci. Konečným cílem této práce je studium izomerace substituovaných azobenzenů po excitaci elektronovým paprskem. Na rozdíl od fotochemické aktivace takto můžeme přímo excitovat molekulu do opticky zakázaného tripletního stavu. Předmětem práce je teoretická studie vybraných derivátů azobenzenu a jejich transformací v základním i v excitovaných stavech. Důraz je kladen zejména na azobenzeny substituované ethylesterovou skupinou, hydroxy skupinami a chlorem, které byly připraveny v naší laboratoři. Klíčovou roli pro experimentální studium reaktivity elektronů hraje stabilita molekul. Deriváty by neměly izomerovat příliš rychle, a ukázalo se, že nejmenší rychlostní konstanty z vybraných molekul má azobenzen substituovaný chlorem a methyletherem, který by byl dále využit k experimentálnímu testování elektronem vybuze reaktivity. Modelování izomeračních reakcí, výpočet rychlostních konstant a popis excitovaných stavů se opírá o teorii funkcionálu hustoty s funkcionálem B3LYP a báзовými funkcemi 6-31G*. Pro studium průběhu relaxace molekul po excitaci a výpočet kvantových výtěžků bylo dále využito neadiabatických simulací s technikou *Landau-Zener surface hopping*.

Endohedrání fullereny jako molekulární součástky

Bc. Lucie Tučková (M1)

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

We present new molecular components based on endohedral fullerene systems ($\text{MX}@\text{C}_{70}$). Encapsulated molecules with general formula MX (M = metal, hydrogen; X = halogen, chalcogen) were studied. We show that relative orientation of molecules enclosed in C_{70} cage can be controlled by oriented external electric field(s). We suggest a four-terminal system of electrodes, in which two source-drain electrodes are used to help the current to pass through the system while the gate electrodes lower the barrier for rotation of MX in the cage by stabilizing the transition state of the rotation. Non-equilibrium Green's function technique is used at the density functional theory level to study the dependence of conductivity on the orientation of the enclosed molecule. Based on our results, the orientation of MX can be both enforced ("written") by the voltage applied and retrieved ("read") by measuring the conductivity of the studied system. The studied systems thus behave like molecular memristors. These may find application in random access memories for short- or long-term data storage, or in memristor-based logic circuits. The utilization of the $\text{MX}@\text{C}_{70}$ systems depends on the lifetime of the states, i.e., on the energy barrier of the MX switching in the absence of the external electric field.



Fyzikální chemie VI

MÍSTO: A12

KOMISE

doc. Ing. Pavel Chuchvalec, CSc. (předseda)

Ing. Štěpán Hovorka, Ph.D.

Ing. Alena Randová, Ph.D.

Ing. Martin Růžička (ORLEN Unipetrol RPA)

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Bc. Vojtěch Jeřábek](#) (M2, doc. Ing. Karel Řehák, CSc.)

Fázové rovnováhy v binárních systémech obsahujících dihydrolevoglukosenon a uhlovodíky

09:20 [Bc. Barbora Kocábková](#) (M2, Dr. Ing. Pavel Vrbka)

Limitní aktivitní koeficient methyl(tert-butyl)etheru ve vodných roztocích síranu hořečnatého

09:40 [Bc. Štefan Kocian](#) (M2, Ing. Vojtěch Štejfa, Ph.D.)

Classical and unconventional methods for phase behavior studies of ionic liquids

10:00 [Bc. Hlib Lyshchuk](#) (M2, prof. Ing. Květoslav Růžička, CSc.)

Tepelné kapacity vybraných alifatických hexanolů

10:20 [Bc. Jana Slavíková](#) (M1, Ing. Daniel Ondo, Ph.D.)

Termodynamika kolapsu poly-N-isopropylakrylamidu v roztocích aminokyselin

10:40 [Bc. Anna Tvrdohňová](#) (M1, Ing. Jiří Smilek, Ph.D., Vysoké učení technické v Brně)

Příprava a charakterizace hydrogelů s difúzním gradientem

11:00 [Bc. Olga Vojtíšková](#) (M2, prof. Ing. Michal Fulem, Ph.D.)

Vliv aproximace Gibbsovy energie tání na rozpustnost léčiv

vyhlášení výsledků

Fázové rovnováhy v binárních systémech obsahujících dihydrolevoglukosenon a uhlovodíky

Bc. Vojtěch Jeřábek (M2)

Školitel: doc. Ing. Karel Řehák, CSc.

Dihydrolevoglukosenon (DLG) je perspektivní zelené rozpouštědlo, které je možné syntetizovat z biomasy. Díky svým vlastnostem by mohla tato látka nahradit některá hojně používaná rozpouštědla, která jsou potenciálně nebezpečná pro člověka či životní prostředí. Jedná se například o *N,N*-dimethylformamid (DMF) a *N*-methyl-2-pyrrolidon (NMP). DLG byl již použit v řadě syntéz a praktických aplikací. DLG lze také potenciálně využít pro extrakci látek z uhlovodíkových směsí. Proto se jako důležité jeví znát jeho chování v binárních systémech s uhlovodíky. V této práci byla experimentálně stanovena rovnováha kapalina–kapalina v systémech obsahujících DLG a vybrané uhlovodíky (hexan, cyklohexan, dekan). Experimentální data byla získána kombinací objemové a přímé analytické metody (plynová chromatografie). Z takto získaných výsledků byly vyhodnoceny parametry rovnic ESL a NRTL, díky nimž byl získán popis binodální křivky rovnováhy kapalina–kapalina a aktivitních koeficientů ve studovaných systémech.

Limitní aktivitní koeficient methyl(tert-butyl)etheru ve vodných roztocích síranu hořečnatého

Bc. Barbora Kocábková (M2)

Školitel: Dr. Ing. Pavel Vrbka

Práce obsahuje aktualizovanou závislost limitního aktivitního koeficientu methyl(*tert*-butyl)etheru (MTBE) na molalitě vodného roztoku MgSO_4 při teplotě 298 K v koncentračním rozmezí 0 - 1 mol/kg. Aktivitní koeficienty byly stanoveny stripovací metodou (IGS method). Z dat byla vyhodnocena Sečenovova konstanta systému (k_s) a její správnost (konzistence s ostatními měřeními) byla ověřena srovnáním s hodnotami vypočtenými z jiných dat o Sečenovově konstantě na základě dříve potvrzeného předpokladu o aditivním charakteru této konstanty.

Classical and unconventional methods for phase behavior studies of ionic liquids

Bc. Štefan Kocian (M2)

Školitel: Ing. Vojtěch Štejfa, Ph.D.

Application of ionic liquids for industrial use is well dependent on the thermodynamic properties of compounds in question; phase behavior, heat capacities and saturated vapor pressures. The first two listed can be described using classical methods such as differential scanning calorimetry (DSC). However, finding reliable methods for saturated vapor pressure measurements of ionic liquids can prove tricky as one of key characteristics of ionic liquids is their very low saturated vapor pressure. Knudsen effusion is generally regarded to yield best results in the pressure range needed. For the phase behavior study, eight ionic liquids derived from the 1-butylpyridinium cation were selected and studied by the means of heat flux DSC. The employment of the noncommercial Knudsen effusion apparatus for vapor pressure measurements is still in the validation process. For the testing, two reference compounds were chosen: 1,3,5-triphenylbenzene and the archetypal ionic liquid, 1-ethyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide. The results obtained were compared with the literature data available.

Tepelné kapacity vybraných alifatických hexanolů

Bc. Hlib Lyshchuk (M2)

Školitel: prof. Ing. Květoslav Růžička, CSc.

V této práci jsou uvedeny naměřené hodnoty tepelných kapacit pro sedm vybraných alifatických hexanolů (2-methyl-1-pentanol, CAS RN: 105-30-6; 3-methyl-1-pentanol, CAS RN: 589-35-5; 3-methyl-2-pentanol, CAS RN: 565-60-6; 4-methyl-2-pentanol, CAS RN: 108-11-2; 3-methyl-3-pentanol, CAS RN: 77-74-7; 2,3-dimethyl-2-butanol, CAS RN: 594-60-5; 2-ethyl-1-butanol, CAS RN: 97-95-0). Látky byly před měřením čištěny pomocí mikrodestilace s cílem dosáhnout čistoty alespoň 99.7 molárních procent a poté sušeny pomocí molekulárních sít. Tepelné kapacity byly změřeny pomocí vysoce citlivého kalorimetru Tian-Calvetova typu (SETARAM μ DSC IIIa) v rozsahu od 267 do 353 K. Byl také učiněn pokus o změření teplot a entalpií tání (kalorimetr TA Instruments Q1000 Differential Scanning Calorimeter (DSC)), který byl ovšem úspěšný pouze pro 3-methyl-3-pentanol, 3,3-dimethyl-1-butanol a 2,3-dimethyl-2-butanol; ostatní studované látky ani při teplotě 190 K nezkrytalizovaly. Práce navazuje na předchozí úsilí zaměřené na alifatické oktanoly a heptanoly. Hlavním cílem této práce bylo poskytnout doporučené hodnoty tepelných kapacit v širokém teplotním rozsahu a tím zaplnit mezeru ve spolehlivých údajích pro tyto sloučeniny.

Termodynamika kolapsu poly-N-isopropylakrylamidu v roztocích aminokyselin

Bc. Jana Slavíková (M1)

Školitel: Ing. Daniel Ondo, Ph.D.

Poly-N-isopropylakrylamid (pNIPAM) je polymer, který má ve vodě dolní kritickou rozpouštěcí teplotu (t_{LCST}) kolem 33 °C. Díky této vlastnosti má pNIPAM potenciál pro použití ve farmacii, jako nosič léčiv. V této práci byla zkoumána t_{LCST} v ternárních roztocích pNIPAMu s různými aminokyselinami o molalitě 0,05 mol/kg až 1 mol/kg. Pro bazické a kyselé aminokyseliny byly použity jejich sodné popř. chloridové soli. Pro zjištění t_{LCST} byl použit bodotávek Optimelt, který detekuje zákalovou teplotu. Aminokyseliny převážně vykazují klesající lineární závislost t_{LCST} jako funkce molality. Pomocí diferenciálního skenovacího kalorimetru byla pro vybrané aminokyseliny změřena i entalpie zkoumaného přechodu.

Příprava a charakterizace hydrogelů s difúzním gradientem

Bc. Anna Tvrdoňová (M1, Vysoké učení technické v Brně)

Školitel: Ing. Jiří Smilek, Ph.D.

Hydrogely představují trojrozměrnou síť polymerních řetězců (disperzní podíl), jejíž vnitřní prostor je vyplněn vodou (disperzní prostředí). Finální gel bývá efektivnější, pokud se skládá z více navazujících vrstev s gradientovou změnou vlastností (z hlediska aplikačního např. transportních). Předložená práce se zabývala přípravou gradientních hydrogelů a následně charakterizací vlastností pomocí pilotních experimentů, především s ohledem na prokázání gradientové struktury. Metodou řízené difúze byly připraveny gradientové hydrogely na bázi polysacharidu – alginátu sodného. Transportní charakter byl pozorován dle uvolněného množství organického barviva (kationický Rhodamin 6G) ze struktury hydrogelů do prostředí deionizované vody. Viskoelastický charakter byl stanoven pomocí amplitudových testů, jenž poskytly informaci o hodnotách viskoelastických modulů v závislosti na amplitudě deformace. Hydrogely byly porovnávány v závislosti na volbě síťovacího činidla, jeho koncentraci a době síťování. Na základě získaných zkušeností byl připraven hydrogel s difúzním gradientem. Výsledky naznačují, že volbou koncentrace síťovacího činidla, stejně jako dobou síťování, lze modulovat vlastnosti (viskoelastické i transportní) do požadovaných hodnot dle cílené aplikace hydrogelů.

Vliv aproximace Gibbsovy energie tání na rozpustnost léčiv

Bc. Olga Vojtíšková (M2)

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

Znalost tepelné kapacity podmiňuje správný výpočet termodynamických veličin jako jsou entalpie nebo Gibbsova energie a z nich dále odvozených veličin. Přesto se tepelné kapacity léčiv v literatuře nedostává dostatečné kvantity ani kvality dat. Neznalost teplotní závislosti tepelné kapacity potom vede k použití různých aproximací. Ve farmacii je v současnosti velkým tématem nízká rozpustnost léčiv ve vodě a z toho vyplývající vliv na účinnost léčiv v lidském těle. Jedním z významných parametrů pro výpočet rozpustnosti je rozdíl mezi tepelnými kapacitami krystalické a kapalné formy dané látky (ΔC_p). Znalost ΔC_p je tak nezbytná pro rigorózní popis rozpustnosti léčiv nejen ve vodě, ale například i v polymerech. Řadu léčiv je možné připravit v různých krystalových modifikacích. Tyto polymorfy se vzájemně liší svojí termodynamickou stabilitou a tím i rozpustností. Tato práce se zaměřuje na vliv aproximace ΔC_p a nejistot v teplotě a entalpii tání na výpočet rozpustnosti. Klade si za cíl stanovit spolehlivé tepelné kapacity pro vybraná léčiva a jejich polymorfy a kriticky zhodnotit existující literární data.

Ústav chemického inženýrství (409)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

doc. Dr. Ing. Pavlína Basařová

SEZNAM SEKCI

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

SPONZOŘI ÚSTAVU CHEMICKÉHO INŽENÝRSTVÍ



ŠKODA



ZENTIVA



arxada



vesmír



Chemical Engineering I

MÍSTO: B 141B

KOMISE

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

Ing. Edyta Paula Adrián, Ph.D.

Ing. Filip Hládek

Ing. Filip Čejka (BR&E Europe)

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

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 [Bc. Zina Briki](#) (M1, Ing. Mária Zedníková, Ph.D.)

Effect of surfactant on bubble column hydrodynamics

08:50 [Terezie Císařová](#) (B3, Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D.)

Liposomes with ladderane content for potential pharmaceutical applications

09:10 [Bc. David Gráf](#) (M2, Ing. Petr Mazúr, Ph.D.)

Optimization study of electrodeposition in zinc-air flow battery

09:30 [Bc. Zuzana Hlavačková](#) (M1, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

Multi-drug formulations of personalized medicine by solvent impregnation

09:50 [Bc. Tomáš Hlavatý](#) (M2, Ing. Martin Isoz, Ph.D.)

Developing a coupled CFD solver for mass, momentum and heat transport in catalytic filters

10:30 [Mathis Leemann](#) (B3, doc. Ing. Jitka Čejková, Ph.D.)

Chemobrionics - The Study of Chemical Gardens

10:50 [Bc. Matouš Pechar](#) (M2, doc. Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D.)

Physical stability of amorphous solid dispersion: computational study and experimental validation

11:10 [Bc. Jan Trnka](#) (M1, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.)

Continuous Oscillatory Baffled Reactor for Production of Mesoporous Silica Microparticles

11:30 [Bc. Tetyana Zheleznyak](#) (M1, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Transient reaction kinetics on three-way catalyst during oscillations of gas composition

vyhlášení výsledků

Effect of surfactant on bubble column hydrodynamics

Bc. Zina Briki (M1)

Školitel: Ing. Mária Zedníková, Ph.D.

Pneumatic mixing is used in various types of reactors. Surfactants can be found in the liquid phase of many bubble systems, occurring as reaction products or as additives. To understand better the effect of surfactants on these systems, research was conducted in a model bubble column system with α -terpineol as the model surfactant. It is known that the presence of surfactants alters the properties and behaviour of single bubbles (e.g., reduction of bubble velocity and size or inhibition of bubble coalescence), which ultimately results in changes in several aspects of bubble column hydrodynamics. In this study, the hydrodynamics of bubble column was characterized by the gas hold-up, which was measured at different input gas flow rates for four (distilled water + 3) concentrations of α -terpineol. The properties of the solutions were characterized by measurements of static and dynamic surface tension and by consequent evaluation of diffusion and adsorption coefficients. The increase of concentration of α -terpineol results in gas hold-up increase, as well as formation of stable foam-like gas-liquid dispersion. The obtained results are correlated with the effect of α -terpineol on the contamination of bubble surface and its effect on single bubble rise and coalescence efficiency.

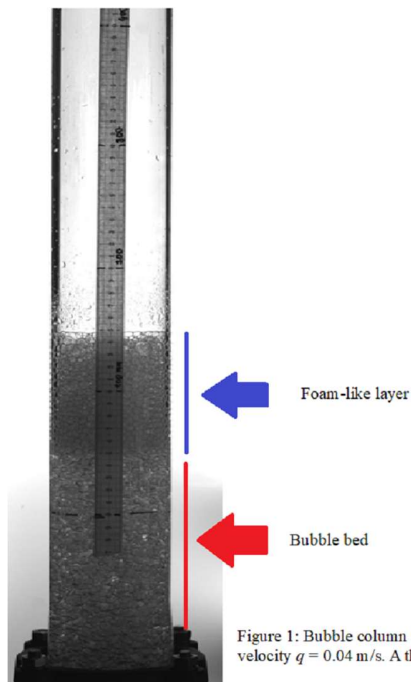


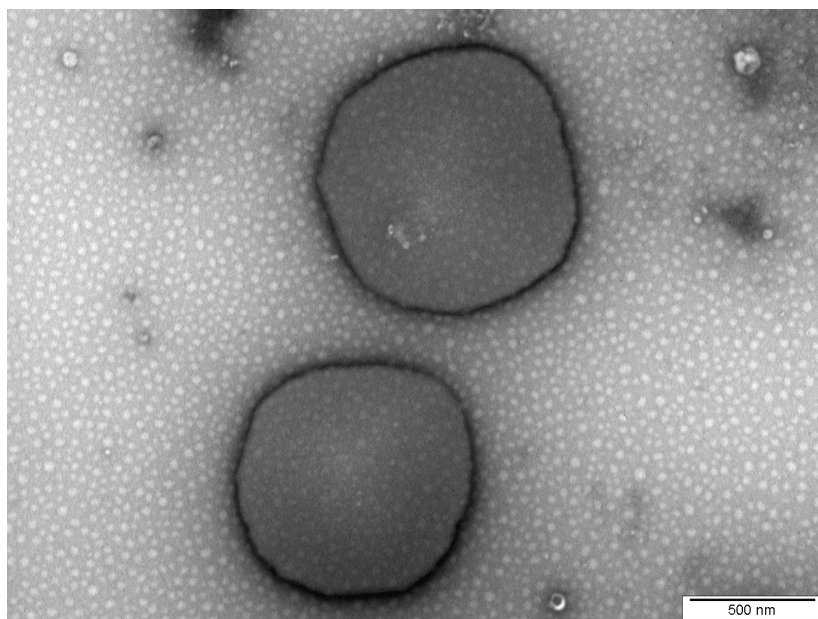
Figure 1: Bubble column with α -terpineol solution of concentration $c = 10^{-4} \text{ mol/dm}^3$ and gas velocity $q = 0.04 \text{ m/s}$. A thicker stable foam-like layer of dispersed gas in solution is visible.

Liposomes with ladderane content for potential pharmaceutical applications

Terezie Císařová (B3)

Školitel: Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D.

Due to covid vaccines, there has been a huge expansion of phospholipid-based drug carriers. One type of such carriers are liposomes –vesicles usable for transporting both hydrophilic and hydrophobic drugs. Unfortunately, only few types of drugs can be effectively kept inside nowadays used liposomes. Varying the composition of the liposome membrane offers a possible solution, as it dramatically changes its properties such as permeability or phase transition temperature. In my work I focus on a new class of phospholipids - ladderane lipids – as one of the building blocks of the lipidic nanoparticles. Those can be found in anammox bacteria in its organelle's membrane and probably cause its high density and impermeability for pH gradient, properties potentially useful for drug retention. For the creation of lipidic vesicles I used the substrate isolated from anammox bacteria. First, I performed a scaling experiment to find the lowest concentration of lipids still suitable for liposome formation. Next, I prepared ladderane liposomes via extrusion and characterised them with dynamic light scattering and different microscopic techniques. Finally, I created ladderane-DPPC mixed particles and performed loading and release experiments to investigate their encapsulating abilities.



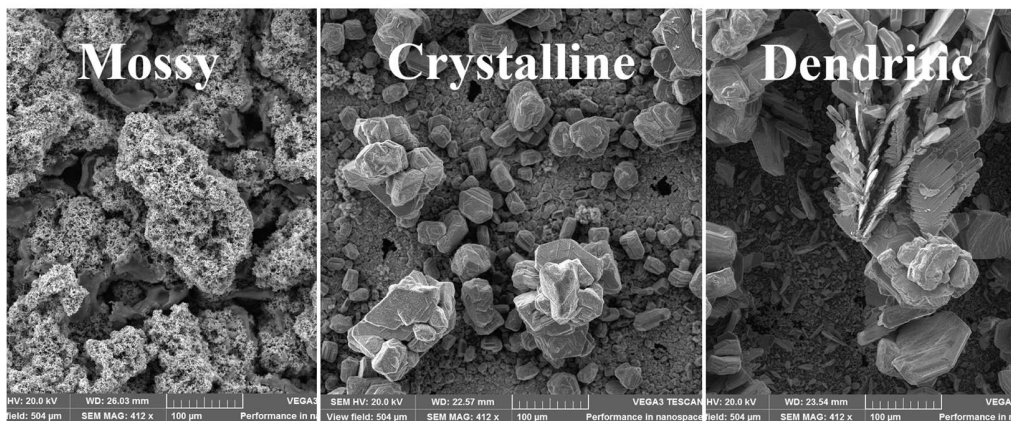
Optimization study of electrodeposition in zinc-air flow battery

Bc. David Gráf (M2)

Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Increasing demand for cheap, effective and environmentally friendly stationary energy storages motivates modern electrochemistry research to focus on alternatives to classical Li-ion batteries. One of the promising possibilities that could meet all the aforementioned requirements and fulfil the potential of green energy sources are the zinc-air flow batteries (ZAFBs). This study deals with one of the most severe drawbacks affecting the battery lifetime, the non-homogeneous deposition of zinc during battery charging. Deposition of zinc on the current collector occurs in three different morphologies: mossy, crystalline and dendritic, however, the most suitable morphology for ZAFB turns out to be the crystalline one due to its low porosity and good adhesion to the current collector. Firstly, the geometry of the deposition half-cell was optimised with the respect to homogeneity of the flow. With the optimised geometry, we systematically studied the effect of several parameters, such as current density, deposition substrates, pre-deposited thin layers or temperature, on deposited morphologies, which were analysed by scanning electron microscopy (SEM). Furthermore, we tested the impact of modification of the flow half-cell by static mixers to improve the mass transfer of zincate ions.

Full size of images:



Multi-drug formulations of personalized medicine by solvent impregnation

Bc. Zuzana Hlavačková (M1)

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

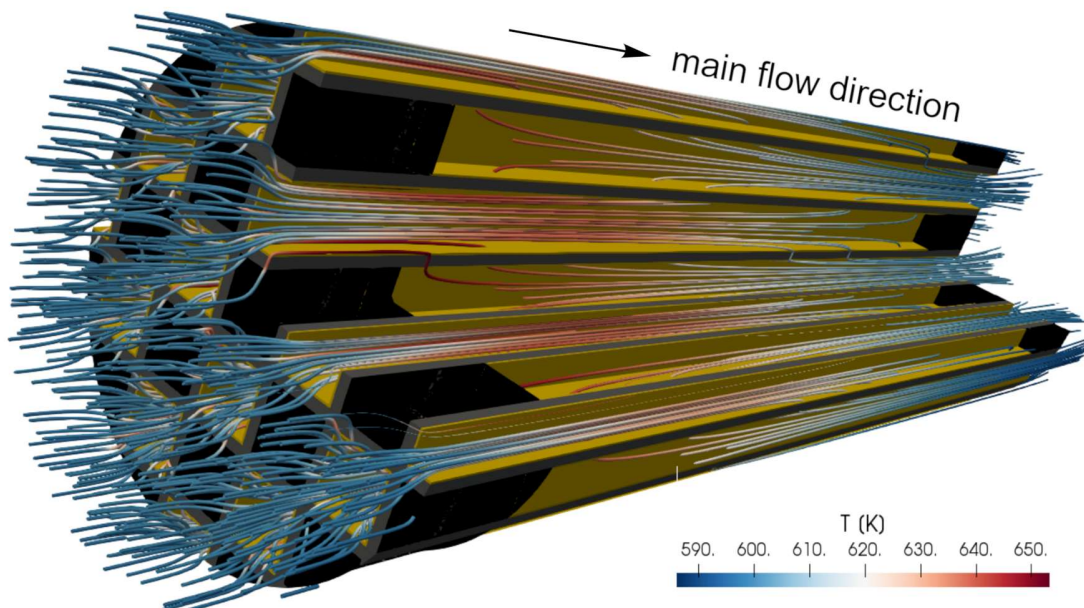
Drugs are often prescribed to the patients in a different dosage strength from what is available on the market. The prescriptions are also in different combinations with other drugs, which leads to possible low compliance of the patient to take the medicine. Personalized medicine is based on the idea that the drugs would be created for each patient based on their individual needs. Suitable ways of producing such medicine are the 3D print, drop-on-demand (DoD) technique and others. In this work, the tablets were prepared by layer-by-layer precise droplet loading from a concentrated solution of the active pharmaceutical ingredient (API). Placebo tablets containing mesoporous silica were used as a substrate. Pores in the mesoporous silica are big enough to capture the API and small enough to prevent the recrystallisation of the API. Therefore, the API is present in its amorphous form. The aim of this work was to study the dissolution profiles from tablets with different combinations of two or three APIs. The chosen APIs that we used in this work are commonly prescribed together to treat high blood pressure. Prepared tablets were dissolved in USP apparatus type 2 and analysed by the HPLC. The crystallinity of the APIs in the tablets was studied by XRPD.

Developing a coupled CFD solver for mass, momentum and heat transport in catalytic filters

Bc. Tomáš Hlavatý (M2)

Školitel: Ing. Martin Isoz, Ph.D.

Historically, the automotive exhaust gas after-treatment comprised multiple groups of devices – particulate matter filters and catalytic converters. However, a recent trend is to combine these devices into a single one, a catalytic filter (CF). Such a combination allows to decrease the system heat losses and facilitates the CF regeneration. On the other hand, the CF overall performance is strongly dependent on the catalytic material distribution within it. In the present work, we aim to provide a computational tool to study the dependence of the CF characteristics, i.e. the pressure loss and the conversion of gaseous pollutants, on the catalyst distribution. Previously, an isothermal computational fluid dynamics (CFD) model of the flow and conversion of gaseous pollutants inside the CF was built. However, the reactions occurring inside the CF are exothermic and the assumption of constant temperature proved to be too restricting for real-life applications of the developed CFD model. Thus, in this work, we extend the framework by the enthalpy balance, which requires coupling all the transport equations (mass, momentum and enthalpy) in a single solver. The new and more general solver is verified against results of an existing surrogate model calibrated on experimental data.



Chemobrionics - The Study of Chemical Gardens

Mathis Leemann (B3)

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

Chemical gardens are well-known self-organizing macroscopic systems created by precipitation reaction. Nevertheless, yet not all aspects of their growth are understood and the field termed “chemobrionics” aims to study them. This work focuses on how the various parameters influence the structure and morphology of the chemical gardens in sodium silicate solution, namely the composition of the system (various salts and various water glass concentrations are compared, a novel solid crystalline mixture is introduced). There are two main ways how to create chemical gardens which are (i) the injection of aqueous salt solution and (ii) the general solid seeding method and these two methods and their advantages and drawbacks are compared. Then, the emergent structures are investigated, specifically the number of chimneys and their size, further the morphology and structure is studied by using scanning electron microscope. In addition, a 1.5 m long copper chloride chemical garden was created to study the stability of the chimneys growth. For the undeniable aesthetics side of chemical gardens, an artistic video with inspiring text of the historical literature on chemical garden was also made.



Physical stability of amorphous solid dispersion: computational study and experimental validation

Bc. Matouš Pechar (M2)

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

Many active pharmaceutical ingredients (APIs) are poorly water-soluble, which results in low bioavailability. A promising solution to this problem is the formulation of a so-called amorphous solid dispersion (ASD). ASDs typically comprise amorphous API molecularly dispersed in a polymeric carrier. However, the API tends to recrystallize if it is in a supersaturated state. Thus, knowledge of the API solubility in the polymer is important. The necessary solubility data is often acquired at elevated temperatures using differential scanning calorimetry (DSC) and then extrapolated using a solid-liquid equilibrium (SLE) model (*e.g.*, the PC-SAFT equation of state (EOS)). An *in silico* approach that reliably models the API–polymer SLE curve can significantly reduce experimental efforts. Here, the compatibility of nifedipine (NIF) in a selection of polymers was screened using the PC-SAFT EOS. Next, the DSC-based protocol “step-wise dissolution” was followed to obtain solubility data for the modeled NIF–polymer binary systems. Finally, the performance of the PC-SAFT EOS was evaluated *via* comparison of the theoretical and experimental results. This cost and time effective strategy for API–polymer solubility determination may provide a dependable ASD design window for formulation scientists.

Continuous Oscillatory Baffled Reactor for Production of Mesoporous Silica Microparticles

Bc. Jan Trnka (M1)

Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Mesoporous silica has been lately investigated as a pharmaceutical excipient for drug formulation due to its exceptional ability to stabilise an amorphous state of poorly soluble API in its mesopores. However, industrial production of silica leads to particles of low specific surface area unsuitable for the drug formulation. Highly porous silica particles have been fabricated only in the batch to this day while a potential transfer to a continuous mode would result in more efficient and less expensive production of this excellent material. This work aims to design a continuous reactor for mesoporous silica fabrication. A continuous oscillatory baffled reactor (COBR) was proposed for this purpose as the reaction is strongly dependent on mixing conditions. As the forming particles tend to attach to any solid surface, the deposition of the particles in the reactor is the ultimate problem. It was found that increasing the intensity of oscillations suppresses the particle accumulation in the reactor but leads to loss of particle quality. A perfect combination of system parameters as well as engineering insight is needed to overcome this problem and produce highly porous silica particles continuously with no deposition.

Transient reaction kinetics on three-way catalyst during oscillations of gas composition

Bc. Tetyana Zheleznyak (M1)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

A three-way catalyst is used to eliminate toxic compounds from exhaust gases produced by internal combustion engines. Its main functions are oxidation of hydrocarbons and carbon monoxide and reduction of nitrogen oxides. These reactions occur on catalytically active Pt, Pd and Rh nanoparticles dispersed in a thin layer on the monolith channel walls. To achieve complete conversion, gas composition must be stoichiometric and keep redox balance between oxidizing (O_2 , NO_x) and reducing (CO, HC, H_2) agents. Gas composition changes with air:fuel ratio in the engine that is controlled to meet the required stoichiometry. The composition oscillates during transient driving conditions, so the catalyst must be able to buffer temporary excess of reducing/oxidizing components. This is why ceria is added to the catalyst: it reversibly transforms from Ce_2O_3 to CeO_2 to provide oxygen storage. In this work, a reaction kinetic model is developed that describes the catalyst's response to dynamic changes in gas composition. Oxygen storage capacity and kinetic parameters for redox reactions are evaluated from lab experiments using different amplitudes and periods of oscillations. The developed kinetics improve the model's accuracy and can be used to optimize catalyst operation in real conditions.

Chemické inženýrství II

MÍSTO: BS 4

KOMISE

prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha (předseda)

Ing. Vojtěch Šálek

Ing. Jakub Klimošek

Ing. Jan Mrákota (Chemoprojekt)

prof. Ing. Kamila Kočí, Ph.D. (VŠB)

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 [Albert Behner](#) (B3, prof. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.)

Polyaniline – derived hierarchically porous carbon based materials for CO₂ capture

08:50 [Vojtěch Bílek](#) (B3, Ing. Jan Haidl, Ph.D.)

Validace numerického modelu míchané nádoby

09:10 [Vladislav Bulgakov](#) (B3, Ing. Ondřej Kašpar, Ph.D.)

CFD simulace toku a studium depozice částic v cyklónu rozprašovací sušárny

09:30 [Johana Fialová](#) (B3, Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.)

Skafoldy: Termodynamika systému biopolymer/rozpouštědlo

09:50 [Jakub Hanzl](#) (B3, doc. Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.)

Testování nanostrukturovaných materiálů pro aplikaci v průtokových vanadových bateriích

10:30 [Rostislav Huňa](#) (B2, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.)

Farmaceutické fluidní lože a statická elektřina aneb souboj o potah

10:50 [Jakub Kamenický](#) (B3, prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha)

Příprava a experimentální vývoj vodíkového čidla

11:10 [Nina Nováková](#) (B3, doc.Ing. Jitka Čejková, Ph.D.)

Experimentální studium vlivu soli na růst myelinových figur

11:30 [Maximilián Prachár](#) (B3, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.)

Parametrická štúdia výroby lipidickej liekovej formy na prístroji Kuličkomat

11:50 [Karolína Slonková](#) (B2, Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.)

Vylučování antibiotik z kompozitních mikročástic pomocí magnetického pole

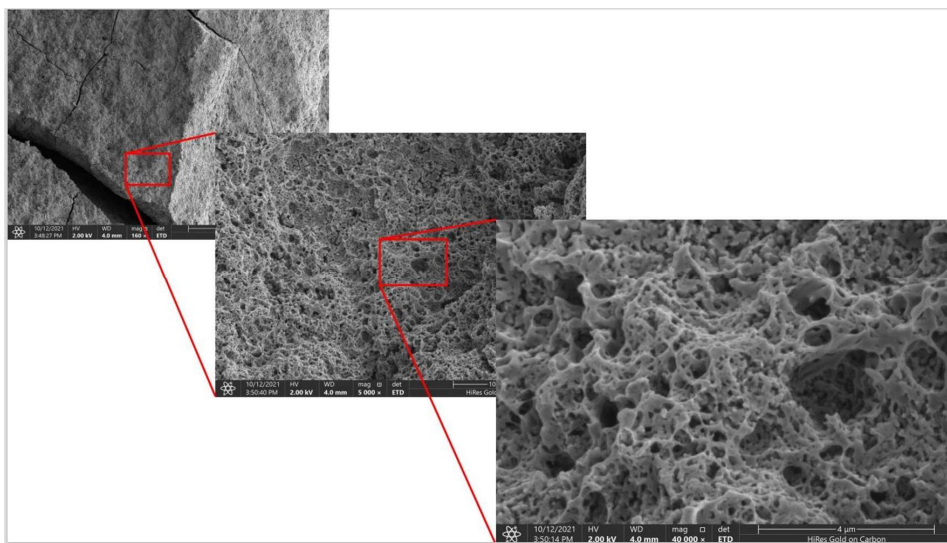
vyhlášení výsledků

Polyaniline – derived hierarchically porous carbon based materials for CO₂ capture

Albert Behner (B3)

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

A dramatic increase in atmospheric CO₂ levels is a primary driver of global warming. The largest source of greenhouse gas emissions originates from the burning of fossil fuels. CO₂ capture and utilization (CCU) are one of the promising technology to mitigate climate change and lower the dependence on fossil fuels by conversion of waste material to a valuable product. To realize scalable CCU technologies, earth-abundant and low-cost materials with high CO₂ sorption capacity and specificity need to be developed. Hierarchically porous heteroatom-doped carbon-based materials are promising materials for CCU. In this work, the polyaniline-derived nitrogen-doped-carbon materials with hierarchical porosity were investigated and tested as CO₂ sorbents. The morphology and chemistry are adjusted by the use of polystyrene nanoparticles, various precursor material, and controlled pyrolysis steps. The presence of macropores, mesopores, and micropores in the developed materials provides enhanced CO₂ capacity. While incorporating heteroatoms doping (nitrogen, nitrogen phosphor-, nitrogen sulphur-) could improve the CO₂ specificity. Thanks to high porosity and present of dopants, the materials can be further exploited for the catalysis application, and pave the way for new CCU technologies.



Validace numerického modelu míchané nádoby

Vojtěch Bílek (B3)

Školitel: Ing. Jan Haidl, Ph.D.

Práce se zabývá problematikou matematického modelování proudění tekutin v míchané nádobě metodami výpočetní mechaniky tekutin (CFD, Computational Fluid Dynamics). Cílem práce je vytvořit validovaný matematický model míchané nádoby s dvojicí radiálních míchadel. Validace modelu, tedy kontrola věrohodnosti modelem predikovaných rychlostních polí, je provedena na základě porovnání předpovězených – vypočtených – dat s experimentálními daty převzatými z odborného článku. Znalosti získané z této práce by měly posloužit jako podklad pro další rozvoj matematického modelování míchaných nádob s typickou i atypickou geometrií. Výpočty jsou prováděny s využitím open-source CFD softwaru OpenFOAM. Zvolená metodika spočívá v numerickém řešení časově průměrovaných Navier-Stokesových rovnic (RANS) metodou konečných objemů (FVM – Finite Volume Methods). Rotace míchadel je zajištěna pomocí techniky MRF – Multiple Reference Frame.

CFD simulace toku a studium depozice částic v cyklónu rozprašovací sušárny

Vladislav Bulgakov (B3)

Školitel: Ing. Ondřej Kašpar, Ph.D.

Rozprašovací sušení patří mezi nejdůležitější metody přípravy prášků z vodných či organických roztoků. Suchý prášek je následně separován od sušícího média v cyklonovém odlučovači. Své uplatnění našlo rozprašovací sušení především v potravinářském, kosmetickém a farmaceutickém průmyslu díky své rychlosti a možnosti sušení i teplotně citlivých látek (např. enzymy či probiotika). Zásadním problémem jedné z nejčastěji používaných rozprašovacích sušáren Buchi B290 je nadměrná depozice částic v cyklonovém odlučovači, což při malém množství vzorku může znamenat zásadní problém. Tato skutečnost byla adresovaná samotným výrobcem pomocí tzv. high-performance cyklónu, který je určen pro zvýšení účinnosti separace v případě jemných částic. I v tomto případě byla pozorována nadměrná depozice. Tato práce se zabývá studiem toku a depozicí částic v cyklonu rozprašovací sušárny Buchi B290 za využití výpočetního softwaru COMSOL Multiphysics, který umožňuje použití anizotropního turbulentního modelu v2-f vhodného pro povrchy s vysokým zakřivením. Hlavním cílem této práce je tvorba modelu dvou typů dodávaných cyklónů, studium toku uvnitř nich a predikce kritických míst, kde může docházet k depozici. Na základě získaných dat budou dále navrženy úpravy geometrie cyklónu vedoucí k účinnější separaci.

Skafoldy: Termodynamika systému biopolymer/rozpouštědlo

Johana Fialová (B3)

Školitel: Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.

Ke konci dvacátého století došlo k prudkému rozvoji moderní regenerativní medicíny. Jedná se o víceoborovou disciplínu, která vychází z tkáňového inženýrství, molekulární biologie a z nanotechnologie. Zabývá se nejen náhradou nefunkčních tkání a orgánů, ale především jejich regenerací a opravou. Náhrada orgánu je značně komplikovaným procesem a nese s sebou mnoho náročných výzev. Alternativou je využití mechanických opor, které slouží jako podpůrné 3D struktury napodobující přírodní extracelulární matrici, anglicky označovaných jako „scaffold“ (počeštěně skafold). Tato práce se zabývá termodynamickými aspekty výroby mikroporézních skafoldů z kyseliny polymléčné (PLA) metodou spinodální dekompozice z homogenního roztoku v kyselině octové. Volba těchto dvou složek je podmíněna jejich minimální toxicitou a přirozenou schopností degradace v biologickém prostředí. Pro dvě různé molekulové hmotnosti polymeru byly metodou laserové turbidimetrie naměřeny body zákalu, tedy část tzv. binodální křivky, která ve fázovém diagramu odděluje homogenní směs od dvoufázového systému. Zároveň byly na základě Floryho-Hugginsovy mřížkové teorie vytvořeny binodální a spinodální křivky systému v dobré shodě s experimentálními daty.

Testování nanostrukturovaných materiálů pro aplikaci v průtokových vanadových bateriích

Jakub Hanzl (B3)

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

Motivací této práce je neustále se řešící problematika ukládání elektrické energie, ať už z důvodu přebytků v elektrické síti nebo ve spojitosti s energií pocházející z obnovitelných zdrojů, jakými jsou například fotovoltaické panely. Práce se zaměřuje na studium nanostrukturovaných vodivých materiálů a jejich možném využití jako elektrod ve vanadových průtokových bateriích. Tyto baterie představují jeden z možných způsobů, jak elektrickou energii uchovávat ve formě energie chemické. V úvodu se zabýváme návrhem a následnou konstrukcí měřicí elektrochemické cely k charakterizaci nanostrukturovaných materiálů. Výhodou cely je možnost elektrochemicky charakterizovat materiály ve formě lože, tzn. bez nutnosti spoléhat na pasivní adsorbci materiálu na proudovém sběrači, či jeho zapouzdření do polymerního pojiva. V další části práce charakterizujeme vytvořená lože pomocí cyklické voltametrie. Mezi hlavní parametry ovlivňující voltametrické křivky patří množství materiálu v loži, jeho komprese a v neposlední řadě i typ použitého nanomateriálu. Byly testovány především uhlíkové materiály s různým druhem modifikací. Na základě vyhodnocení dat jsme určili nanomateriály vhodné pro konstrukci elektrod v těchto bateriích. Tyto materiály budou následně předmětem testování v reálném systému.

Farmaceutické fluidní lože a statická elektřina aneb souboj o potah

Rostislav Huňa (B2)

Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Současným trendem ve farmaceutickém vývoji je kombinace více aktivních látek v jedné formulaci spojené s jejich řízeným uvolňováním. Vhodným procesem k získání takovéto formulace je potahování mikročástic ve fluidním loži. Potahování při fluidaci je však velmi citlivý proces, jehož hlavními parametry jsou rovnováha mezi vlhkostí danou nástřikem roztoku a statickou elektřinou převládající v nižších hodnotách vlhkostí. Statická elektřina způsobuje přilnavost mezi částicemi a částicemi ale rovněž i mezi částicemi a stěnou zařízení. Výsledkem může být úplný kolaps a znehodnocení vsádky. Cílem práce je určit vlivy vlastností částic na proces nabíjení statickou elektřinou se zaměřením na materiál, velikost částic, drsnost a sféricitu. Drsnost a sféricitu je možné upravit zahlazováním částic v procesu fluidace pomocí nástřiku čisté vody na rozpustné typy částic, v našem případě byl použit chlorid sodný.

Příprava a experimentální vývoj vodíkového čidla

Jakub Kamenický (B3)

Školitel: prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha

Přímé měření okamžité koncentrace vodíku v čase je technologicky náročný úkol, avšak jeho vyřešení by mělo velký význam pro energetický průmysl a bezpečnostní inženýrství. Hlavní problém pro okamžité měření koncentrace vodíku v současnosti představuje citlivost používaných elektrochemických sond a jejich dlouhodobou časovou stabilitu. Laboratoř sdílení hmoty má dlouholeté zkušenosti s vývojem metod pro stanovování okamžité koncentrace plynů v průmyslových systémech. Náš současný výzkum navazuje na úspěšný projekt, který se zabýval vývojem sondy pro okamžité měření kyslíku. Nový prototyp sondy vyvíjený naší výzkumnou skupinou má oproti současným dostupným řešením na trhu okamžitou odezvu měřeného signálu při změně koncentrace vodíku. Tato práce je zaměřena na tvorbu řádné technické dokumentace za účelem sestrojení vodíkové sondy z nových dílů, které jsou kompatibilní s díly použitými v předchozích projektech. Původní sonda se skládá z tubusu, vnitřních částí (váleček pro průchod elektrod, stavěcí červík), měřící elektrody, referentní elektrody, těsnících kroužků a membrány. Dále je práce zaměřena na sestrojení prototypu sondy dle zmíněné dokumentace a experimentální studium rozložení odporu u povrchu obou pracovních elektrod při instalaci srovnávací argentochloridové elektrody.

Experimentální studium vlivu soli na růst myelinových figur

Nina Nováková (B3)

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

Myelinové figury jsou dlouhé spletené válcovité struktury, které se tvoří hydratací koncentrované lamelární fáze určitých lipidů a povrchově aktivních látek. Svým vzhledem připomínají živou tkáň, konkrétně lipoproteinový obal nervových vláken – myelin, po kterém nesou tyto figury svůj název. Tvorba myelinu není dodnes zcela objasněna, mezi jeho potenciální aplikace patří zapouzdření a řízené dodávání léčiv. V naší laboratoři pracujeme se systémem dekanol-vodný roztok dekanoátu, do kterého je přidávána alkalická sůl. Pozorujeme morfologické změny kapky dekanolu a v rámci několika desítek minut následný růst myelinových figur z této kapky při vypařování vody. Cílem tohoto výzkumu je experimentálně studovat vliv soli na růst myelinových figur a zefektivnit způsob provádění experimentů, který je závislý na mnoha podmínkách, jako jsou například koncentrace roztoku dekanoátu, poměr objemů kapek v systému, teplota, ale i pohyb při manipulaci při pozorování myelinu pod mikroskopem.

Parametrická štúdia výroby lipidickej liekovej formy na prístroji Kuličkomat

Maximilián Prachár (B3)

Školiteľ: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Viac ako 40% nových farmaceuticky účinných látok vykazuje slabú rozpustnosť vo vode, ktorá je príčinou ich nízkej bio-dostupnosti a taktiež je prítomný food-effect, kedy je vstrebateľnosť liečiva premenlivá s príjmom potravy. Inovatívna lipidická lieková forma na princípe liquid marbles (tekutých guľičiek) je schopná tieto problémy minimalizovať, ako už bolo dokázané v *in vivo* štúdiách. Enkapsuláciou účinnej látky do lipidickej matrice vzniká tzv. tekutá olejová guľička, ktorá kombinuje výhody pevných a lipidických formulácií. Ako spôsob výroby bol na VŠCHT vyvinutý prototypový prístroj Kuličkomat (Spheromat). Cieľom tejto práce bolo vykonať parametrickú štúdiu výroby tejto lipidickej liekovej formy na tomto prístroji. Výsledky tejto štúdie sú univerzálne aplikovateľné na princíp výroby a môžu slúžiť pre produkciu rôznych nových lipidických liekových formulácií na scale-up zariadenia, ktoré je momentálne v štádiu poloprevádzky (pilot plant stage). Potvrdilo sa, že Kuličkomat je schopný laboratórnej výroby tejto lipidickej liekovej formy požadovanej kvality, s maximálnou produkciou 3540 tekutých olejových guľičiek za minútu.

Vylučování antibiotik z kompozitních mikročástic pomocí magnetického pole

Karolína Slonková (B2)

Školitel: Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.

Kompozitní mikročástice schopné řízeně vyloučit léčivo byly vytvořeny enkapsulátorem. Mikročástice byly složeny z jádra tvořeného suspenzí norfloxacinu a vhodného vosku, který je za pokojové teploty tuhý. Jádro bylo obaleno hydrogelovou slupkou tvořenou alginátem vápenatým obsahujícím magnetické nanočástice oxidu železa. Díky magnetickým vlastnostem je směsný oxid Fe_3O_4 vhodný pro využití ve formě hydrofilních nanočástic stabilizovaných dextranem, které se ohřívají v generovaném střídavém magnetickém poli. Tento indukční ohřev zajišťuje v kompozitních mikročásticích rozpuštění vosku a vyloučení antibiotika do okolí. Tato práce se zabývá přípravou magnetických nanočástic, měřením jejich magnetických vlastností a využitím v přípravě kompozitních mikročástic. V této práci jsou také popsány zkoumané antibakteriální účinky výsledných kompozitních mikročástic způsobené indukčním ohřevem, které byly testovány v přítomnosti bakterií *E.Coli*. Bylo zjištěno, že v systému obsahujícím 50 mg mikročástic a 100 μL bakterií ($\text{OD}_{600} = 0,15$) stačí jeden magnetický impulz na usmrcení 60% bakterií a tři impulzy jsou dostačující pro usmrcení všech bakterií přítomných v systému.

Chemické inženýrství III

MÍSTO: BS 9

KOMISE

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

Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.

Ing. Pavel Krýsa

Ing. Jindřich Kropáček

Ing. Jiří Maršálek, Ph.D. (MemBrain)

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 [Martin Bár](#) (B3, prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha)

Transportní charakteristiky pervaporačního modulu. Experimentální studie.

08:50 [Vojtěch Blahušek](#) (B3, doc. Ing. Jitka Čejková, Ph.D.)

Charakterizace povrchu tekutých kuliček

09:10 [Tatiana Jarottová](#) (B3, Ing. Karel Mařík)

Vývoj senzoru rychlostního pole proudících kapalin

09:30 [Adéla Kavalová](#) (B2, Ing. Martin Isoz, Ph.D.)

Numerická studie vlivu textury na smáčivost povrchu výplně separačních kolon

09:50 [Karel Kubeš](#) (B3, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)

Improving electrostatic dust removal by contact charging of dust particles

10:30 [Karel Pecha](#) (B3, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Vývoj aparatury pro měření filtrační účinnosti automobilových filtrů pevných částic

10:50 [Martin Roudný](#) (B3, Ing. Aleš Zdražil, Ph.D.)

Příprava optimálních nanoformulací pro léčiva kolorektálního karcinomu

11:10 [Vladislav Shirokov](#) (B3, doc. Dr. Ing. Pavlína Basařová)

Studium vlivu viskozity na chování bublin ve vodných roztocích glycerolu

11:30 [Martin Spurný](#) (B3, Ing. Petr Mazúr, Ph.D.)

Vliv protiiontu na elektrochemické vlastnosti sulfonovaných derivátů chinonů pro redoxní průtočné baterie

11:50 [Štěpánka Staňková](#) (B3, Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.)

In vitro farmakokinetika nanočásticových nosičů léčiv

vyhlášení výsledků

Transportní charakteristiky pervaporačního modulu. Experimentální studie.

Martin Bár (B3)

Školitel: prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha

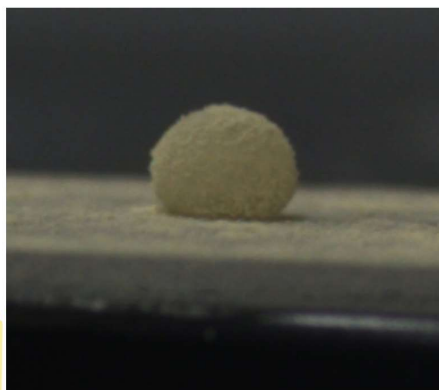
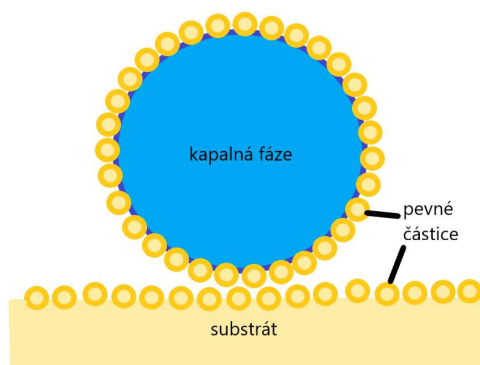
Pervaporace je membránový separační proces, který využívá přechodu separovaných látek ze strany kapalně směsi přes membránu, na jejíž druhé straně jsou odpařovány. Technologický význam nalézá mimo jiné při dělení azeotropických směsí, které lze pervaporací oddělit dodáním relativně malého množství energie. Azeotropické systémy vznikají například při procesu ABE (aceton-butanol-ethanol) fermentace, která slouží k výrobě ethanolu a butanolu z biomasy, což je perspektivní způsob výroby biopaliva. Laboratoř sdílení hmoty na VŠCHT se zabývá kontinualizací procesu fermentace, kdy by právě pervaporace našla uplatnění pro separaci produktů. Hlavním cílem je získat kritériální rovnice pro výpočet intenzity transportu hmoty membránou. Membránový modul pro pervaporaci je sestaven z prvků původně vyvinutých pro elektrodialýzu. Měření na modelu je tedy zatím v optimalizační fázi. Výsledky dosavadní práce ukazují, že koeficienty přestupu hmoty na straně kapalného filmu jsou příliš vysoké, což bylo pravděpodobně způsobeno přetoky kapaliny do proudu inertu následkem netěsností mezi přívodními a odvodními kanálky. Cílem této práce je porovnat koeficienty přestupu hmoty a další parametry separace po utěsnění kanálků silikonovou hmotou s předchozími výsledky.

Charakterizace povrchu tekutých kuliček

Vojtěch Blahušek (B3)

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

Tekuté kuličky (z anglického „liquid marbles“) jsou jednoduché útvary tvořené kapkou kapaliny obalenou pevnými částicemi. Lze je připravit jednoduše, kápnutím vody na hydrofobní částice na Petriho misce a mírným zatřesením k úplnému obalení kapky. Poprvé byly popsány v článku v časopise Nature v roce 2001 a od té doby jsou zkoumány jejich možné aplikace, mezi něž patří ku příkladu mikroreaktory v mikrofluidice, mikrobioreaktory ke kultivaci trojrozměrných buněčných útvarů nebo nosiče léků ve farmacii. Dosud se výzkum zabývá spíše jejich využitím a samotné tekuté kuličky se berou jako útvary pokryté monovrstvou v pravidelném uspořádání. Cílem předložené práce je studovat povrch a morfologii tekutých kuliček, a také některé jejich vlastnosti. Abychom mohli studovat povrch kuliček přímo, nechali jsme uvnitř vykristalizovat roztok sacharózy. Takto připravené pevné kuličky mají na povrchu částice z obalu původních tekutých kuliček a jsou vhodné pro pozorování skenovacím elektronovým mikroskopem. Tímto způsobem jsme byli schopni přímo pozorovat povrch tekutých kuliček připravených s různými velikostmi částic. Dále jsme pozorovali několik jevů tekutých kuliček plovoucích na hladině kapaliny. Tato pozorování je možno využít pro další výzkum například v oblasti sorpce plynů do kuliček.



Vývoj senzoru rychlostního pole proudících kapalin

Tatiana Jarottová (B3)

Školitel: Ing. Karel Mařík

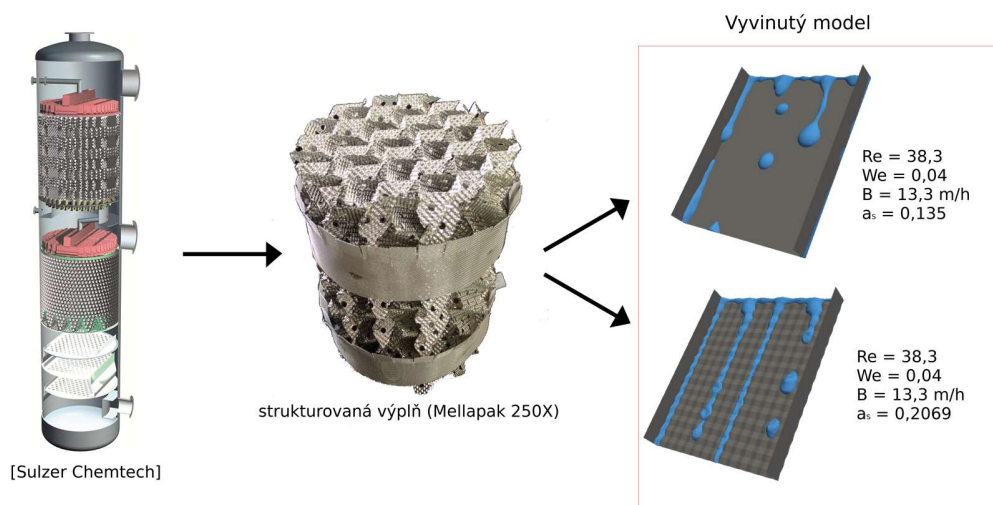
Pre schopnosť riešenia či identifikovania premyslených problémov je potrebná znalosť o rozložení rýchlosti tekutiny v sledovanom objeme. Tento projekt je zameraný na výrobu prototypu mriežkového senzoru pre meranie rýchlostného poľa tekutín. Senzor je vytvorený z mriežky tenkých niklových drôtov, na ktoré je vložená známa hodnota napätia. Drôty sú ochladzované obtekaním tekutiny, čím vznikne nerovnomerné rozloženie teplôt, a teda aj ich odporov. Cieľom práce je overenie funkčnosti vyrobeného prototypu – kalibrácia nameraných odporov pre rôzne rýchlosti prúdenia vody pri vložnom konštantnom napätí. Ďalej je sledovaný vplyv obmedzenia prietoku len v niektorých častiach prietokového prierezu na merané odpory drôtov. Na základe nameraných dát je možné určiť rýchlostné pole tekutiny. Zmerané výsledky sú porovnávané s teoretickými hodnotami vypočítanými pomocou vytvoreného matematického modelu popísaného senzoru.

Numerická studie vlivu textury na smáčivost povrchu výplně separačních kolon

Adéla Kavalová (B2)

Školitel: Ing. Martin Isoz, Ph.D.

Separační kolony se vyznačují vysokou energetickou spotřebou, která ve vyspělých ekonomikách (USA či EU) činí zhruba 3 % z celkové spotřeby energie. Jednou z možností snížení energetické náročnosti separačních kolon je zintenzivnění přestupu hmoty, kterého lze dosáhnout například zvýšením velikosti plochy mezifázového rozhraní. V prezentované práci se snažíme ověřit, zda aplikace textury na strukturovanou výplň vede ke zvýšení smočené plochy výplně a tedy ke zvětšení plochy mezifázového rozhraní dostupného pro přestup hmoty. Byl vyvinut výpočetní model dvoufázového proudění ve zjednodušené geometrii odpovídající nakloněné desce. Vyvinutý model byl pro případ hladké desky validován na experimentálních i numerických datech dostupných v literatuře. Následně byl model rozšířen o přidání textury a byl studován vliv textury na smáčivost povrchu desky. Výsledky provedené studie potvrzují běžnou průmyslovou praxi i závěry jiných studií - smáčivost povrchu desky je na textuře značně závislá. Zdá se však, že aplikace textury není výhodná pro všechny uvažované intenzity smáčení. V další práci se zaměříme na optimalizaci textury za účelem dosažení co nejlepšího smočení výplně za běžných provozních podmínek.



Improving electrostatic dust removal by contact charging of dust particles

Karel Kubeš (B3)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

In the modern era there are certain surfaces that need to be periodically cleaned such as solar panels, space equipment or glass surfaces in general. This research is focused on improving the concept of an electrodynamic dust shield (EDS), a device based on the electrostatic removal of charged particles. When a dust particle gets in contact with mentioned surfaces, there is a chance that the particle sticks to the surface because of the electrostatic forces. This phenomenon is called triboelectrification – when the substances in contact gain electrical charge due to friction. The efficiency of this removal method can be increased by the control of charge on dust particles. In this work electrospray is used to create polymer nanolayers. These layers are further examined under the SEM microscope and their effect on the charging of dust particles is observed. The aim is to find the layers which enable us to control the surface charge of sand dust. In an ideal case all dust particles which end up in contact with examined surface should have a charge with the same polarity; therefore an electrical pulse from electrodes on the sides should remove dust sideways out of the surface. This technique can be applied in the photovoltaic industry and space exploration.

Vývoj aparatury pro měření filtrační účinnosti automobilových filtrů pevných částic

Karel Pecha (B3)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

I přes velké společenské, politické a legislativní tlaky na zavádění elektromobilů zaujímají automobily se spalovacími motory stále drtivou většinu osobní dopravy. Při chodu spalovacího motoru vznikají stopy plyných škodlivin (CO , C_xH_y , NO_x , ...) i pevných částic (popílek, saze). Konkrétně saze, zejména jejich nejmenší částice, mohou být pro člověka velmi nebezpečné. Jedním z rizik je například usazování částic v plicních sklípcích či jejich pronikání do krevního řečiště, což může způsobit i rakovinu. Cílem této práce je sestavení nové laboratorní aparatury a následné testování filtrační účinnosti automobilových filtrů pevných částic. Aparatura je složena z generátoru částic, který vytváří jejich přesně definované množství a rozměr díky hoření směsi o známém poměru propanu a vzduchu. Směs částic dále vstupuje do jednoho ze dvou paralelně zapojených trubkových reaktorů, ve kterých jsou uloženy vzorky filtrů. Po průchodu reaktorem směs odchází do čítače pevných částic, díky kterému je možno vyhodnotit filtrační účinnost. Sestavená aparatura umožňuje testování průmyslových vzorků i prototypů katalytických filtrů nově připravených v naší výzkumné laboratoři.

Příprava optimálních nanoformulací pro léčiva kolorektálního karcinomu

Martin Roudný (B3)

Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Během přípravy nových léků se výrobce musí vypořádat s problémy účinných látek ohledně jejich stability, rozpustnosti či schopností bioabsorbce. Při léčbě kolorektálního karcinomu je tím problémem působení cytostatik systémově po celém těle, což může mít za následek vypadávání vlasů či selhání ledvin. Ideálně by tedy použité léčivo mělo působit pouze lokálně, v místě postižení, tak aby nedocházelo k postižení okolních orgánů léčbou. Řešením tohoto problému může být enkapsulace účinné látky do vhodného nosiče, za vzniku takzvané nanofomulace. Takovým nosičem můžou být liposomy, což jsou kulovité vezikuly tvořené fosfolipidovou dvojvrstvou, do které je možné účinnou látku zapouzdřit. Jinou nanoformulací jsou částičky krystalické látky, zmenšené řádově na desítky či stovky nanometrů, zvané nanokrystaly. Tématem této práce je příprava optimálních nanoformulací pro dvojici účinných látek 5-fluorouracil a irinotecan. Hydrofilní 5-fluorouracil se podařilo zapouzdřit do liposomů a změřit zapouzdřené množství. Z lipofilního irinotecanu byly mletím připraveny nanokrystaly, pro jejichž stabilizaci byly využity jak polární, tak i nepolární stabilizátory a bylo identifikováno jejich vhodné složení.

Studium vlivu viskozity na chování bublin ve vodných roztocích glycerolu

Vladislav Shirokov (B3)

Školitel: doc. Dr. Ing. Pavlína Basařová

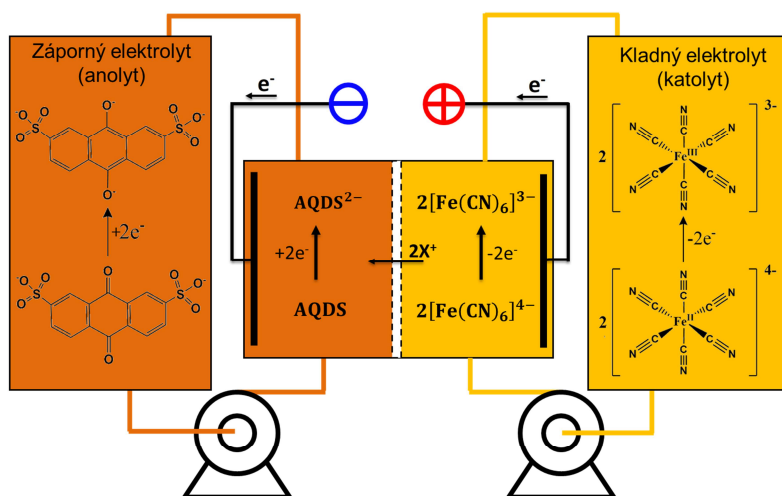
Detailní popis chování bublin je velmi důležitý při různých chemicko-inženýrských procesech, např. v probublávaných reaktorech, kolonách nebo fermentorech. Znalost tvaru a rychlosti bublin, typu cirkulace na povrchu bubliny, stejně jako znalost fyzikálních vlastností kapalné vsádky (viskozita, hustota, povrchové napětí) je nutnou podmínkou pro správný popis a modelování hydrodynamiky celého systému. Ve velkých zařízeních není možné sledovat jednotlivé bubliny, proto se výzkum zaměřuje na chování izolované bubliny a shluku několika bublin. Cílem této práce bylo experimentální studium chování shluku bublin ve zředěných vodných roztocích glycerolu o rozdílné viskozitě. Byl studován vliv viskozity, přítomnosti povrchově aktivních látek a charakteru režimu proudění plynu na velikost, tvar a rychlost bublin. Experimentálně bylo zjištěno, že při koncentracích glycerolu do 25 hm.% viskozita nemá zásadní vliv na dynamiku bublin, jak se původně očekávalo. Naopak významný vliv má rychlost vstupujícího plynu. Naměřené výsledky výborně korelují s režimy proudění na reálné bublané koloně.

Vliv protiiontu na elektrochemické vlastnosti sulfonovaných derivátů chinonů pro redoxní průtočné baterie

Martin Spurný (B3)

Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Obnovitelné zdroje zaujímají čoraz větší podiel v produkci elektrickej energie. Tento spôsob produkcie však v mnohých prípadoch prináša problémy v podobe nestabilných dodávok do elektrickej siete, čo vyžaduje efektívne uskladňovanie takto vyrobenej energie. Jedným z potenciálnych riešení je využitie redoxných prietokových batérií (RFB) na báze organických zlúčenín. Disulfónované antrachinónové soli (AQDS) sú vhodnými kandidátmi na redoxnú aktívnu látku pôsobiacu v negatívnom elektrolyte RFB. Cieľom tejto práce je elektrochemická charakterizácia 2,7-AQDS a 2,6-AQDS s rôznymi protiiónmi spolu so štúdiom chemickej stability a rozpustnosti vo vodných elektrolytoch s neutrálnym pH. Elektrochemická charakterizácia spočívala vo voltametrických meraniach na statickej a rotujúcej diskovej elektróde zo skleného uhlíku. Z týchto meraní boli pomocou špeciálne vyvinutého matlabovského skriptu vyhodnotené relevantné parametre (formálny redoxný potenciál, difúzny koeficient, kinetické parametre). Rozpustnosť v príslušnom síranovom elektrolyte bola vyhodnocovaná analýzou nasýtených roztokov v UV-VIS spektrometri. Najperspektívnejšie látky boli ďalej testované v laboratórnom prietokovom poločlánku, kde prebiehalo testovanie stability v súvislosti s cyklickým nabíjaním/vybíjaním.



In vitro farmakokinetika nanočásticových nosičů léčiv

Štěpánka Staňková (B3)

Školitel: Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.

Konvenční onkologické terapie nejsou cílené, působí na celý organismus a jsou proto doprovázeny mnoha nežádoucími účinky. Řešením může být využití nanočásticových nosičů, které umožní doručení léčiva přímo do nádoru. Sniží se tak množství nežádoucích účinků a zvýší se efektivita léčby. Po intravenózní aplikaci jsou ale všechny nanočástice z velké míry rozpoznávány imunitním systémem a vychytávány imunitními buňkami – makrofágy – v procesu zvaném fagocytóza, který je nutné pro úspěšné doručení do nádoru minimalizovat. V rámci této práce byly použity křemičité nanočástice pokryté hydrofilním polymerem na bázi poly(*N*-hydroxypropyl methakrylamidu) (pHPMA), který zabraňuje adsorpci plazmatických proteinů na povrch nanočástic, čímž snižuje pravděpodobnost imunitní reakce. Předkládaná práce studuje vliv množství pHPMA na rozsah fagocytózy nanočástic makrofágy J774A.1. Nanočástice byly dále modifikovány protilátkou IgG M75, která specificky interaguje s karbonylaminohydrolázou IX (CA IX), což je transmembránový protein, který je preexprimován na povrchu mnohých hypoxických nádorů (např. kolorektální adenokarcinom, buněčná linie HT-29). Práce se v tomto směru zaměřuje na studium kinetiky navazování nanočástic na buňky nesoucí antigen CA IX a studuje vliv dávky nanočástic na tento proces.

Chemické inženýrství IV

MÍSTO: B 03

KOMISE

prof. Dr. Ing. Juraj Kosek (předseda)

RNDr. Ivan Řehoř, Ph.D.

Ing. Adrian Žák

Ing. Stanislav Chvíla

Ing. Marek Václavík (Škoda Auto)

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 [Bc. Jan Duras](#) (M1, RNDr. Ivan Řehoř, Ph.D.)

Modular hydrogel microrobots

08:50 [Bc. Petr Fatka](#) (M1, Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D.)

Glukanové částice coby bioaktivní excipient

09:10 [Bc. Tereza Hodná](#) (M1, doc. Ing. František Rejl, Ph.D.)

Experimentální ověření účinnosti odstranění kadmia z Ni-Cd akumulátorů při recyklaci

09:30 [Bc. Anna Hojgrová](#) (M1, Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.)

Vyhodnocení závislosti $k_G a$ na difuzním koeficientu na sypané výplni NeXRing 0.7

09:50 [Bc. David Horký](#) (M1, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)

Can we answer the electrostatic charging issues with a nano-scale surface characterization?

10:30 [Bc. Kateřina Jerhotová](#) (M1, doc. Dr. Ing. Pavlína Basařová)

Odhad míry deformace bublin ve viskózních vsádkách

10:50 [Bc. Dominika Moravcová](#) (M1, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Predpoveď tlakovej straty filtra na základe obrazovej analýzy tomografických dát

11:10 [Bc. Klára Odehnalová](#) (M1, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.)

Nanokompozity pro transport antimikrobiálních látek

11:30 [Bc. Michal Smoleň](#) (M1, doc. Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.)

Vliv gravitace na koncentrační profily v diluátovém kanálku elektrodialyziho mikrozařízení

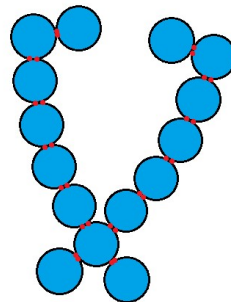
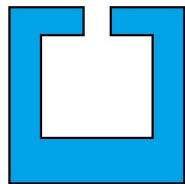
vyhlášení výsledků

Modular hydrogel microrobots

Bc. Jan Duras (M1)

Školitel: RNDr. Ivan Řehoř, Ph.D.

The aim of my project is to produce functional modular microrobots composed of soft responsive materials. Nowadays conventional robotics utilize mainly hard materials along with electronic components to create robots that are capable of doing a desired task. As capable as they may be on the macroscale, the complicated designs of current robots make them unsuitable for miniaturization. Recently, our research group introduced a prototype of a microrobot made entirely out of a soft, squishy material called hydrogel. This robot can perform simple tasks like pushing objects to a desired location. So far, however, for every task a specific robot design has to be made. The goal of this project is to change the paradigm one robot - one task by having universal steerable microrobots that would act as building blocks for any design. This would allow us to conveniently assemble a microrobot on sight without the need of having to design one beforehand. I have developed a method to chemically attach the robots together resembling a stitch or a weld. As a universal microrobot shape, I use circular discs to create larger structures.

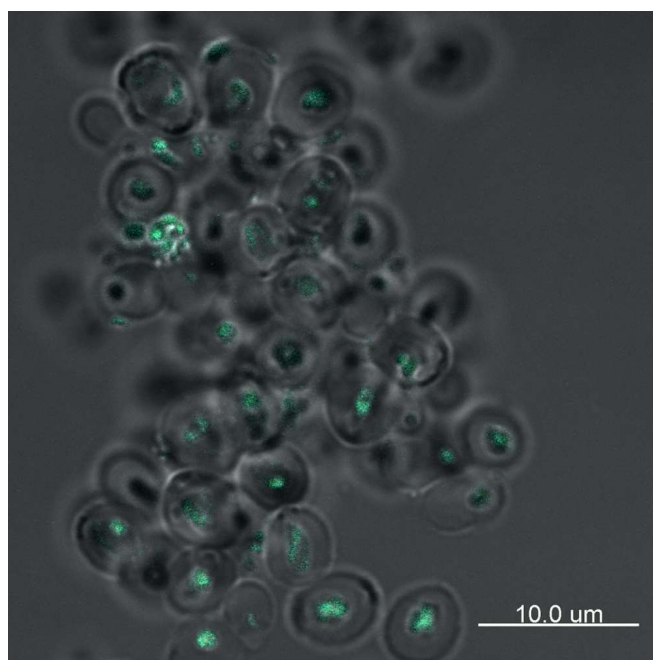


Glukanové částice coby bioaktivní excipient

Bc. Petr Fatka (M1)

Školitel: Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D.

Glukany jsou polysacharidy, které je možné nalézt např. v buněčných stěnách kvasinek. Vyznačují se schopností stimulovat imunitní odpověď organismu, což z nich činí potenciálně výhodný materiál pro různorodé aplikace, např. doručování léčiv. Z původních kvasinkových buněk je možné několikakrokovou extrakcí získat duté, porézní částice o velikosti 2-5 μm , jejichž stěny jsou tvořeny právě z glukanu. Přestože v literatuře je produkt tohoto postupu běžně popisován jako duté částice, naše výsledky (snímky z konfokálního mikroskopu i TEM snímky) naznačují přítomnost jádra uvnitř částic. Cílem práce je nyní získat informaci o tom, z čeho se jádro v částicích skládá (odhadujeme především proteiny) a jak opakovatelně připravovat částice tak, aby toto jádro neobsahovaly. Aby bylo možné jádro částic charakterizovat, byly částice podrobeny mletí a původní i namleté částice byly analyzovány pomocí ATR-FTIR, SEM a konfokálního mikroskopu. Získaná data ukazují, že při prvních pokusech se nepodařilo částice rozbít dostatečně, došlo pouze k deformaci částic. Bylo proto třeba optimalizovat proces mletí pro dosažení rozbití stěny částic. Informace získané analýzou jádra budou dále použity pro úpravu postupu přípravy, případně jeho přepracování tak, aby bylo možné připravit duté částice bez jádra.



Experimentální ověření účinnosti odstranění kadmia z Ni-Cd akumulátorů při recyklaci

Bc. Tereza Hodná (M1)

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

Ni-Cd akumulátory se díky vysoké odolnosti proti úplnému vybití dodnes používají ve speciálních aplikacích a předpokládá se, že budou v oběhu ještě nejméně třicet let. Jejich používání je problematické z důvodů toxicity kadmia pro životní prostředí a akumulátory je po skončení životnosti nutné recyklovat s důrazem na téměř kompletní zachyt kadmia. Jednou z možností recyklace je pyrometalurgické zpracování v redukční atmosféře, při které je kadmium odváděno z retorty pece ve formě par a je shromažďováno v kondenzátoru. Zpracovaný materiál je hodnotný, neboť obsahuje velké množství cenného niklu. Tento projekt se zabývá určením podmínek pyrolýzy (času a teploty) pro dostatečné odstranění kadmia z elektrod vyrobených ze sintrovaných vláken. Analýza surových a zpracovaných elektrod se po převedení do roztoku provádí pomocí atomové absorpční spektroskopie, zatímco čistota kadmia je ověřována rentgenovou fluorescencí. Výsledky analýz poskytují informaci nejen o dostatečnosti zvolených podmínek pro odstranění kadmia ze suroviny, ale i dosažené výtěžky niklu a kadmia.

Vyhodnocení závislosti k_{Ga} na difuzním koeficientu na sypané výplni NeXRing 0.7

Bc. Anna Hojgrová (M1)

Školitel: Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.

Pro dosažení co největšího kontaktu plynné a kapalné fáze při absorpcích či destilacích se jako internály kolon využívají různé druhy výplní. Každá výplň je mimo jiné charakterizována svými transportními charakteristikami, které poměrně výrazně závisí na systému, na kterém se měří. Pro přenos transportních charakteristik výplní naměřených na jednom systému na systém jiný se pro objemové koeficienty přestupu hmoty v plynné fázi (k_{Ga}) využívají semiempirické korelace. Jedním z důležitých parametrů je závislost k_{Ga} na difuzním koeficientu plynné složky. Hodnota mocninné závislosti k_{Ga} na difuzním koeficientu se uvádí v literárních korelacích na 0,666. Cílem této práce bylo ověřit hodnoty mocniny difuzního koeficientu v těchto korelacích měřením na dvou systémech a jedné sypané výplni. Měření probíhala v návaznosti na bakalářskou práci na sypané výplni čtvrté generace NeXRing #0.7, tentokrát chemisorpcí NH_3 do roztoku H_2SO_4 . Díky datům získaných na systému vzduch- SO_2 /voda-NaOH a vzduch- NH_3 /voda- H_2SO_4 je možné vyhodnotit, jak hodnoty k_{Ga} závisí na difuzivitě plynné složky. Ta vychází až násobně nižší, než je běžně používáno v literárních korelacích pro výpočet k_{Ga} . Tento fakt by mohl zásadně ovlivnit přenositelnost hodnot k_{Ga} mezi systémy.

Can we answer the electrostatic charging issues with a nano-scale surface characterization?

Bc. David Horký (M1)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Electrostatic charging of material surfaces during mutual friction is a well-known phenomenon. It may cause various problems in industry and everyday life as well. For example, the unpredictable charging behaviour of plastics influences the efficiency of the triboelectric separator of plastic waste. For centuries it has been thought that the surface charge polarity is affected only by the chemical structure of objects. However, recent studies show, not only the bulk properties but also the surface topography play an essential role in the mechanism of charging. In our research, we focused on the evaluation of nano-scale roughness on the resulting charge distribution on the surface of tribocharged objects. In our experiments, an Atomic Force Microscopy was used, and a whole new methodology utilizing it was developed, enabling us to measure the distribution of charge and its value. An effect of the topography was observed, as the charge was not spread equally but usually accumulated in various valleys and other lower places. Moreover, the dependence of the total value of surface charge on the pressure during friction charging was observed. Knowledge gained during this research may be used both in mathematic models that predict the charging mechanism or in the industrial sphere.

Odhad míry deformace bublin ve viskózních vsádkách

Bc. Kateřina Jerhotová (M1)

Školitel: doc. Dr. Ing. Pavlína Basařová

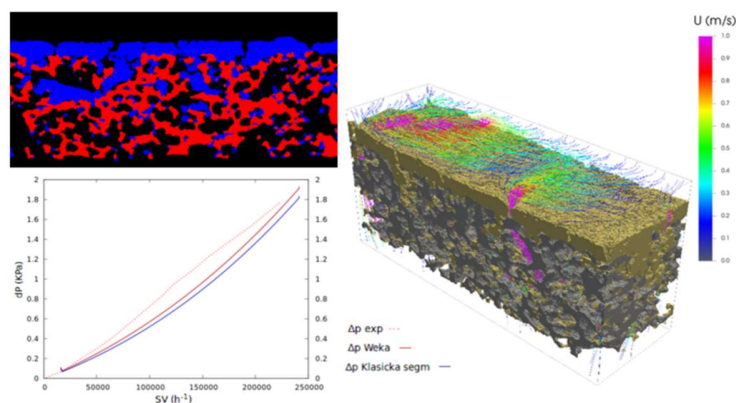
Chování bublin ve viskózních kapalinách, např. v probublávaných kolonách či fermentorech, je často simulováno pomocí vodných roztoků glycerolu. Poznatky pak slouží k určení doby zdržení bubliny v reaktoru, popisu vlastností fázového rozhraní a nakonec k popisu transportu hmoty přes fázové rozhraní. Základem pro popis dynamiky bublin v probublávaných kolonách je studium vlivů působících na samostatnou bublinu stoupající přímo vzhůru nehybnou kapalinou. Rychlost bubliny je dána velikostí bubliny, fyzikálními vlastnostmi kapaliny, především viskozitou, a je rovněž významně ovlivněna povrchově aktivními nečistotami v roztoku. Rychlost bubliny závisí ale i na jejím tvaru. Bubliny stoupající ve viskózních roztocích zůstávají sférické a naopak v neviskózních roztocích dochází u větších bublin k deformacím. Cílem práce bylo na základě naměřených experimentálních dat o velikosti, tvaru a rychlosti bublin v různě koncentrovaných roztocích glycerolu navrhnout model pro odhad deformace bublin. Byly testovány odhady závislé na Weberově, Eötvösově a Reynoldsově bezrozměrném kritériu. Na základě výsledků byl navržen nový model využívající Weberovo kritérium. Byla vyhodnocena chybovost navrženého modelu.

Predpoved' tlakovej straty filtra na základe obrazovej analýzy tomografických dát

Bc. Dominika Moravcová (M1)

Školiteľ: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Spaľovaním uhľovodíkového paliva v motoroch automobilov dochádza k nežiaducemu uvoľneniu toxických látok do ovzdušia. V snahe splnenia emisných predpisov a zredukovania množstva výfukových plynov a pevných častíc obsiahnutých vo výsledných spaliniach sa používa katalytický filter. K určeniu celkovej účinnosti filtra je v tejto práci využité viacúrovňové modelovanie založené na dátach z röntgenovej mikrotomografie (XRT). Výsledné 2D rezy získané z XRT boli podrobené dvom typom segmentácií – Klasická a Weka segmentácia. Výsledné segmentované obrázky (viď Obr. 1a) boli použité v 3D modeli toku v stene filtra (viď Obr. 1b) s cieľom získania údajov o tlakovej strate. Z priemernej hodnoty tlakovej straty sa vypočíta permeabilita steny filtra, ktorá sa dosadí ako vstupný parameter do 1D modelu kanálíka. Výsledkom tohto viacúrovňového modelu je závislosť tlakovej straty celého zariadenia na prietoku (viď Obr. 1c), ktorá je priamo porovnateľná s experimentálnymi dátami. Cieľom tejto práce bolo vyhodnotenie vplyvu segmentačných techník na výslednú tlakovú stratu, ich porovnanie s hodnotami experimentov a zhodnotenie perspektívy jednotlivých segmentácií k ďalšiemu využitiu.



Obr. 1: a) snímka výrezu kanálíka filtra z XRT mikroskopu po aplikácii Weka segmentácie, b) 3D model steny katalytického filtra s vyznačením toku a rýchlosti c) graf závislosti tlakovej straty filtra na rôznych prietokoch pre simulované a namerané (exp) údaje.

Nanokompozity pro transport antimikrobiálních látek

Bc. Klára Odehnalová (M1)

Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Konvenční metody podání léčiv nejsou vhodné pro všechny látky, jelikož při transportu krevním oběhem může dojít k působení těchto léčiv i na zdravé tkáně. Z tohoto důvodu je vhodné pro léčiva využít nosiče. Těmi jsou například liposomy, sférické vezikuly, které jsou nejčastěji uměle připravovány z fosfolipidů. Jejich velkou výhodou je zabránění předčasnému a umožnění řízeného uvolnění léčiva. Liposomy se ve farmacii již používají, ale pouze asi pro 20 léčiv. Jedním z důvodů je zapouzdření jen velmi malých koncentrací. Možný způsob, jak vylepšit vlastnosti liposomů a rozšířit možnosti jejich použití, je využití porézních nanočástic oxidu křemičitého. Tyto částice umožní adsorbování většího množství léčiva a následným zapouzdřením do liposomů zabráni předčasnému úniku léčiva. Tato práce se zabývá optimalizací přípravy těchto nanokompozitů LCSNs (lipid-coated silica nanoclusters). Dále přípravou LCSNs s modelovými látkami (hydrofilního i hydrofobního charakteru) a následným určením množství vyloučených modelových látek z LCSNs. Pro hydrofobní modelovou látku se podařilo zapouzdřit mnohonásobně větší množství než do liposomů, které se již ve farmacii používají. Poté byla do LCSNs úspěšně zapouzdřena i zvolená účinná látka a její přítomnost byla identifikována bakteriálními testy.

Vliv gravitace na koncentrační profily v diluátovém kanálku elektrodialyziho mikrozařízení

Bc. Michal Smoleň (M1)

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

Cílem práce je experimentální studium procesu elektrodialýzy v zařízeních vyrobených pomocí mikrofluidních technologií. Tato zařízení umožňují například rekonstruovat prostorové profily veličin, které hrají důležitou roli v daném separačním procesu. V této práci se zaměříme na ověření koncentračních polí ustavujících se v diluátovém kanálku při aplikaci různých proudových hustot. Během prvotních studií zaměřených na koncentrační profily podél diluátového kanálku (1D profily) bylo zjištěno, že naměřená data nesplňují celkovou materiálovou bilanci systému, a predikují odsolení vyšší než 100 %. Abychom vysvětlili příčinu tohoto pozorování, sestavili jsme nové modifikované elektrodialyzi zařízení umožňující studium koncentračních profilů ve více rozměrech (3D). Naměřené koncentrační profily ve 3D jasně ukázaly skutečnost, že se koncentrace iontových složek roztoku mění významně nejen podél kanálku, ale také ve směru gravitačního pole. Koncentrace u dna odsolovacího kanálku byla za některých podmínek až třikrát vyšší než u horní stěny kanálku. Rozdíl v hustotě roztoku dává možnost vzniku volné konvekce, která přispívá k přenosu iontů především v nadlimitní oblasti.

Chemické inženýrství V

MÍSTO: B III

KOMISE

prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D. (předseda)

Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Ing. Martin Bureš

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

prof. Ing. Lucie Obalová, Ph.D. (VŠB)

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 [Bc. Adam Bouz](#) (M1, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)

Modelování termodynamiky elektrolytů a polymerních systémů

08:50 [Bc. Lukáš Kamenský](#) (M1, Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.)

Kontrolované uvolňovanie liečiv z magnetolipozómov pomocou rádiovfrekvenčného ohrevu

09:10 [Bc. Filip Keller](#) (M1, Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.)

Predikce mechanických vlastností 3D rekonstruovaných biopolymerů pro medicínské aplikace

09:30 [Bc. Jan Kotek](#) (M1, doc. Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.)

Elastomer jako pomocný materiál pro výrobu mikrofluidních struktur

09:50 [Bc. Matyáš Marek](#) (M1, Ing. Petr Mazúr, Ph.D.)

Studium elektrochemické životnosti uhlíkových plstěných elektrod vanadové redoxní průtočné baterie

10:30 [Bc. Kateřina Nyklíčková](#) (M1, Ing. Petr Stavárek, Ph.D.)

Hydrodynamická charakterizace 3D tištěných náplní zkrápěného reaktoru

10:50 [Bc. Eliška Pazderková](#) (M1, RNDr. Ivan Řehoř, Ph.D.)

Enkapsulace buněk do litografických mikrogelů

11:10 [Bc. Lucie Pilíková](#) (M1, doc. Dr. Ing. Pavlína Basařová)

Odhad tvaru bublin ve vodných roztocích propanolu

11:30 [Bc. Matouš Polák](#) (M1, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Experimentální studie redoxních dějů na povrchu třícestného katalyzátoru

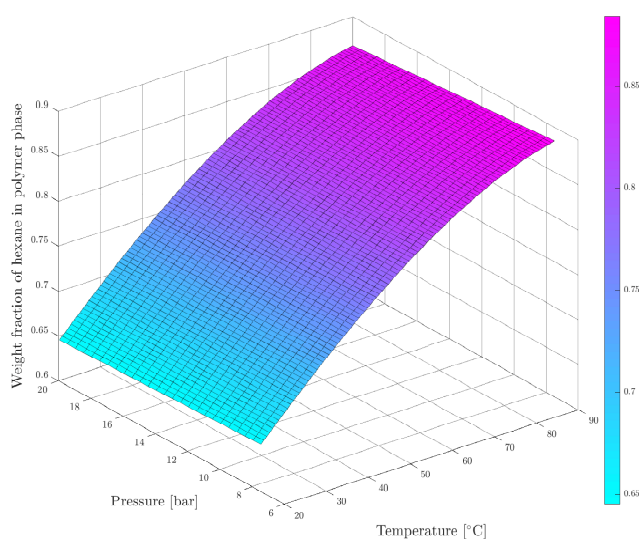
vyhlášení výsledků

Modelování termodynamiky elektrolytů a polymerních systémů

Bc. Adam Bouz (M1)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

The vision of computational chemistry is to move chemistry from the lab to the computer. In our research we focused on theoretical predictions of solubility by thermodynamic description. The ability to create such predictions would benefit, e.g., in the development of today's important technologies for energy storage, where highly non-ideal systems of electrolytes and polymer membranes are present. In the beginning we performed theoretical description of electrolyte solutions by applying Flory-Huggins theory and the use of solubility parameters. One result was a prediction of the water solubility increase of anthraquinone after its sulphonation, another output was a good estimate of the water solubility of benzoic acid. An equation of state derived from the Perturbed-Chain SAFT theory, programmed in the Fortran language, was used to mathematically model phase equilibria in polymer systems. We modelled, among other things, the three-component Polyethylene-Hexane-Nitrogen system, where we were particularly interested in a decrease of the n-hexane solubility in polyethylene as the pressure of the mostly inert gas phase increases. In future work, we want to improve our version of the PC-SAFT EOS so that it can also predict electrolyte systems and electrolytes together with polymers.

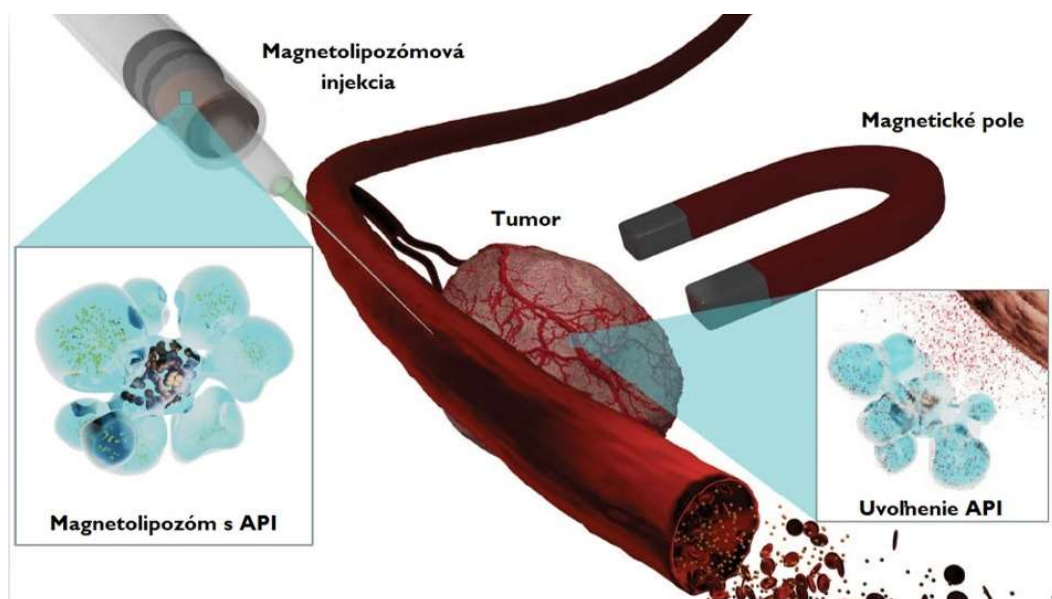


Kontrolované uvoľňovanie liečiv z magnetolipozómov pomocou rádiovfrekvenčného ohrevu

Bc. Lukáš Kamenský (M1)

Školiteľ: Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.

V súčasnosti je drvivá väčšina liečiv podávaná pacientom systémovo, kedy prítomnosť účinných látok v celom organizme podmieňuje potrebné vyššie dávky a možné vedľajšie účinky. Cieľené doručovanie a kontrolované uvoľňovanie liečiv má preto potenciál priniesť zdravotné aj ekonomické benefity. V tomto smere sa ponúka využitie magnetolipozómov, ktoré kombinujú lipozómy a magnetické nanočastice do jedného submikrónového kompozitu. Cieľom práce je príprava magnetolipozómov s hydrofóbnymi nanočasticami železa a s vybranou liečivou látkou – norfloxacinom –, schopných makroskopického pohybu v magnetickom poli a reakcie na vonkajší podnet kontrolovaným uvoľnením liečivej látky. Práca študuje vlastnú prípravu magnetolipozómov a následne ich transportné vlastnosti. Diskutuje aj vzťahy medzi schopnosťou rádiovfrekvenčného ohrevu a zložením, veľkosťou a koncentráciou magnetolipozómov v suspenzii. Ďalej sa zameriava na testovanie uvoľňovania norfloxacinu použitím rádiovfrekvenčného ohrevu. Magnetolipozómy, unikátne schopné rádiovfrekvenčného ohrevu, boli opakovateľne pripravené v rozpätí veľkostí 200 – 800 nm, s vysokým obsahom železa 0,1 – 0,3 mg/mg fosfolipidov.

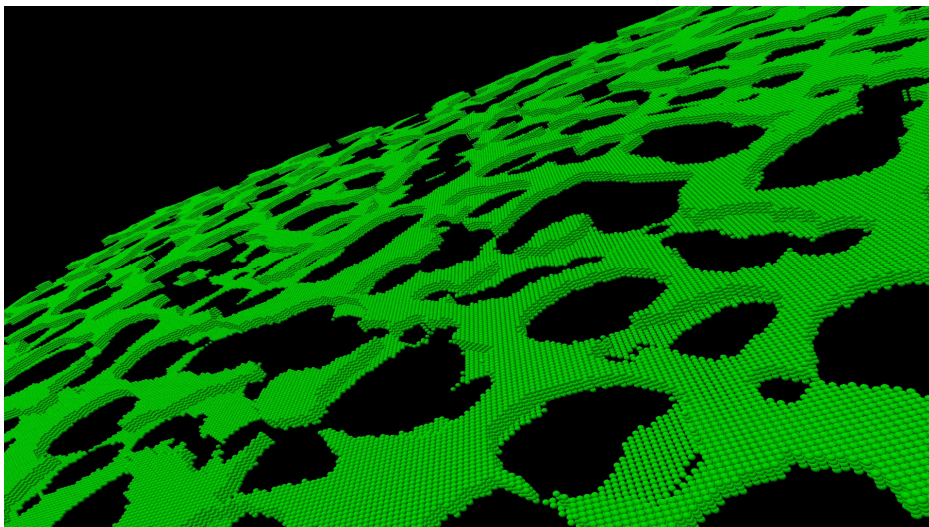


Predikce mechanických vlastností 3D rekonstruovaných biopolymerů pro medicínské aplikace

Bc. Filip Keller (M1)

Školitel: Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.

Hyaluronan je biopolymer, který se běžně vyskytuje ve velkém množství v kůži a je součástí mnoha typů tkání. Je jednou z nejdůležitějších složek mezibuněčné hmoty, neboť tvoří strukturu, do níž jsou zakomponovány řetězce kolagenu a dalších bílkovin. Velký potenciál tohoto biopolymeru se nachází v hojení ran. Jeho aplikace dokáže regulovat zánět, urychlovat regeneraci poškozené tkáně a v důsledku lepšího ukládání kolagenu zůstanou po zhojení menší jizvy. Cílem této práce je predikovat mechanické vlastnosti filmů vytvořených z hyaluronanu v závislosti na jejich prostorově 3D porézní mikrostruktuře zrekonstruované ze snímků pořízených konfokální mikroskopií. V rámci příspěvku jsou představeny a diskutovány jednotlivé kroky vyvinuté metodiky, tedy (i) zpracování mikroskopických snímků a rekonstrukce 3D porézní morfologie materiálu, (ii) převod „mesh-based“ morfologie do „mesh-free“ reprezentace ve formě modelu diskrétních elementů (DEM), (iii) DEM modelování namáhání rekonstruovaného materiálu. Práce je řešena ve spolupráci s firmou Contipro a měla by přispět k optimalizaci jejích produktů.



Elastomer jako pomocný materiál pro výrobu mikrofluidních struktur

Bc. Jan Kotek (M1)

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

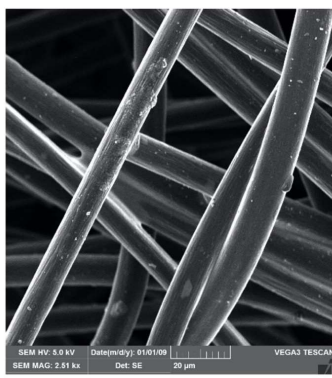
Tento příspěvek se zaměřuje na vývoj metod k přenesení mikrostruktur z matrice vyrobené z fotorezistu SU8 do nepružné odlévací pryskyřice. Fotorezist SU8 je široce používán pro výrobu mikrofluidních systémů, což pramení z jeho vynikajících kreslicích schopností a snadnosti kopírování struktur do pružných odlévacích hmot, např. polydimethylsiloxanu (PDMS). Kopírování struktur z SU8 do termoplastů (např. plexisklo) ovšem představuje poměrně náročný úkol. Abychom byli schopni přenášet tyto struktury i do termoplastů, vyvíjíme technologie, které umožňují (i) přenos struktur z bloku PDMS do jiného bloku PDMS a (ii) přenos těchto mikrostruktur do nepružné odlévací pryskyřice. Zatímco krok (i) umožňuje vytvářet pozitivní i negativní fluidní struktury, krok (ii) tvorbu razidla pro strukturování termoplastů. Úspěšná metoda přenosu struktur z PDMS na jiné PDMS je založena máčení vzorového bloku PDMS v hexamethyldisilazanu (HMDS) a následném odlití nového PDMS vůči takto povrchově modifikovanému bloku PDMS. Tento příspěvek popisuje hledání optimálních podmínek povrchové modifikace, především času a způsobu provedení máčení. Za účelem tvorby razidla pro metodu vytlačení za tepla se hledá vhodná odlévací (epoxidové) pryskyřice. Ta má umožnit opakovatelný přenos mikrostruktur do termoplastů.

Studium elektrochemické životnosti uhlíkových plstěných elektrod vanadové redoxní průtočné baterie

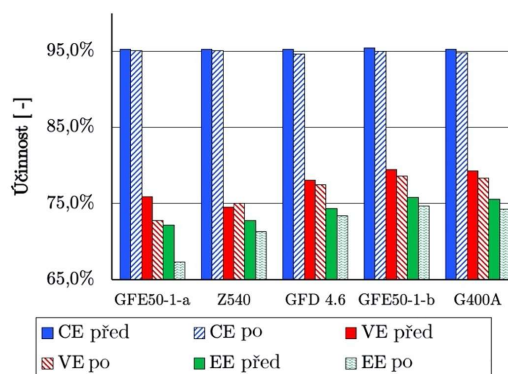
Bc. Matyáš Marek (M1)

Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Současná doba čím dál více poptává technologie pro uchovávání elektrické energie. Jedním ze slibných řešení jsou vanadové redoxní průtočné baterie, díky jejich nezávislosti výkonu na kapacitě, ekonomické dostupnosti a mimořádné životnosti. Deaktivace záporné elektrody těchto baterií je jedním z hlavních mechanismů snižování účinnosti a životnosti baterie a je tudíž důležité problematice porozumět, pro vylepšení jejich aplikace do budoucna. V tomto příspěvku jsme se zaměřili na studium životnosti vybraných komerčně dostupných uhlíkových plstěných elektrod za provozních podmínek laboratorního článku baterie. Experimenty sestávaly z kombinace std. charakterizačních metod jakými jsou nabíjecí a vybíjecí galvanostatické cyklování, elektrochemická impedanční spektroskopie a zátěžové křivky. Takto získané elektrochemické parametry byly dále srovnány s výsledky *ex situ* charakterizačních testů pomocí SEM, BET a cyklovoltametrických měření. U většiny testovaných plstí odhalily střednědobé (10-ti denní) bateriové testy mírný pokles energetické a napěťové účinnosti baterie, v průměru o 1.5 % (viz graf 1) v důsledku nárůstu odporu proti přenosu náboje elektrodových dějů až o stovky procent vůči výchozímu stavu.



Obrázek 1. Snímek uhlíkatých vláken plsti GFE501a pořízený SEM, po zatěžovacím testu v laboratorní cele, při zvětšení 2.5kx, 5 kV urychlovací napětí, pomocí sekundárních elektronů



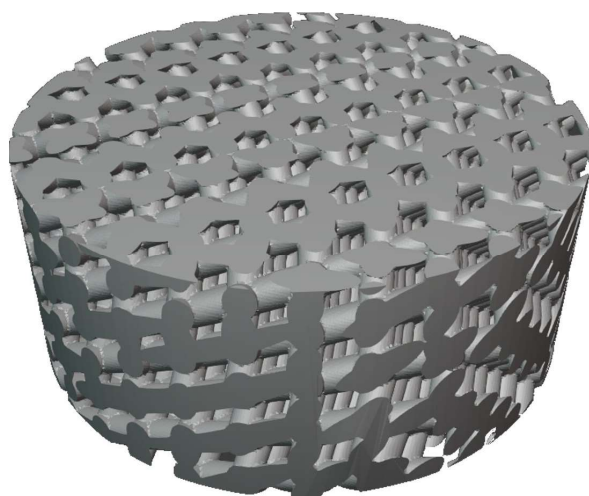
Graf 1. Coulombická (CE), napěťová (VE) a energetická účinnost (EE) vybraných plstí před a po zátěžovém experiment. Experimenty byly provedeny v laboratorním článku při 50% stavu nabití, 20 °C, 40 ml min⁻¹

Hydrodynamická charakterizace 3D tištěných náplní zkrápěného reaktoru

Bc. Kateřina Nyklíčková (M1)

Školitel: Ing. Petr Stavárek, Ph.D.

Třífázové reaktory se zkrápěným ložem mají mnoho uplatnění v průmyslu, zejména pak v organické technologii. Zkrápěné lože představuje uspořádání, kdy kapalina a plyn proudí přes lože souproutně shora dolů. Struktura lože, které bývá pokryto katalyzátorem, je z hlediska heterogenní katalýzy velmi důležitá. Optimální poměr mezi specifickým povrchem struktury a generovanou tlakovou ztrátou, je zásadní při návrhu reaktoru. V průmyslu se používají lože tvořené z náhodně sypaných částic, jejichž výhodou je snadné zavádění do reaktoru. Ty ovšem přinášejí i nevýhody v podobě vysoké tlakové ztráty, horší efektivity využití povrchu struktury a odvodu tepla v radiálním směru. Tyto nevýhody mohou být eliminovány návrhem vhodné geometrie lože pomocí počítačového softwaru a následným využitím technologie 3D tisku. Tato práce se zabývá charakterizací struktury lože, tvořené z tzv. periodicky se opakujících otevřených struktur, z pohledu dvoufázového toku plyn-kapalina. Cílem je volbou vhodné geometrie dosáhnout vysokého specifického povrchu, rovnoměrné distribuce toku a minimalizovat tlakovou ztrátu. Experimentální část práce je zaměřena na měření vhodných hydrodynamických veličin, tedy tlakové ztráty a zadrže kapaliny. Vyhodnocená experimentální data jsou porovnána s klasickými typy náplní.

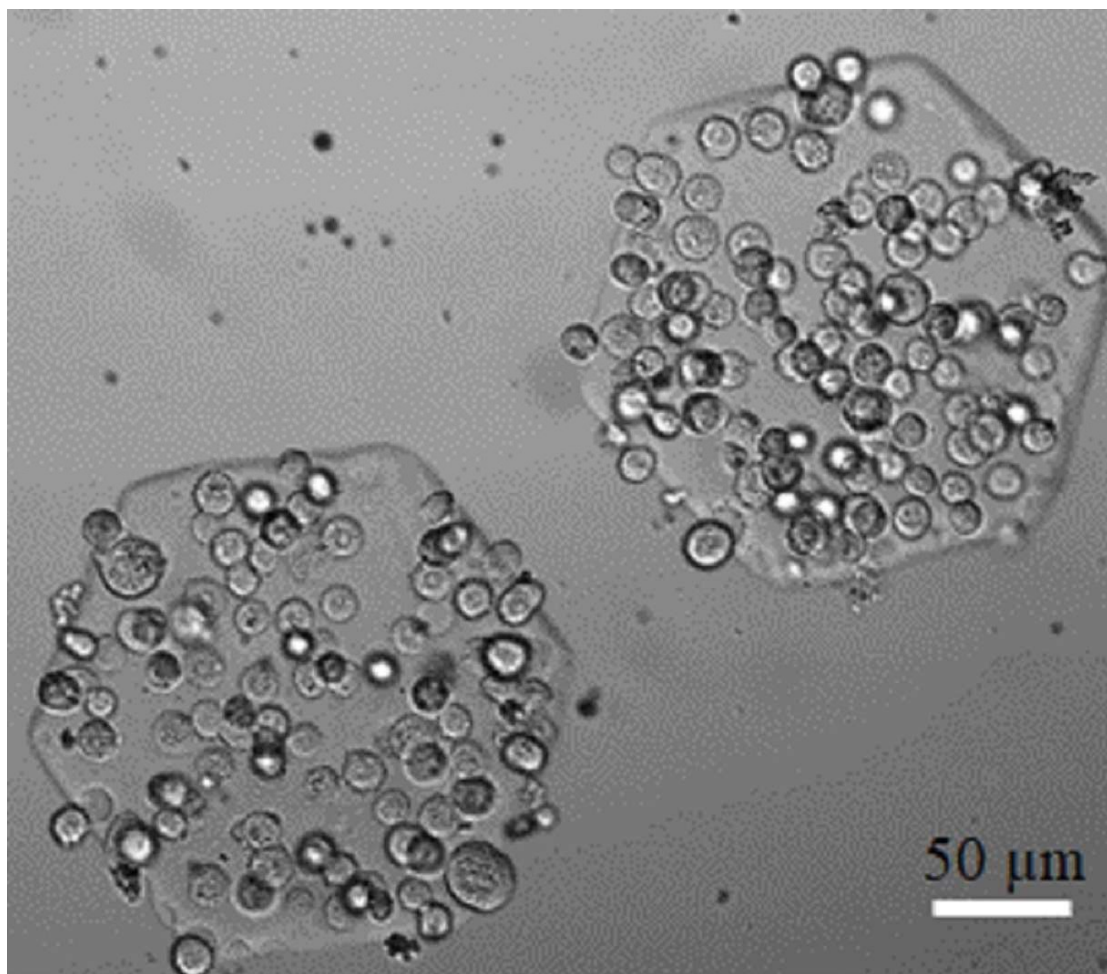


Enkapsulace buněk do litografických mikrogelů

Bc. Eliška Pazderková (M1)

Školitel: RNDr. Ivan Řehoř, Ph.D.

Ve své práci se zabývám jednou ze strategií tkáňového inženýrství, která využívá kombinace biomateriálů syntetického původu a buněčné hmoty pro přípravu základních stavebních bloků, jejichž přímým skládáním lze připravit tkáňové konstrukty s vysokým prostorovým rozlišením. Jedná se o přípravu hydrogelových částic, nesoucích zapouzdřené buňky, metodou Stop-flow litografie. Cílem je vyvinutí reprodukovatelného postupu umožňujícího sterilní syntézu hydrogelových nosičů poskytujících buňkám optimální prostředí pro jejich růst.



Odhad tvaru bublin ve vodných roztocích propanolu

Bc. Lucie Pilíková (M1)

Školitel: doc. Dr. Ing. Pavlína Basařová

Vodné roztoky jednoduchých alkoholů vykazují strukturní anomálie, které se projevují ve změnách fyzikálních vlastností (viskozita, tepelná kapacita, povrchové napětí) a ovlivňují i chování bublin, protože se mění kinetika adsorpce a desorpce molekul alkoholu na fázovém rozhraní kapalina-plyn. Stoupavá rychlost bublin je přitom jedním z klíčových parametrů pro určení transportu kyslíku v arovaných reaktorech. Rychlost bublin je určena nejen vlastnostmi kapaliny, ale i tvarem bubliny. Pro běžné kapaliny existuje řada vztahů pro odhad deformace bublin založených na bezrozměrných kritériích (We , Eo , Re), pro vodné roztoky alkoholů však tyto odhady selhávají. V této práci byly na základě experimentálních dat o tvarech a rychlostech bublin v systému voda – n -propanol navrženy nové vztahy pro odhad deformace bublin založené na znalosti Weberova kritéria. Na základě modelu byly odhadnuty stoupavé rychlosti bublin a porovnány s experimentem. Shoda byla vynikající.

Experimentální studie redoxních dějů na povrchu třícestného katalyzátoru

Bc. Matouš Polák (M1)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Automobilový průmysl vyvíjí technologie sloužící k eliminaci toxických složek v emisích spalovacích motorů (zejména CO, NO_x a nespálené uhlovodíky) tak, aby účinnost těchto zařízení byla co nejvyšší. Pro zážehové motory se nejčastěji využívají třícestné katalyzátory (TWC) schopné provádět tři procesy naráz – oxidovat nespálené uhlovodíky a oxid uhelnatý, a zároveň redukovat oxidy dusíku, přičemž vznikají látky zdravotně nezávadné (voda, dusík a oxid uhličitý). Při této přeměně hraje velkou roli poměr oxidujících a redukujících plynů ve směsi a dále změny oxidačního stavu aktivních složek na povrchu katalyzátoru, zejména oxidů ceru. Cílem této práce je experimentálně prozkoumat reakční kinetiku v režimu dynamických změn redoxního poměru směsi. Je sledována odezva katalyzátoru na přepínání mezi chudou (oxidující) a bohatou (redukující) směsí plynů za různých teplot, ze které je pak vyhodnocena teplotní závislost adsorpční kapacity pro ukládání kyslíku. Tento parametr je klíčový pro správnou funkci katalyzátoru za dynamických jízdních podmínek.

Chemické inženýrství VI

MÍSTO: B 06

KOMISE

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

Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.

Ing. Katarína Kováčová

Ing. Michal Janda (Škoda Auto)

Ing. Vlastimil Bříza (Spolchemie)

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 [Bc. Jonatan Šercl](#) (M1, prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha)

Kontinualizace fermentace - příprava podmínek pro laboratorní separaci

08:50 [Bc. Lucie Kubíčková](#) (M1, Ing. Martin Isoz, Ph.D.)

Metoda vnořené hranice pro topologickou optimalizaci s využitím CFD

09:10 [Bc. Richard Knopp](#) (M2, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Optimalizace složení výfukové směsi pro rychlý start trojcestného katalyzátoru

09:30 [Bc. Zbyněk Semerád](#) (M1, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

3D simulace filtrace v katalytickém filtru pevných částic

09:50 [Bc. Tereza Semlerová](#) (M1, Ing. Mária Zedníková, Ph.D.)

Charakterizace vírové struktury pomocí metody PIV

10:30 [Bc. Dominik Schimon](#) (M1, Ing. Viola Tokárová, Ph.D.)

Mikrofluidní příprava polymerních mikročástic pro cílenou adhezi

10:50 [Bc. Vojtěch Škopek](#) (M1, Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.)

Studium závislosti k_{Ga} na difuzivitě na strukturované výplni

11:10 [Bc. Marek Šnor](#) (M1, doc.Ing. František Rejl, Ph.D.)

Transportní charakteristiky strukturované výplně Mellapak 452.Y při destilaci neutrálního systému ethanol-n-propanol

11:30 [Bc. Adrián Verčimák](#) (M1, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.)

Príprava nanokryštalických formulácií liečiv kontinuálnou antisolventnou precipitáciou

vyhlášení výsledků

Kontinualizace fermentace - příprava podmínek pro laboratorní separaci

Bc. Jonatan Šercl (M1)

Školitel: prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha

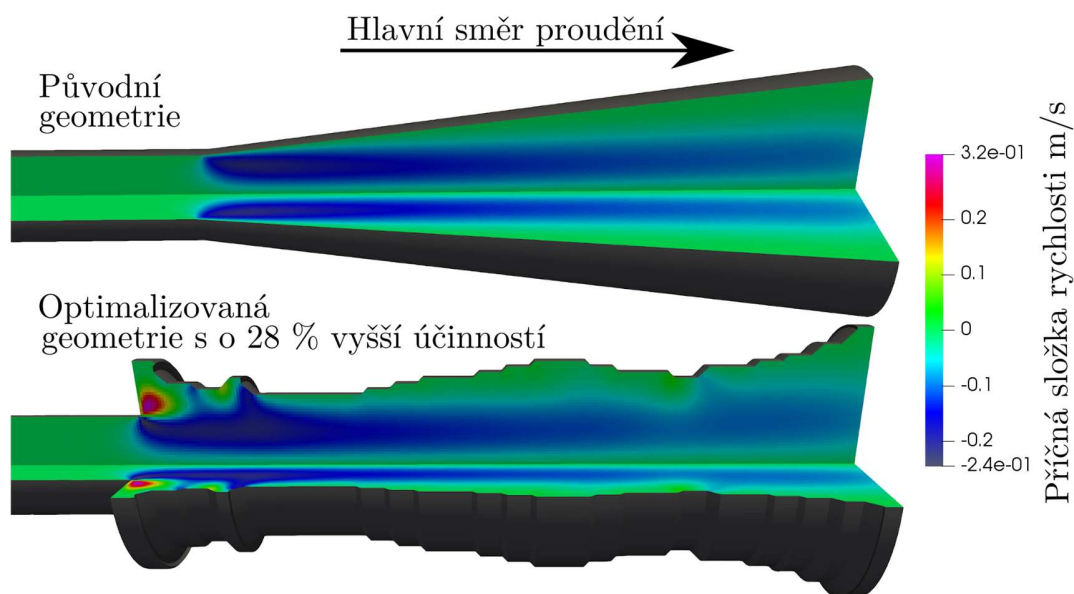
Fermentace se v posledních letech stává důležitým procesem v cestě za obnovitelnými zdroji. Jedním z hlavních důvodů je úbytek zásob fosilních paliv a hledání ekologičtějších zdrojů. Mezi tyto zdroje patří právě biopaliva jako jsou například methanol, ethanol a butanol. Tyto bioalkoholy je možné získat působením mikroorganismů právě při fermentaci. Po procesu fermentace je třeba separovat vzniklé primární produkty a zároveň zajistit jejich vyšší čistotu. V současné době se k separaci těchto látek nejčastěji používá destilace, nicméně z důvodu vysokých energetických nároků a obtížné separaci azeotropických směsí dochází k hledání alternativních řešení. Jedním z těchto řešení může být právě pervaporace, na niž se zaměřuje tato práce. Při pervaporaci dochází k dělení kapalně směsi průchodem přes neporézní membránu do vakua nebo nosného plynu. Díky selektivitě membrány dochází k separaci směsi nezávisle na termodynamické rovnováze mezi kapalinou a parní fází, a tudíž je možné pervaporaci používat i pro překonávání azeotropů. Důležitým aspektem celého procesu fermentace a separace produktů je jeho kontinualizace. Tato práce se zabývá nalezením podmínek pro provoz laboratorní pervaporační jednotky tak, aby byl proces vhodný pro napojení na fermentaci a optimalizaci této jednotky.

Metoda vnořené hranice pro topologickou optimalizaci s využitím CFD

Bc. Lucie Kubíčková (M1)

Školitel: Ing. Martin Isoz, Ph.D.

Technologický pokrok, zejména v oblasti 3D tisku, umožňuje výrobu součástek a zařízení s téměř libovolným tvarem. Široká variabilita výrobitelných tvarů dovoluje optimalizovat topologii součástek pro konkrétní aplikace. Hlavním cílem prezentované práce je vývoj obecné metodologie pro více-účelovou více-parametrickou topologickou optimalizaci založenou na genetických algoritmech a výpočetní dynamice tekutin (anglicky computational fluid dynamics, CFD). Topologická optimalizace je prováděna pomocí binární reprezentace prostoru, kdy optimalizační algoritmus prochází množinu všech výrobitelných tvarů a hledá nejlepší dle zadaných kritérií. Optimalizační kritéria jsou vyhodnocována s využitím CFD. Standardní metody CFD jsou rozšířeny o hybridní metodu fiktivní domény-vnořené hranice, což umožňuje efektivní provedení CFD výpočtu v obecné geometrii navržené optimalizačním algoritmem. Vyvinutá metodologie je aplikována na tvarovou optimalizaci difuzoru jako součásti ejektoru, jednoduché proudové pumpy využívané například v chladících a tepelných systémech či pro generaci vakua. Cílem ukázkové optimalizace je zvýšení energetické účinnosti ejektoru.



Optimalizace složení výfukové směsi pro rychlý start trojcestného katalyzátoru

Bc. Richard Knopp (M2)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

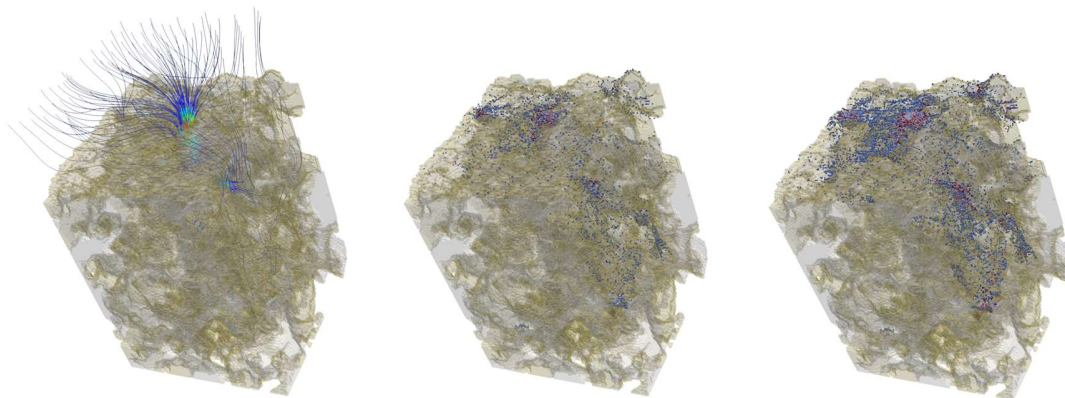
Přestože počet nově registrovaných elektromobilů v EU strmě roste, spalovací motory stále jsou a ještě několik let budou dominantním pohonem pro provoz osobních automobilů. U zážehových motorů je pro redukci škodlivin zpravidla využíván trojcestný katalyzátor, který je schopen jak zoxidovat nespálené zbytky uhlovodíků a oxidu uhelnatého, tak současně zredukovat oxidy dusíku za vzniku zdraví neškodné vodní páry, dusíku a oxidu uhličitého. Tato reakce bohužel neprobíhá ihned po startu motoru, ale až po dosažení určité teploty. Kvůli tlaku na efektivitu motoru je ale stále méně energie přeměněno na odpadní teplo, a tak trvá zahřátí katalytického systému na požadovanou teplotu déle. Cílem této práce bylo provést sérii experimentů s různým složením plynu na dvou trojcestných katalyzátorech a nalézt provozní režim, který by vedl k rychlejšímu náběhu reakcí během teplotní rampy po studeném startu. Směsi se lišily hodnotou λ (poměr vzduch:palivo), poměrem CO, NO, C₃H₆, H₂ a O₂ tak, aby bylo možné co nejlépe porovnat teploty zapálení jednotlivých složek směsi. Kromě konstantního složení byl zkoumán i režim s periodickými oscilacemi.

3D simulace filtrace v katalytickém filtru pevných částic

Bc. Zbyněk Semerád (M1)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

V automobilovém průmyslu je dnes jedním z nejvíce diskutovaných témat ekologie. V Evropské unii je nyní v platnosti emisní norma Euro 6d, omezující mimo jiné hmotnost a počet produkovaných pevných částic. Pro splnění této normy se do benzínových automobilů přidává katalytický filtr pevných částic, který snižuje současně množství škodlivých plynů i částic v automobilových spalínách. Ke studiu tohoto komplexního systému využíváme matematický model stěny katalytického filtru. Z reálného vzorku katalytického filtru pevných částic je pomocí rentgenové tomografie a následné rekonstrukce obrazu získána trojrozměrná struktura. Tato struktura je převedena na výpočetní síť, kde je pomocí softwaru OpenFOAM modelován tok a filtrace částic. Shluky částic se pohybují v plynu a po srážce se stěnou nebo již usazenými částicemi vytváří filtrační koláč. V prezentované simulační studii je diskutován vliv rychlosti plynu a počtu pevných částic ve shluku na filtrační účinnost a tlakovou ztrátu a jejich vývoj v čase. Právě tyto faktory jsou klíčové pro posouzení celkové účinnosti daného filtru, kde je kladen důraz na nízkou tlakovou ztrátu a vysokou filtrační účinnost.

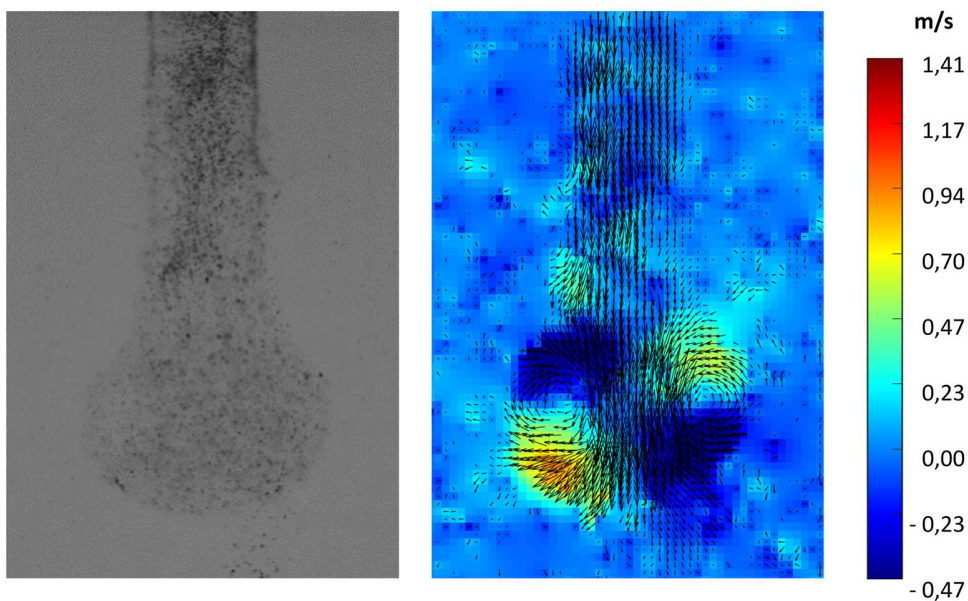


Charakterizace vírové struktury pomocí metody PIV

Bc. Tereza Semlerová (M1)

Školitel: Ing. Mária Zedníková, Ph.D.

Turbulentní proudění s přítomností bublin je nedílnou součástí mnoha průmyslových aparátů, jako jsou probublávané kolony, aerované míchané reaktory apod. Predikce chování těchto komplexních disperzních systémů je velice důležitá pro dobrý návrh zmíněných aparátů. Naše laboratoř se zabývá základním výzkumem chování bublin v turbulentním proudění pro získání experimentálních dat důležitých pro validaci modelů používaných při numerických simulacích. Experiment má podobu zjednodušeného systému, kde spolu interagují jedna bublina s jednou vírovou strukturou. Pro co nejpřesnější vyhodnocení rozpadu bublin a bezrozměrných kritérií charakterizujících tuto interakci je zapotřebí dobře charakterizovat vírovou strukturu. Cílem práce je pomocí metody PIV získat parametry popisující vírový prstenec tvořený náhlým proudem kapaliny ze zatopené trysky. Z vizualizace proudění pomocí trasovacích částic je vyhodnocen průměr prstence, průměr vírového jádra, postupná rychlost prstence a jeho cirkulace, která charakterizuje celkové množství energie nesené vírovým prstencem. Získané parametry jsou srovnány s výsledky získanými z experimentu s vírem obarveným barvivem, dále s výsledky numerických simulací tvorby vírového prstence stejného jako v experimentu a nakonec s teoretickým modelem.



Mikrofluidní příprava polymerních mikročástic pro cílenou adhezi

Bc. Dominik Schimon (M1)

Školitel: Ing. Viola Tokárová, Ph.D.

Hydrogelové mikročástice lze využít pro medicínské účely k enkapsulaci, následnému transportu a vyloučení účinné látky v organismu. Cílem práce bylo připravit alginátové částice o velikosti v jednotkách mikrometrů. Takové částice lze využít jako nosiče účinných látek pro inhalační podání nebo ve formě náplastí k transdermální aplikaci. Požadovaných parametrů bylo dosaženo za pomoci mikrofluidního čipu, který poskytuje dobře definované prostředí, ve kterém je možno syntetizovat částice o žádané velikosti s vysokou reprodukovatelností. Do systému je přiváděn vodní roztok alginátu, olejová fáze a olejová fáze s příměsí Ca^{2+} iontů. Při styku vodní fáze s nemísitelnou olejovou fází dochází ke vzniku kapek. Tato emulze vody v oleji je následně přiváděna k druhé olejové fázi s příměsí Ca^{2+} iontů, kde dochází ke vzniku mikročástic vlivem gelace alginátu v přítomnosti Ca^{2+} iontů. Byl zaznamenáván a vyhodnocen vliv průtoků jednotlivých fází na velikost a tvar kapek v mikrofluidním kanálku a vyprodukovaných částic. Následně byl zkoumán vliv a složení média vyprodukovaných alginátových mikročástic na jejich velikost v čase.

Studium závislosti k_G na difuzivitě na strukturované výplni

Bc. Vojtěch Škopek (M1)

Školitel: Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.

Znalost transportních charakteristik vyplní absorpčních kolon je důležitým předpokladem pro navrhování a obsluhování průmyslových kolonových aparátů. Tato práce se konkrétně zaměřuje na stanovení objemového koeficientu přestupu hmoty v plynné fázi (k_G) a jeho závislosti na difuzivitě. Měření byla provedena v poloprovozní absorpční koloně na plněné strukturované výplni Mellapak 350Y. Měření bylo provedeno chemisorpcí plynného čpavku o známých vstupních koncentracích do zředěného roztoku kyseliny sírové. Tento systém byl zvolen na základě soustředění odporu přestupu hmoty v plynné fázi. Měřením na několika výškách lože byly eliminovány okrajové efekty. Porovnáním hodnot k_G s daty naměřenými v laboratoři dříve na systému SO_2/NaOH na stejné výplni a stejných podmínek byla vyhodnocena závislost k_G na difúzním koeficientu. Ta vychází více než dvakrát nižší než je běžně používáno v literárních korelacích pro výpočet k_G . Tento fakt by mohl zásadně ovlivnit přenositelnost hodnot k_G mezi systémy.

Transportní charakteristiky strukturované výplně Mellapak 452.Y při destilaci neutrálního systému ethanol-n-propanol

Bc. Marek Šnor (M1)

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

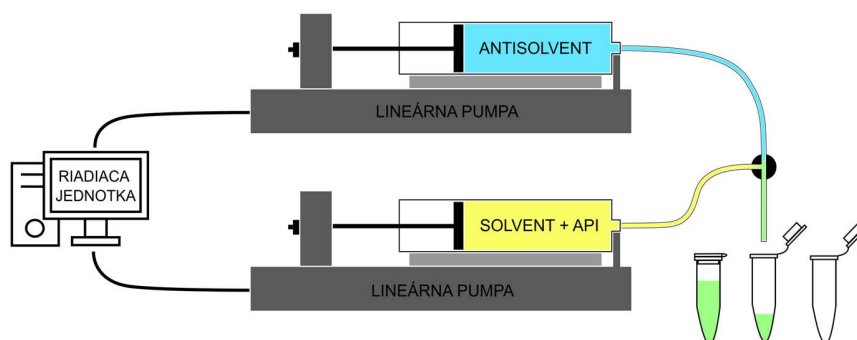
Destilace je jedním z procesů sdílení hmoty založeným na rozdílné těkavosti jednotlivých složek směsi. Pro popis sdílení hmoty při destilaci využíváme běžné veličiny jako koeficienty přestupu hmoty, efektivní mezifázovou plochu, model *HETP* aj. Pro transportní charakteristiky jsou vyvíjeny složité modely vycházející z geometrie výplně, fyzikálních vlastností směsí i procesních parametrů. Pro jejich výpočet neexistuje spolehlivý model. Transportní charakteristiky jsou tudíž pro každou výplň ověřovány experimentálně za použití destilačních směsí a také odvozovány z experimentů za absorpčních podmínek. V současné době v naší laboratoři probíhá výzkum, který zohledňuje vliv gradientu povrchového napětí směsí na výsledné transportní charakteristiky. Tyto tzv. Marangoniho efekty vznikající nerovnoměrným transportem hmoty při destilaci a mohou ovlivnit velikost mezifázové plochy. Měřený systém ethanol-n-propanol je neutrálním systémem, tudíž se povrchové napětí směsi se složením podél kolony ideálně nemění, resp. stabilizační index je blízký nule. Cílem této práce je srovnání transportních charakteristik neutrálního systému s daty měřenými na negativním systému a také s daty naměřenými za absorpčních podmínek, kde k Marangoniho efektům nedochází.

Príprava nanokryštalických formulácií liečiv kontinuálnou antisolventnou precipitáciou

Bc. Adrián Verčimák (M1)

Školiteľ: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Úspech liečiva nespočíva iba v ovplyvňovaní fyziologických procesov ale taktiež na jeho čo najväčšej absorpcii a cielenej distribúcii v ľudskom tele. Mnohé liečiva sa stretávajú s problémom nízkej rozpustnosti, čo vedie k nedostatočnej biologickej dostupnosti účinnej látky (API, z ang. Active Pharmaceutical Ingredient). Jednoduché a ekonomicky prijateľné riešenie umožňujú nanokryštály. Veľký pomer povrchu k objemu kryštálu robí tieto častice vysoko rozpustnými, a tak API môže dosahovať terapeutickú koncentráciu v krvnej plazme. Hoci sú štruktúry nanokryštálov jednoduché, ďalší vývoj týchto materiálov obmedzuje ich stabilita. Nanokryštály liečiv tak vyžadujú prídanie stabilizátorov, ktoré zabezpečujú elektrostatickú, prípadne stéricku stabilitu. Úloha stabilizátora vo finálnej formulácii nie je len stabilizácia veľkosti nanokryštalických častíc. Správny výber stabilizátora môže podstatne uľahčiť dezintegráciu liečiva. Jednou z metód prípravy nanokryštálov je antisolventná precipitácia. Štúdia je unikátna v tom, že sa zaoberá jej prietokovým usporiadaním, ktoré oproti vsádkovému usporiadaniu má výhodu v konštante udržiavanej rovnováhe, rýchlej implementácii zmien a vysokej produktivite. Boli skúmané parametre ovplyvňujúce výslednú morfológiu a veľkostnú distribúciu častíc.



Chemické inženýrství VII

MÍSTO: B 07

KOMISE

prof. Ing. Pavel Hasal, CSc. (předseda)

Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Ing. Dan Trunov

Ing. Vít Zvoníček, Ph.D. (Zentiva)

Ing. Václav Babuka (Synthos)

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 [Bc. Adam Baláž](#) (M2, Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.)

Studium doručování léčiv do nádorů s využitím pokročilých liposomálních formulací

08:50 [Bc. Tomáš Šulc](#) (M1, doc.Ing. František Rejl, Ph.D.)

Stanovení efektivní mazifázové plochy při destilaci pomocí termografie

09:10 [Bc. Zbyněk Tomiška](#) (M1, Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.)

High capacity batteries: Effect of electrode morphology on transport

09:30 [Bc. Petr Hnídek](#) (M1, Ing. Jan Haidl, Ph.D.)

Termografická a spektroskopická studie klidné hladiny v destilačních podmínkách

10:10 [Bc. Anna Rejzková](#) (M2, Ing. Mária Zedníková, Ph.D.)

Vliv viskozity na hydrodynamiku v probublávaných kolonách

10:30 [Bc. Ondřej Šimůnek](#) (M1, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Strukturované katalytické vrstvy pro zlepšení funkčních vlastností filtru

10:50 [Bc. Petr Šmejkal](#) (M1, doc. Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.)

Experimentální studium chování aniontově výměnných membrán

11:10 [Bc. Lucie Večerková](#) (M1, Ing. Viola Tokárová, Ph.D.)

Vývoj metody pro testování dezinfekčního prostředku s prodlouženým účinkem

vyhlášení výsledků

Studium doručování léčiv do nádorů s využitím pokročilých liposomálních formulací

Bc. Adam Baláž (M2)

Školitel: Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.

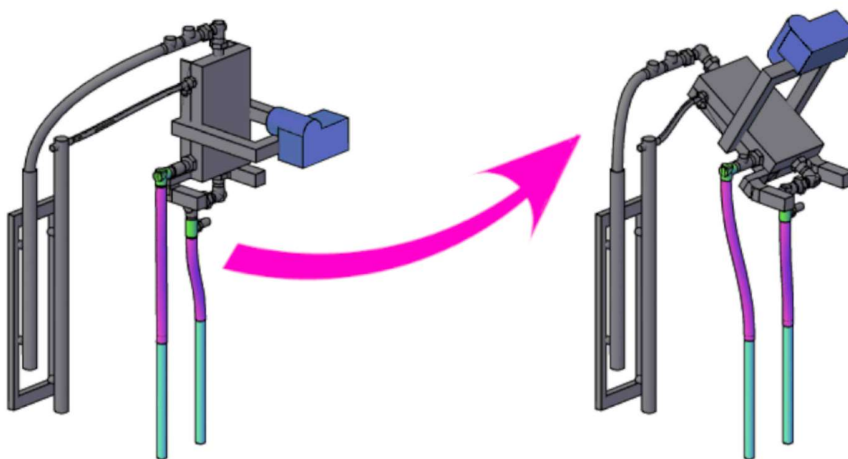
Prezentovaná práce sa zameriava na štúdium interakcie protilátkou modifikovaných lipozómov obsahujúcich kurkumín s bunkami kolorektálneho karcinómu a následné porovnanie účinnosti pri interakcii s ich nemodifikovanými ekvivalentmi. Kurkumín, ktorý je známy svojimi protizápalovými a protirakovinovými účinkami je najčastejšie spájaný práve s liečbou kolorektálneho karcinómu. Jedným nadmerne produkovaným proteínom kolorektálnych nádorov je karbonická anhydráza IX (CA IX), špecificky rozpoznávaná protilátkou IgG M75. Práca je zameraná na prípravu lipozómov, porovnanie rôznych typov lipozómov, ich stabilitu v čase a ich testovanie v prítomnosti rakovinovej bunkovej línie HT-29, kde sa sleduje účinnosť kurkumínu na životaschopnosť buniek. Ďalej práca pojednáva aj o účinku kurkumínových lipozómov na nerakovinové bunky MRC-5. Tie by mali slúžiť ako kontrolná skupina.

Stanovení efektivní mezifázové plochy při destilaci pomocí termografie

Bc. Tomáš Šulc (M1)

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

Správný model popisující sdílení hmoty uvnitř destilační kolony dokáže výrazně zvýšit účinnost navrhované kolony. Současné metody měření jednoho z jeho klíčových parametrů, efektivní mezifázové plochy, však poskytují pouze informace o rozložení kapalných zadržek, ze které je obtížné rozhodnout, v kterém místě skutečně dochází ke sdílení hmoty. Základem naší vyvíjené metodiky je měření povrchové teploty kapalného filmu na strukturované výplni Mellapack pomocí termokamery. Fázové rozhraní kapaliny neaktivní v přenosu hmoty se dostává do rovnováhy s jádrem toku páry a jeho teplota je tak vyšší, než v případě kapaliny aktivní. Tento příspěvek popisuje úpravy aparatury, která umožní pořídit termografické snímky kapalného filmu na povrchu výplně. A to za destilačních podmínek, jak ho nacházíme ve skutečném elementu strukturované výplně.

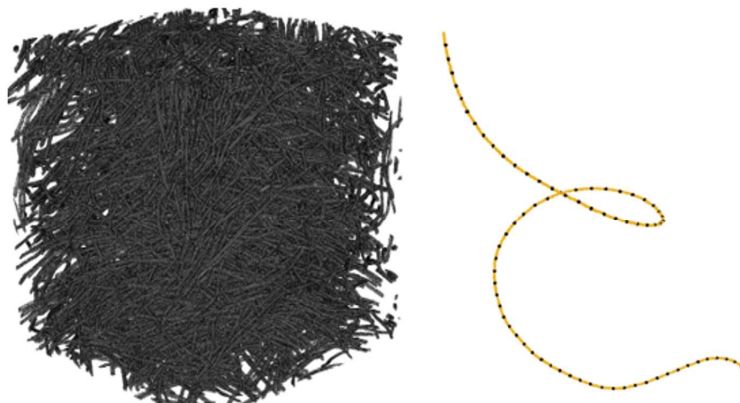


High capacity batteries: Effect of electrode morphology on transport

Bc. Zbyněk Tomiška (M1)

Školitel: Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.

Micro-structured materials are at the centre of the research focused on electrodes used in high-capacity batteries. The crucial property of micro-porous structures can be attributed to the very high specific surface area, allowing significantly faster reaction kinetics than for the bulk counterparts. A better understanding of the internal morphological complexity of these materials allows for utilization of their maximum potential. This work focuses on the model of the influence of complex morphology on transport properties of the spatially 3-D micro-porous electrode, specifically, carbon felt, used in redox flow batteries. As a generally fibrous media, carbon felt is usually compressed for enhancement in performance, whereas the optimum compression ratio depends on several factors. The micro-structured material was reconstructed from micro-tomography imaging and diverse statistical descriptors of morphology were developed with the emphasis on the evaluation of spatial orientation of individual fibres. It was found that the overall orientation of fibres changes with the compression. This phenomenon explains experimental results showing the non-linearity of Carman-Kozeny constant (connected with flow through porous media with internal morphology) towards the compression ratio.



Termografická a spektroskopická studie klidné hladiny v destilačních podmínkách

Bc. Petr Hnídek (M1)

Školitel: Ing. Jan Haidl, Ph.D.

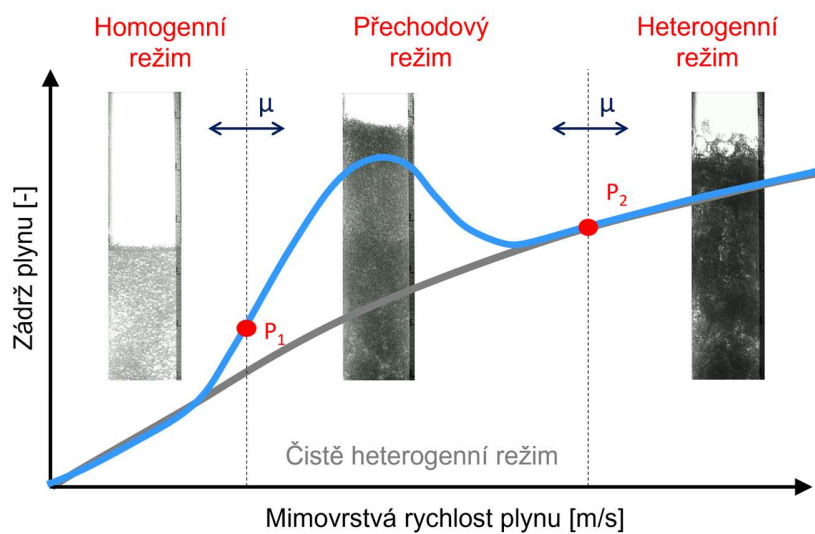
Destilace je v současné době jednou z nejpoužívanějších separačních technik v chemickém průmyslu. Nejpoužívanější zařízení pro destilaci jsou kolony, mezi nimiž jsou ve velké oblibě kolony plněné. Mezi největší výhody plněných kolon, obzvláště těch se strukturovanou výplní, patří relativně jednoduchá konstrukce, vysoká kapacita produkce a výborné separační vlastnosti. Pro svou komplexní geometrii a neustálé procesy sdílení hmoty je ovšem velice obtížné matematicky popisovat procesy, které se uvnitř těchto kolon odehrávají. Namísto toho je činnost těchto zařízení popisována empirickými vztahy, využívající znalosti koeficientů přestupu hmoty a aktivní velikosti smáčeného povrchu. Tyto parametry jsou ovšem velice obtížně měřitelné. Proto byla sestavena aparatura umožňující tok kapalné směsi v kontaktu s parní směsí, čímž vytváří zjednodušený model skrápěné strukturované výplně. Tato práce se zabývá termografickým sledováním hladiny v modelové aparatuře v uspořádání pro destilaci, porovnáním s termogramy pořízenými při absorpčních experimentech a jejich popis za pomoci koncentračních profilů, které byly naměřeny pomocí Ramanovy konfokální mikrospektroskopie.

Vliv viskozity na hydrodynamiku v probublávaných kolonách

Bc. Anna Rejzková (M2)

Školitel: Ing. Mária Zedníková, Ph.D.

Probublávané kolony patří mezi vícefázové reaktory (systém kapalina-plyn) využívané v řadě technologií. Popis hydrodynamických režimů je důležitý pro jejich návrh a spolehlivý provoz. Tato práce se zabývá studiem hydrodynamických režimů v probublávané koloně s kapalinami, které modelují například viskózní vsádky v bioreaktorech. Měnit hydrodynamické chování lze řadou faktorů (viskozita, povrchové napětí, geometrie kolony). V této práci je zkoumán vliv viskozity, přičemž ostatní vlivy jsou eliminovány nebo významně potlačeny. Pro tento účel byla zkoumána řada vodných roztoků glycerolu v rozmezí koncentrací od 1 hm. % do 35 hm. % a odpovídající viskozity do 2,6 mPa·s. Pro každou vsádku byla proměřena křivka závislosti zádrže plynu na mimovrstvové rychlosti plynu. Pro měření byla využita kolona z plexiskla (délka 2 m, průměr 0,14 m) a distributor plynu zajišťující všechny hydrodynamické režimy. Zádrž plynu byla určena z expanze probublávané kapalné vrstvy jak vizuálně, tak pomocí obrazové analýzy. Pro přesnou charakterizaci vsádky byly stanoveny její fyzikální vlastnosti (hustota, viskozita, povrchové napětí, vodivost). Z naměřených závislostí byly vyhodnoceny přechody mezi jednotlivými režimy a jednotlivé vsádky porovnány mezi sebou.



Obrázek 1: Závislost zadrž plynu na mimovrstvé rychlosti plynu, P_1 , P_2 – přechod mezi jednotlivými režimy závisí na viskozitě

Strukturované katalytické vrstvy pro zlepšení funkčních vlastností filtru

Bc. Ondřej Šimůnek (M1)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Spalovací motory mohou produkovat toxické plyny a pevné částice, které negativně působí na lidské zdraví i na životní prostředí. Pro snížení množství plynných emisí se v automobilech využívají katalyzátory. Pevné částice bývají zachycovány ve filtrech pevných částic. Kombinací těchto zařízení je katalytický filtr pevných částic. Jedná se o voštinový keramický filtr, na nějž je nanесena porézní vrstva γ -aluminy s nanočásticemi katalyticky aktivní platiny. Je požadována vysoká konverze plynných škodlivin i filtrační účinnost částic, ovšem při zachování nízké tlakové ztráty. Pokud je katalyzátor nanесen pouze v tenké vrstvě uvnitř pórů stěny, je dosažena nízká tlaková ztráta, ale nemusí být dosaženo požadované filtrační účinnosti. Při nanесení katalyzátoru v souvislé vrstvě na vnější povrch stěny, je filtrační účinnost vysoká, ale za cenu nepříjemně vysoké tlakové ztráty. Cílem výzkumu bylo dosáhnout rozmístění katalyzátoru, které by kombinovalo výhody a potlačovalo nedostatky těchto struktur. Snahou bylo částečné zaplnění velkých pórů ve stěnách filtru a vytvoření tenké a porézní vrstvy na vnějším povrchu stěny. Nanášení katalyzátoru bylo prováděno ve dvou krocích, přičemž byly měněny parametry nanášených suspenzí jako pH, velikost částic nebo hmotnostní zlomek pevné složky.

Experimentální studium chování aniontově výměnných membrán

Bc. Petr Šmejkal (M1)

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

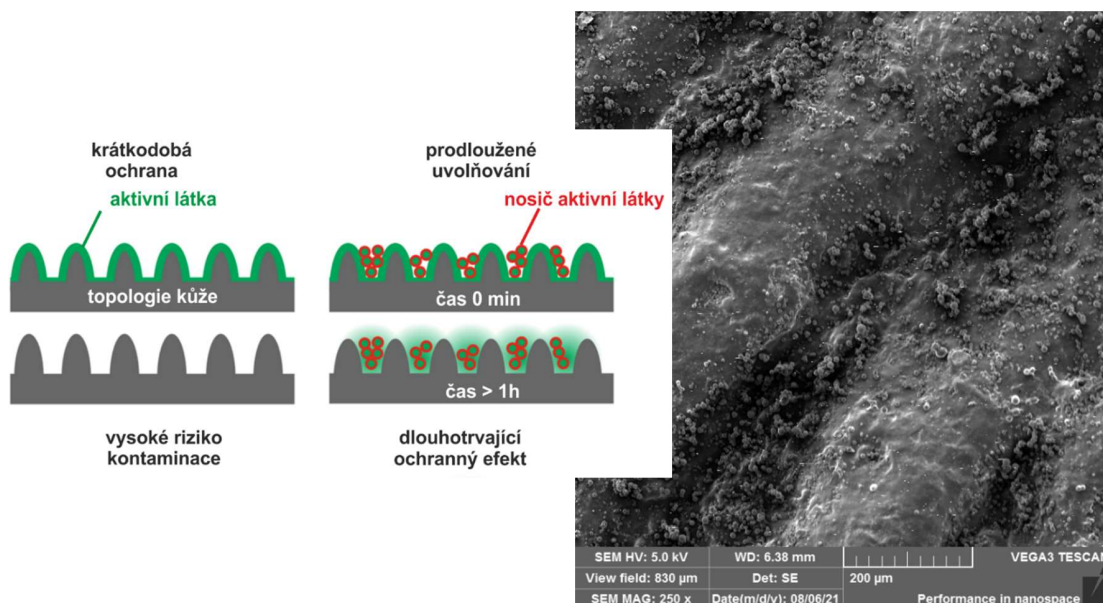
Elektrodialýza je elektromembránová separační metoda používaná k úpravě vodných roztoků solí. Hlavní aplikací elektrodialýzy v průmyslu je výroba pitné vody pomocí odsolování mořské vody. Proces je založen na principu migrace nabitých iontů solí k opačně nabitě elektrodě. Toho je využíváno v zařízení nazývaném elektrodialyzér, který obsahuje svazek střídavě uspořádaných iontově výměnných membrán. Toto uspořádání zajišťuje snižování koncentrace solí na tzv. diluátové straně membrány a zvyšování koncentrace na koncentrátové straně. Tato práce zkoumá vliv různých aniontů pocházejících z příslušných sodných solí na chování elektrodového systému obsahující aniontově výměnnou membránou. Toto chování je zkoumáno jednak měřením voltampérových charakteristik pro vybrané roztoky a dále pozorováním jevů nastávajících při aplikaci nadlimitních proudových hustot. Mezi tyto jevy patří štěpení vody a dále konvekce řízená elektrickým polem. Štěpení vody je kvantifikováno měřením změn v pH hodnotě roztoků na diluátové straně membrány, intenzita konvekce se vyhodnocuje pomocí metody PIV. Vyhodnocená data jsou vztažena na typ přítomného aniontu a jeho velikost.

Vývoj metody pro testování dezinfekčního prostředku s prodlouženým účinkem

Bc. Lucie Večerková (M1)

Školitel: Ing. Viola Tokárová, Ph.D.

Zvýšená míra používání dezinfekčních přípravků v poslední době způsobila vyšší produkci těchto látek v různých formách. Pozornost je soustředěna zejména na dezinfekci pokožky rukou, jež vyžaduje využití zdravích neškodných látek a předejití přílišnému namáhání pokožky (například vysušením ethanolickými roztoky). Všechny současně dostupné prostředky mají pouze jednorázový účinek, proto je nezbytná opakovaná aplikace. Vývoj přípravku, jež by byl schopen udržet pokožku čistou po delší dobu, a tím poskytl vyšší ochranu při méně časté aplikaci, již probíhá. Vhodná metoda testování dlouhodobého účinku, která je nezbytná před uvedením prostředku na trh, je obsahem této práce. Předpokládá se, že prodloužení účinku bude zajištěno postupným uvolňováním aktivních složek z částic, v nichž budou zachyceny, a které budou ulpívat mezi papilárními liniemi (Doplňující obrázek). Při zohlednění tohoto konceptu je třeba testovat dezinfekční účinek částic, míru jejich ulpívání v papilárních liniích a otěr při kontaktu s různými povrchy, ovlivňující dobu setrvání částic na kůži. Některé přístroje nemohou zkoumat přímo lidskou pokožku, jeví se proto jako užitečné vytvořit také repliku povrchu lidské ruky z vhodného materiálu, která bude při testování využita pro lepší vizualizaci výsledků.



Chemické inženýrství VIII

MÍSTO: B 139

KOMISE

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

Ing. Lucie Mašková

Ing. Filip Zavřel

Ing. Marie Plachá

Ing. Libor Labík, Ph.D. (Mondi)

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 [Bc. Ondřej Gebouský](#) (M2, Ing. Jan Haidl, Ph.D.)

Hydraulický model ejektoru kapalina-plyn: odvození a validace

08:50 [Bc. Adéla Gottfriedová](#) (M2, Ing. Viola Tokárová, Ph.D.)

Příprava periodických struktur pomocí kyslíkové plasmy

09:10 [Bc. Adam Hrdý](#) (M2, prof. Ing. Michal Příbyl, Ph.D.)

Matematické modelování separace chirálních látek pomocí kontinuální elektroforézy

09:30 [Bc. Slavomír Kilár](#) (M2, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

Nanomletie suspenzie častíc proliečiva

09:50 [Bc. Klára Lukášová](#) (M2, Ing. Ondřej Kašpar, Ph.D.)

Vývoj dezinfekčních nosičů s prodlouženým účinkem

10:30 [Bc. Jiří Perner](#) (M2, Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.)

How does surface roughness affect electrostatic charging of particulate matter: Theoretical study

10:50 [Bc. Ondřej Studeník](#) (M2, Ing. Martin Isoz, Ph.D.)

Zlepšení vyhodnocení parametrů kontaktu nepravidelných těles v CFD-DEM řešiči pomocí virtuální sítě

11:10 [Bc. Miloš Václavík](#) (M2, prof. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.)

Hledání a příprava nových krystalických forem trimekainu

11:30 [Bc. Alžběta Zemánková](#) (M2, doc. Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D.)

Investigation of phase behavior and physical stability of co-amorphous systems for drug delivery systems

vyhlášení výsledků

Hydraulický model ejektoru kapalina-plyn: odvození a validace

Bc. Ondřej Gebouský (M2)

Školitel: Ing. Jan Haidl, Ph.D.

Ejektor kapalina-plyn (EKP) je proudové čerpadlo, které využívá kapalinu o vysokém tlaku k dopravě a kompresi plynného média. V průmyslu se EKP používají jako distributory plynu do probublávaných kolon, vývěvy či zařízení pro intenzivní výměnu hmoty. Hlavní předností EKP je jejich minimalistická konstrukce bez pohyblivých částí, z níž vyplývají další benefity – nízké pořizovací náklady, bezpečný a spolehlivý provoz, snadná údržba a dlouhá životnost. Nevýhodou je naopak absence spolehlivých návrhových metod v dostupné literatuře a nízká energetická účinnost. Jednou z možností zvýšení účinnosti EKP je použití tzv. swirlu. Ten uděluje tangenciální složku rychlosti kapalnému paprsku, který se následně vlivem odstředivé síly destabilizuje, a zvyšuje množství přisávaného plynu. V rámci této práce byl odvozen hydraulický model EKP s destabilizovaným paprskem, který popisuje množství přisávaného plynu v závislosti na fyzikálních vlastnostech obou tekutin a provozních parametrech aparátu. Model byl validován na základě experimentálních dat, naměřených na modulárních aparátech čerpajících všemi třemi limitními směry. Kromě samotného validovaného hydraulického modelu jsou součástí výsledků také doporučené rozsahy geometrických parametrů EKP a swirlu.

Příprava periodických struktur pomocí kyslíkové plasmy

Bc. Adéla Gottfriedová (M2)

Školitel: Ing. Viola Tokárová, Ph.D.

Topografické povrchy o různých tvarech, vzorech a velikostech struktur mohou být pozorovány v přírodě na listech rostlin, kůži některých živočichů, nebo i na površích v běžném životě. Struktury na povrchu společně s jeho chemickým složením a mechanickými vlastnostmi mohou zajistit hydrofobicitu, samočistící vlastnosti, omezení odporu při obtékání, antibakteriální vlastnosti nebo ovlivnit adhezi k povrchu. Kvůli takovým interakcím strukturovaných povrchů s prostředím jsou v posledních desetiletích vyvíjeny metody, kterými topografie přírodních povrchů může být napodobena. Tato práce se zaměřuje na přípravu struktury sinusoidního vrásnění na svrchní vrstvě polydimethylsiloxanu s využitím kyslíkové plasmy. Pomocí plasmy je možné upravovat mechanické vlastnosti polymerů a tím vytvářet vrstvy o různé elasticitě. Toho lze využít k spontánnímu vzniku periodického vrásnění o charakteristických rozměrech v řádech desítek nm. Metoda je založena na vzniku mechanické nestability při nerovnosti kontrakčních sil v jednotlivých vrstvách materiálu díky uvolňování napětí vloženého na materiál. Výhodou je možnost přímého ovlivňování připravované struktury vkládaným napětím, dobou expozice a výkonem při oxidaci plasmou.

Matematické modelování separace chirálních látek pomocí kontinuální elektroforézy

Bc. Adam Hrdý (M2)

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

Téměř 50 % léčiv dostupných na trhu, představují chirální látky. Farmakologicky aktivní enantiomer se metabolizuje jinak než druhý enantiomer, který je buď biologicky neaktivní nebo se dokonce projevuje nežádoucími účinky. Jedním z přístupů vedoucích k přípravě čistých enantiomerů je elektroforéza v přítomnosti rozpustného chirálního selektoru, například β -cyklodextrinu. Cílem této práce je vytvoření matematicko-fyzikálního modelu ortogonálního systému, ve kterém probíhá kontinuální separace chirálních látek pomocí elektroforézy. Systém je tvořen hlavním separačním kanálkem a dvěma postranními rezervoáry, ve kterých jsou umístěny elektrody, které vkládají stejnosměrné elektrické napětí kolmo na protékající elektrolyt. Vzorek migruje vlivem vloženého elektrického pole v prostředí tekoucího nosného elektrolytu. V separačním kanálku dochází k vychýlení elektricky nabitých molekul ze směru konvektivního toku v důsledku elektromigračního transportu. Enantiomer preferenčně interagující s chirálním selektorem tvoří komplex. Vznik komplexu je doprovázen změnou elektroforetické mobility, což má obvykle za následek zpomalení transportu složky v elektrickém poli. Enantiomer, který není zpomalován, odchází hlavním separačním kanálkem, zatímco druhý enantiomer přechází do bočního rezervoáru.

Nanomletie suspenzie častíc proliečiva

Bc. Slavomír Kilár (M2)

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

Paliperidon palmitát je dlhodobो pôsobiace depotné injekčné antipsychotikum (podávané intramuskulárne), ktoré sa využíva ako akútna a udržiavacia liečba schizofrénie u dospelých. Oproti perorálnej liekovej forme je výhodnejšie, pretože zlepšuje adhérenciu pacienta k liečbe, zaisťuje stabilné plazmatické hladiny liečiva a znižuje sa aj frekvencia podávania. Taktiež sa ukázalo, že depotné injekcie vedú k nižšej miere relapsu ochorenia a rehospitalizácie. To, ako sa bude paliperidon v tele uvoľňovať, závisí od veľkosti častíc suspenzie. Väčšina týchto suspenzií pre depotné injekcie sa vyrába mletím. Z tohto dôvodu sme sa zaoberali práve touto jednotkovou operáciou, kde sa porovnávala redukcia veľkosti častíc pri troch rôznych usporiadaniach mlecieho okruhu – *closed loop*, *open loop* a *continuous open loop*. Odber vzoriek prebiehal v stanovených intervaloch a následne sa meralo rozdelenie veľkosti častíc (PSD) jednotlivých vzoriek. V rámci budúcej práce na projekte bude vytvorený model mletia, ktorý bude predpovedať PSD produktu pri známom PSD suroviny, resp. naopak.

Vývoj dezinfekčních nosičů s prodlouženým účinkem

Bc. Klára Lukášová (M2)

Školitel: Ing. Ondřej Kašpar, Ph.D.

V dnešní době je dezinfekce v jakékoliv formě jednou z nejdůležitějších součástí našeho života. Především pro jednotlivce je důležité dezinfikovat si ruce, což každý z nás provádí několikrát denně. Aktuálně používané dezinfekční prostředky, u kterých je oficiálně prokázáno, že fungují proti onemocnění Covid jsou v převážné většině založené na alkoholové bázi. Aktuálně používané dezinfekční prostředky poskytují pouze jednorázovou ochranu. Dlouhodobého účinku těchto dezinfekcí lze docílit pouze opakovaným použitím, které způsobuje vysoušení kůže. Jako další aspekt je třeba vzít potaz, že některé náboženské kultury nedovolují kontakt s alkoholem, kam tedy spadá i použití dezinfekčních prostředků. Cílem mé práce je tedy vyvinout dezinfekční prostředek, který by poskytoval dlouhodobý účinek v rámci několik hodin. Tento přípravek by nebyl založený na alkoholové bázi. Aby tohoto mohlo být docíleno, je nutné aktivní látku zapouzdřit do vhodného nosiče o takové velikosti, aby se částice mohly zachytit v papilárních liniích pokrývajících kůži. K tvorbě částic bude použita technologie rozprašovacího sušení, kdy je aktivní látka zapouzdřena za použití chitosanu. Při použití crosslinking metody bude možné docílit žádaného prodlouženého účinku, jelikož se aktivní látka bude uvolňovat postupně.

How does surface roughness affect electrostatic charging of particulate matter: Theoretical study

Bc. Jiří Perner (M2)

Školitel: Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.

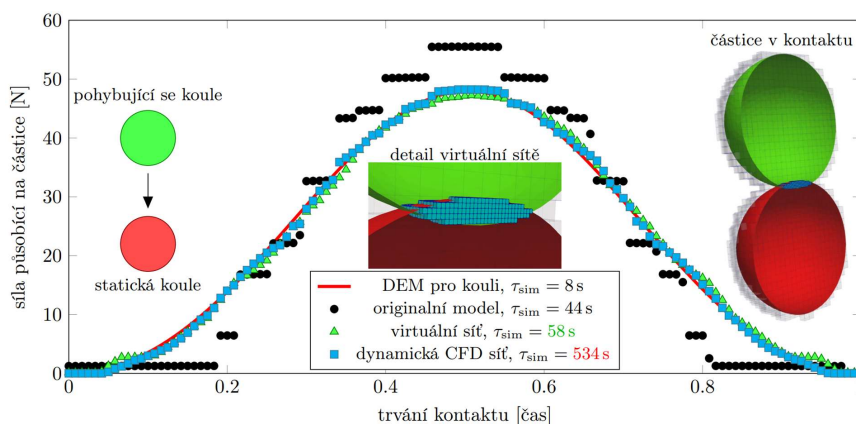
Electrostatic charging causes severe problems during production and handling of particulate matter, such as polymers or drugs causing, for instance, fouling of reactor walls during production of polyethylene in fluidized beds, insufficient pharmaceutical powders blending homogeneity, or even dust explosions. Despite the significance of these problems, the mechanism of electrostatic charging is not fully understood yet. One of the questions remaining open in this research area is the effect of particle surface roughness on the charging dynamics, which has so far been described only using empirical correlations or complex Finite Volume Method (FVM) models. In this work, we developed a first-principles Discrete Element Model (DEM) which allows us to predict intensity of particle charging after particle-wall contact under various conditions, assuming real surface topology of the particles taken from Atomic Force Microscopy (AFM) images. The model thus enables us to evaluate the contact area depending on the particles' velocity and surface roughness. The amount of charge transferred during the contact is predicted in good agreement with experimental data.

Zlepšení vyhodnocení parametrů kontaktu nepravidelných těles v CFD-DEM řešiči pomocí virtuální sítě

Bc. Ondřej Studeník (M2)

Školitel: Ing. Martin Isoz, Ph.D.

V chemicko-inženýrské praxi existuje řada procesů s pevnou fází dispergovanou v tekutině. Uvedme například nanášení suspenze či podobné děje, kdy jsou částice v systému dostatečně velké na to, aby ovlivňovaly charakter proudění a rozmístěny dostatečně hustě na to, aby přicházely do kontaktu s hranicemi domény i se sebou navzájem. Takové děje lze simulovat spřažením metod výpočetní dynamiky tekutin (CFD) s metodou diskrétních elementů (DEM). Současné CFD-DEM řešiče, aproximují částice ideálním dobře parametrizovaným tvarem, např. koulí či elipsou. Vyhodnocení vzájemného silového působení takových ideálních těles je závislé na několika málo tvarových parametrech. Skutečné částice ale často zjednodušit na ideální tělesa nelze a je nutné uvažovat nepravidelnost jejich tvaru. Pro nepravidelná tělesa je přesnost DEM výpočtu kontaktních sil určena kvalitou reprezentace jejich povrchu výpočetní sítí, tj. jemností výpočetní sítě. DEM má tak řádově vyšší nároky na jemnost sítě než CFD. V této práci prezentujeme implementaci tzv. *virtuální sítě* pro DEM výpočet, kdy jsou hraniční buňky v kontaktu dále lokálně děleny, ovšem bez modifikace CFD sítě. Tím dosahujeme přesnějšího výpočtu kontaktních sil s řádově nižší výpočetní náročností, než by představovalo adaptivní zahušťování CFD sítě.



Hledání a příprava nových krystalických forem trimekainu

Bc. Miloš Václavík (M2)

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

Přestože neustále probíhá vývoj nových molekul pro léčbu nejrozličnějších onemocnění, tento proces většinou trvá déle než dekádu a je velice finančně náročný. Z tohoto důvodu se častěji přistupuje ke zlepšování vlastností již používaných léčivých látek. V současnosti je nejvíce problémovou vlastností nízká rozpustnost a s ní související biologická dostupnost. Jednou z možností, jak tyto vlastnosti zlepšit, je využitím krystalických forem léčiv. Mezi tyto formy patří kokrystaly skládající se z léčiva a příslušného koformeru. Tato práce se věnuje trimekainu, léčivu používanému jako lokální anestetikum a antiarytmikum. Na pozici koformeru bylo vyzkoušeno jedenáct farmaceuticky použitelných karboxylových kyselin. Vzorky byly nejčastěji připravovány pomalým odpařováním roztoku za pomoci dvou různých rozpouštědel nebo filtrací. Vzorky, u kterých došlo ke krystalizaci, byly charakterizovány na rentgenové práškové difrakci. Pomocí této metody bylo možné najít kombinace, které vytvářejí kokrystaly. Úspěšné kombinace byly zkoumány pomocí vícero metod, které poskytly užitečný náhled do chování a struktury nalezených kokrystalů. Posledním krokem je příprava monokrystalů k analýze na monokrystalické rentgenové difrakci, díky čemuž je možné vyřešit modely krystalických struktur.

Investigation of phase behavior and physical stability of co-amorphous systems for drug delivery systems

Bc. Alžběta Zemánková (M2)

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

Numerous drugs exhibit a poor aqueous solubility that limits their bioavailability, thus presenting a serious concern for oral administration. A promising way to improve bioavailability is the amorphisation of drugs. The amorphous phase is, however, a thermodynamically unstable state with a tendency to recrystallize. Co-amorphous systems (CAMs) represent a viable strategy for stabilizing a drug in its amorphous form using a co-former that prevents drug recrystallization. CAMs are combinations of low molecular weight components that are mixed into a homogeneous single-phase amorphous mixture. To gain information on the mechanisms of CAM stabilization and optimize their design, phase diagrams for several combinations drug–excipient were investigated using calorimetry. Another important aspect governing the applicability of CAMs is their long-term physical stability, which is usually determined by experimental monitoring over a period of typically two years. In this work, the physical stability of CAMs was extensively investigated using a combination of calorimetric measurements and theoretical modelling of the average relaxation time using which long-term physical stability can be efficiently estimated. The impact of excipient on the amorphous phase stability was also evaluated.

Ústav fyziky a měřicí techniky (444)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

RNDr. Pavel Galář, Ph.D.

SEZNAM SEKCI

1. [Ústav fyziky a měřicí techniky](#)

SPONZOŘI ÚSTAVU FYZIKY A MĚŘICÍ TECHNIKY



vesmír



Ústav fyziky a měřicí techniky

MÍSTO: B220

KOMISE

doc. Jaroslav Hofmann, CSc. (předseda)

Ing. Jan Vlček, Ph.D.

Dr. Mgr. Jana Jirešová

doc. RNDr. Jaroslav Julák, CSc.

Ing. Martin Straka, Ph.D.

M. Sc. Maren Dworschak

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 [Vítězslav Mareš](#) (B3, RNDr. Pavel Galář, Ph.D.)

Vývoj hybridních elektrod pro technologii Li-Ion baterií využívajících nanokrystalického křemíku

08:50 [Vít Smutný](#) (B3, Dr. Mgr. Jana Jirešová)

Studium vlivu nízkoteplotního plazmatu na vlastnosti semen

09:10 [Bc. Jan Hrudka](#) (M1, doc. Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.)

Vývoj výpočetního clusteru a jeho aplikace při simulacích molekulové dynamiky

09:30 [Bc. Jakub Kopenec](#) (M1, RNDr. Pavel Galář, Ph.D.)

Nanostrukturní křemík a studium jeho vznětlivosti

09:50 [Bc. Filip Matějka](#) (M1, RNDr. Pavel Galář, Ph.D.)

Optimalizace systému plazma aktivované vody pro vysokodusičnanové koncentrace

10:10 [Bc. Aneta Pagáčová](#) (M1, Mgr. Anna Fučíková, Ph.D.)

Konverzní filtr pro kriminalistickou a přírodovědnou UV fotografii na bázi nanočástic

11:00 [Bc. Matúš Toriška](#) (M1, Dr. Mgr. Jana Jirešová)

Nízko teplotná plazma ako nástroj modifikácie osteointegračných materiálov pre kostné náhrady

11:20 [Bc. Karolína Kestlerová](#) (M2, Ing. Josef Khun, Ph.D.)

Studium bezpečnosti nanoroušek a nanorespirátorů

11:40 [Bc. Marcela Korcová](#) (M2, Ing. Ladislav Fišer, Ph.D.)

Studium možností provozního testování mléka optickými metodami

12:00 [Bc. Oskar Marelja](#) (M2, prof. Ing. Dr. Martin Vrnata)

Příprava Arduino obvodu a programu pro otvírání/zavírání optiky laseru k přípravě citlivých vrstev senzorů

12:20 [Bc. Lucie Vabroušková](#) (M2, Ing. Přemysl Fitl, Ph.D.)

Detekce plyných látek vznikajících bakteriálním rozkladem živočišné tkáně

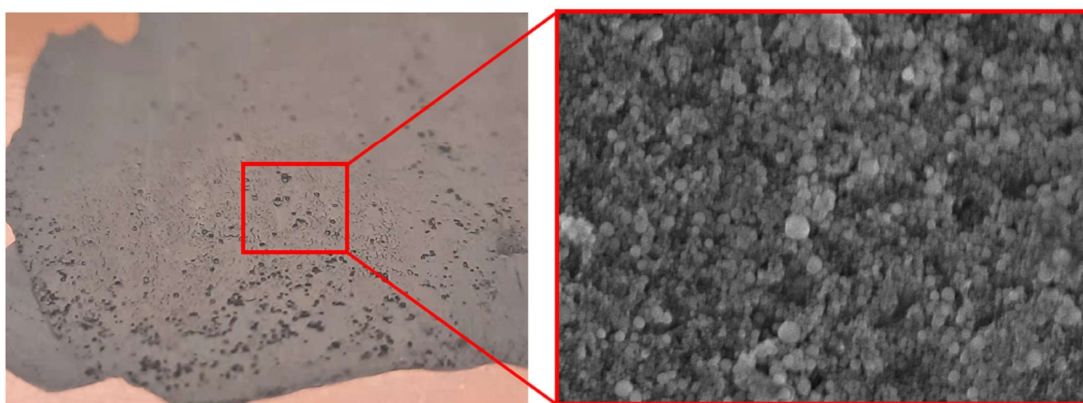
vyhlášení výsledků

Vývoj hybridních elektrod pro technologií Li-Ion baterií využívajících nanokrystalického křemíku

Vítězslav Mareš (B3)

Školitel: RNDr. Pavel Galář, Ph.D.

Technologie lithium-iontových baterií je v dnešní době jedna z nejzásadnějších témat moderní energetiky. Jedná se o nejrozšířenější a nejefektivnější technologie schopné účelného skladování energie a jejich aplikace jsou téměř v jakékoliv elektronice. Z tohoto důvodu je otázka jejich evoluce, vzhledem k efektivnějšímu uchovávání energie a dlouhé životnosti, ještě důležitější. Jako jeden z nejzajímavějších přístupů nové generace Li-iontových baterií je využití anodického materiálu na bázi křemíku, jelikož jeho teoretická kapacita dosahuje až 4200 mAh/g. Vzhledem k běžně využívanému grafitovému materiálu, mluvíme o teoretickém nárůstu kapacity až 10krát. Nicméně s přítomností křemíku v lithiovém systému jsou spojeny specifické parazitní jevy, které zmíněný nárůst negativně znehodnocují. Křemík typicky degraduje vlivem extrémního mechanického stresu v závislosti na neustálých objemových změnách během elektrochemického procesu. V rámci této práce je navrženo řešení zmíněného nedostatku využitím nanokrystalického křemíku, který má velký potenciál zvládat mechanický stres. Hlavní zaměření následně představuje samotná příprava a optimalizace anodického materiálu pro technologie Li-ion baterií na základě kombinace nanokrystalického křemíku, vodivého materiálu, pojiva a rozpouštědla.

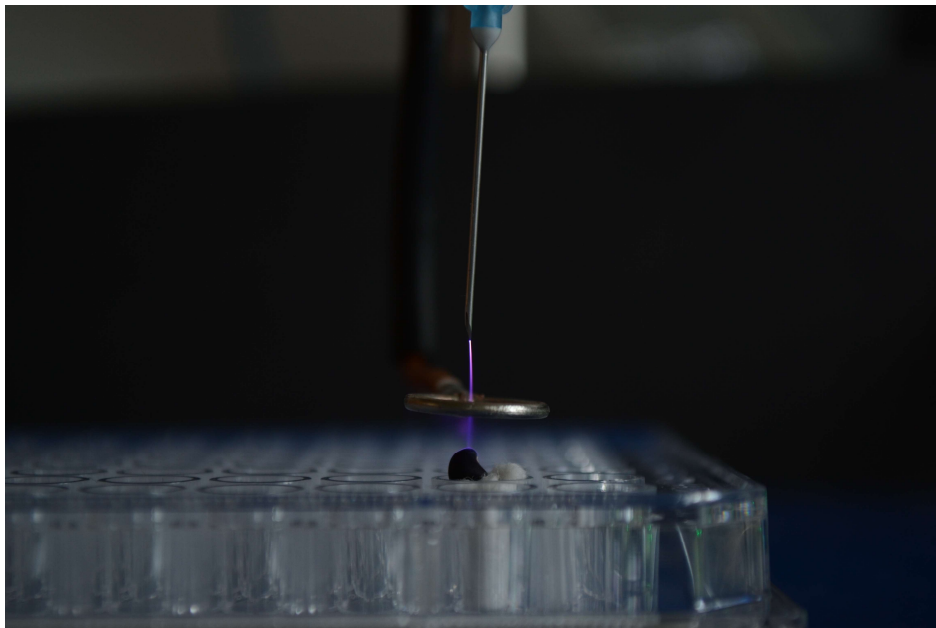


Studium vlivu nízkoteplotního plazmatu na vlastnosti semen

Vít Smutný (B3)

Školitel: Dr. Mgr. Jana Jirešová

Snaha o ovlivnění určitých vlastností různých druhů semen je po světě rozšířená už desítky let. Při těchto typech experimentů se používají nejčastěji dormantní semena, která mají poměrně tlusté osemení. Tato ochranná vrstva způsobuje i dočasné zastavení či omezení fyziologických procesů uvnitř semene za cílem úspory energie až do doby, kdy budou pro semeno příznivé podmínky k uvolnění energie a počátku klíčení. K obejití tohoto stavu je používáno nízkoteplotní plazma, což je částečně ionizovaný plyn a obsahuje chemicky aktivní částice jako jsou reaktivní formy kyslíku a dusíku, UV fotony, elektrony a ionty. V našem případě je plazma generováno na aparatuře skládající se z injekční jehly, která je připojena ke kladné svorce zdroje vysokého napětí a kovového kroužku, který je připojen ke svorce záporné. Díky tomuto zapojení je vytvořen kometární výboj vycházející z jehly, procházející skrz kovový kroužek, který pomáhá směřovat aktivní částice. Pod ním je umístěn držák se semenem, které je těmito částicemi "bombardováno". Kontakt osemení s aktivními částicemi plazmatu způsobuje jeho postupné porušování a umožnění snazšího průniku vody pod ochrannou vrstvu semena. To zahájí kaskádu reakcí vedoucích k samotnému klíčení.

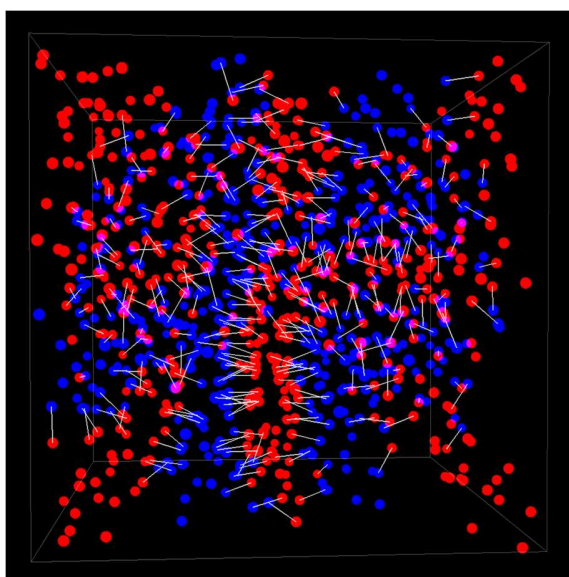


Vývoj výpočetního clusteru a jeho aplikace při simulacích molekulové dynamiky

Bc. Jan Hrudka (M1)

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

S neustálým posouváním Moorůvova zákona k jeho limitům, či dokonce jeho pokoření objevy posledních let, je realizace výpočetních simulačních úloh a experimentů v praxi stále častější. Jedním z přístupů simulace chemicko–fyzikálních vlastností látek je molekulová dynamika, které se v této práci věnuji, a to konkrétně její aplikaci na jednoduché více složkové systémy, jejich regulaci a analýzu. V teoretické části se tak zaměřuji na stručné uvedení do problematiky společně s vystavěním postupů k realizaci, optimalizaci a regulaci simulace samotné. Všechny takto získané zkušenosti aplikuji v experimentální části této práce, jejíž cílem je zdokumentovat průběh vývoje simulačního programu. Každá nová část simulace byla vystavena testům a aplikacím pro ověření její funkčnosti ale i správnosti, přičemž výsledky těchto experimentů jsou uvedeny ve výsledcích této práce, kde vidíme ať už aplikace termostatů, fázová rozhraní nemísitelných kapalin či vznik membrán z amfifilních molekul. Druhou částí mé práce bylo zhotovení prostředí k provozování série těchto simulací, clusteru. Ten byl sestaven za využití centrálního serveru a počítačů ústavu fyziky a měřicí techniky, kdy jejich dynamickou kombinací za pomoci mnou vyvanutého softwaru mi byl odemknut rozsáhlý výpočetní prostor.

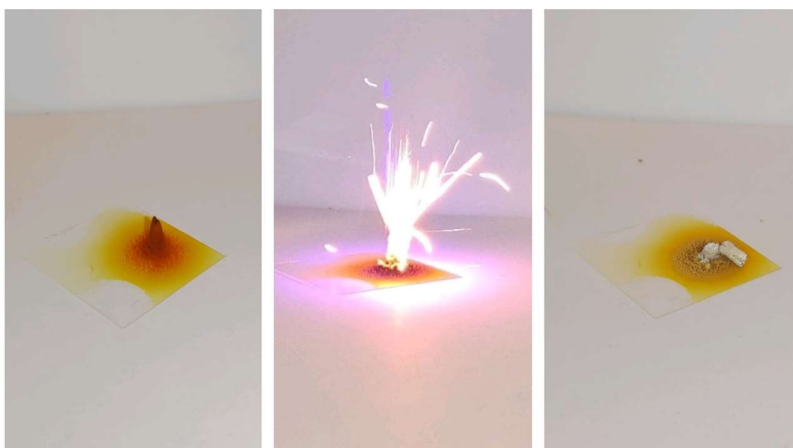


Nanostrukturní křemík a studium jeho vznětlivosti

Bc. Jakub Kopenec (M1)

Školitel: RNDr. Pavel Galář, Ph.D.

Rozvoj nových technologií se dnes může zdát nezastavitelný, existují ale omezení, která brání v překračování jistých hranic. Jednou z těchto překážek je omezený rozsah fyzikálních a chemických vlastností běžných materiálů jako je elektrická vodivost, kvantový výtěžek, povrchová reaktivita a další. Jednou z cest, jak dále modifikovat tyto vlastnosti je přechod k nanostrukturním formám. Ty, díky významnému vlivu povrchu a kvantovým efektům, umožňují překračovat tuto hranici. Typickým příkladem jsou nanočástice křemíku. Křemík je díky svému hojnému zastoupení na Zemi a dobrým polovodičovým vlastnostem základem mnoha elektrických součástek a zařízení. Tyto nanočástice mají oproti makro křemíku i nové vlastnosti: vysoká efektivita generace světla, povrchová reaktivita, vázání vodíku za určitých podmínek s čímž je spojena i změna vznětlivosti. Přestože schopnost vázání vodíku je dnes významnou vlastností především pro energetiku, vysoká míra vznětlivosti je až na výjimečné případy nežádoucí. Má současná práce je tedy zaměřena na studium podmínek přípravy nanočástic křemíku s vázaným vodíkem a studiem jejich vznětlivosti. Syntéza probíhá metodou netermálního plasmatu, u které byl měněn používaný výkon a množství vodíku, kdy jejich zvyšování vedlo převážně ke snižování vznětlivosti.

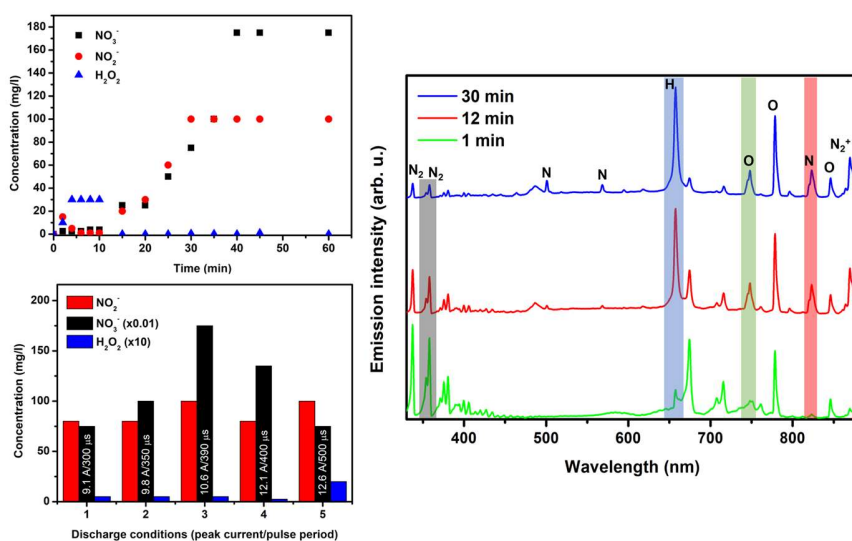


Optimalizace systému plazma aktivované vody pro vysokodusičnanové koncentrace

Bc. Filip Matějka (M1)

Školitel: RNDr. Pavel Galář, Ph.D.

Aplikace vysokoteplotního plazmatu jsou rozšířené v průmyslu i výzkumu. Plazmatické výboje při nízkých teplotách, tzv. nízkoteplotní plazma, má obdobný potenciál aplikačního rozšíření. Díky nízké teplotě jsou schopny jemné interakce s živými organismy či povrchy, které mohou být následně chemicky či biologicky modifikovány. Cílem práce je optimalizace systému nízkoteplotního plazmatu pro generování vysokých koncentrací dusíkatých specií ve vodě a objasnění efektu variability těchto koncentrací. V lokální vzdušné atmosféře plazmatického výboje dochází ke generování dusíkatých a kyslíkatých specií (radikálů), které interagují nejen v plynné fázi, ale přechází přes fázové rozhraní s kapalinou a v jejím objemu se rozpouští, vzniká tzv. plazma aktivovaná voda. Koncentrace a typ rozpuštěných specií ve vodě závisí na podmínkách reaktivní plynné fáze systému, kterými jsou geometrie reaktoru a vlastnosti vysokonapěťového pulzního výboje. Plynná fáze byla zkoumána emisní spektroskopií výboje a složení kapalná fáze pomocí koncentračních měření důležitých látek, tj. NO_3^- , NO_2^- a H_2O_2 . Výsledkem optimalizace bylo nalezení podmínek pro vysoké koncentrace NO_3^- (v řádu tisíců mg/l), bez přítomnosti reaktivního H_2O_2 , které jsou vhodné pro stabilní a efektivní modifikaci křemíkových nanokrystalů.



Konverzní filtr pro kriminalistickou a přírodovědnou UV fotografii na bázi nanočástic

Bc. Aneta Pagáčová (M1)

Školitel: Mgr. Anna Fučíková, Ph.D.

V kriminalistické i přírodovědné praxi se běžně setkáme s ozařováním biologických vzorků UV zářením k jejich zviditelnění či studiu luminiscence, což může vést ke strukturním změnám DNA a tím i degradaci genetického materiálu obsaženého ve vzorku. Biologické vzorky jsou schopné také sami o sobě emitovat UV záření procesem luminiscence nebo přirozeně se vyskytující UV záření odrážet reflektancí. Cílem této práce tedy bylo vytvořit filtr na bázi nanočástic či fluorescenčních barviv schopných absorbovat fotony UV záření a konvertovat je do viditelné oblasti. Díky této konverzi by bylo možné tyto fotony zachytit běžnou kamerou. Prvním krokem této práce bylo optimalizovat podmínky výroby PMMA filtrů a následně připravit filtry obsahující různé druhy nanočástic, fluorescenčních barviv nebo fluorescenčních inkoustů extrahovaných z permanentních popisovačů. U všech vyrobených filtrů byly zkoumány optické vlastnosti, homogenita, luminiscence a transmitance v závislosti na vlnové délce a tloušťce filtru. Na základě provedených měření bylo vyhodnoceno, že kromě nanočástic Leda sulfide CANdot, které emitují ve viditelné oblasti minimum záření, jsou všechny ostatní použité fluorescenční materiály vhodné na výrobu konverzních filtrů.

Nízko teplotná plazma ako nástroj modifikácie osteointegračných materiálov pre kostné náhrady

Bc. Matúš Toriška (M1)

Školiteľ: Dr. Mgr. Jana Jirešová

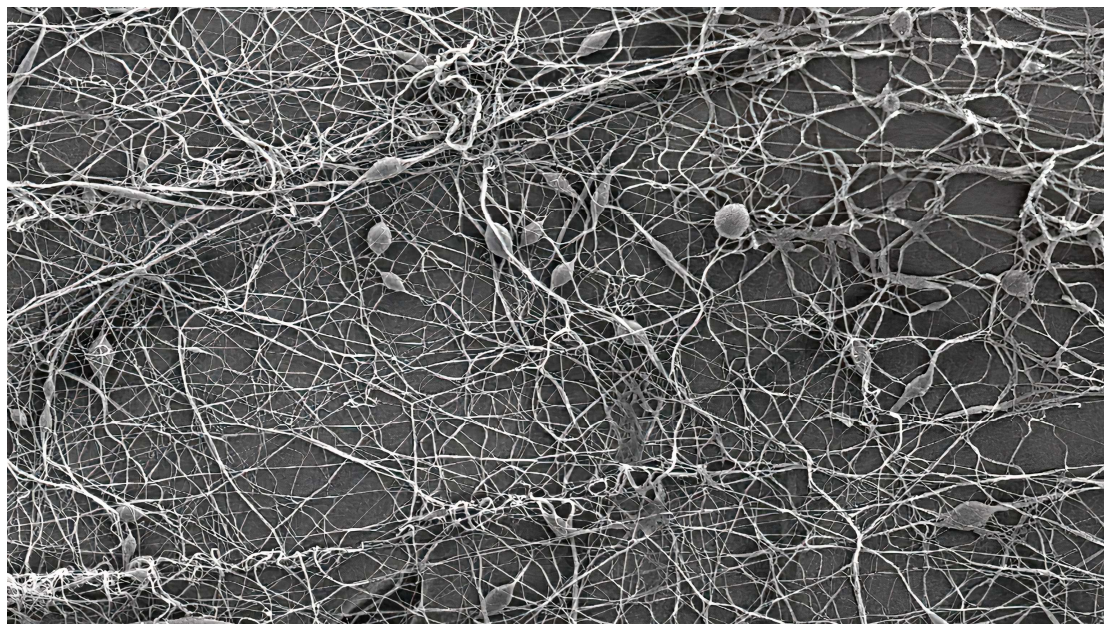
Projekt vznikol spoluprácou s ústavom experimentálnej medicíny Akadémie vied Českej republiky. Cieľom práce je modifikácia biomateriálov určených pre kostné implantáty. Modifikované sú tri hydroxyapatitové materiály - hydroxyapatit, kalcium deficientný hydroxyapatit a β -trikalciemfosfát. Biomateriály sú ošetrované nízko teplotnou plazmou za atmosférického tlaku na vzduchu, alebo vo vodnom prostredí. Hlavným efektom plazmatického ošetrovania je modifikácia povrchovej štruktúry a zvýšenie zmáčavosti materiálov, čo pomáha k vyššej miere adhézie buniek zapojených v kostnej remodelácii. Vizualne zmeny v povrchovej štruktúre sú sledované pomocou SEM analýzy a zmeny v povrchovom zložení modifikovaného materiálu sú sledované pomocou analýzy EDS. Rozdiely v zmáčavosti sú pozorované vďaka zmene kontaktného uhlu vody na modifikovanej vzorke. Nami ošetrované biomateriály ďalej putujú na ústav experimentálnej medicíny, kde sa bude overovať, či majú ošetrované vzorky pozitívny vplyv na rast buniek zapojených v kostnej remodelácii.

Studium bezpečnosti nanoroušek a nanorespirátorů

Bc. Karolína Kestlerová (M2)

Školitel: Ing. Josef Khun, Ph.D.

Nanoroušky se staly běžnou a důležitou součástí našeho života v posledních dvou letech kvůli koronavirové pandemii. Nanomateriály v nich použité na jednu stranu zvyšují jejich účinnost proti zachyceným mikroorganismům, ale na druhou stranu, pokud by docházelo k jejich uvolnění do dýchacích cest, představovaly by zdravotní riziko. Mezi tato rizika patří například mutace DNA, poškození proteinů, produkce kyslíkových radikálů a další. Mezi nejčastěji používanými nanomateriály patří AgNO_3 , TiO_2 , C (CNT – carbon nanotubes), atd. V rámci této práce bylo testováno několik vybraných nanoroušek a nanorespirátorů dostupných běžně na trhu. Nejprve byly metodou SEM a EDX charakterizovány všechny vrstvy ve vzorcích z hlediska jejich struktury a prvkového složení. Vždy v jedné z nich by se měl nacházet nanomateriál. Na obrázku 1 lze vidět právě jednu z takových možných struktur. Poté byla navržena a zkonstruována jednoduchá aparatura na testování nanoroušek a nanorespirátorů z hlediska možného uvolňování (nano)materiálu. Vzorky byly změřeny při parametrech odpovídajících lidskému dechu.

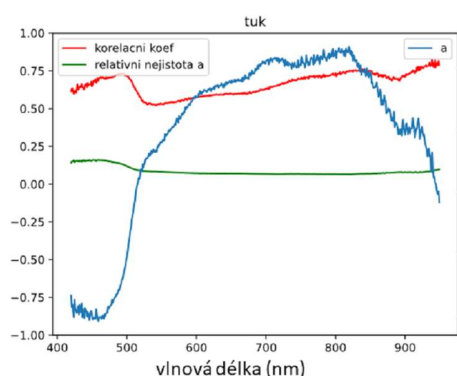


Studium možností provozního testování mléka optickými metodami

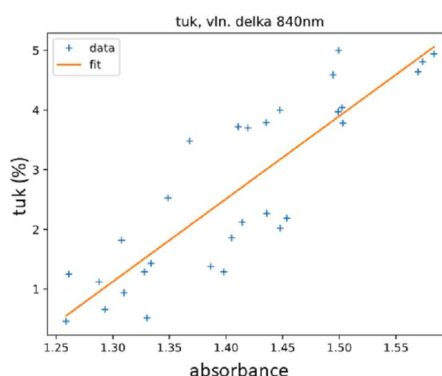
Bc. Marcela Korcová (M2)

Školitel: Ing. Ladislav Fišer, Ph.D.

Kvalita mléka stáda skotu je podstatným ukazatelem sledování zdravotního stavu zvířat i ekonomiky provozu. Pravidelně se kontroluje při tzv. kontrole užitkovosti prováděné jednou měsíčně. Při KU se zjišťuje dojivost a obsah tuku, bílkovin a laktózy a dalších. Jelikož zdravotní stav dojnice se může měnit rychleji, byla by výhoda, možnost sledovat některé parametry mléka přímo na dojírně za provozu. Při návrhu takového analyzátoru je potřeba zohlednit podmínky na dojírně, musí být dostatečně robustní, musí být z materiálů, vhodných pro styk s potravinami. Jednou z možností je využití optických metod, přičemž se využívá optických vlastností závislých na složení mléka. V úvahu přichází nefelometrie (odražené světlo) či turbidimetrie (prošlé světlo). Intenzita prošlého, resp. odraženého světla je při experimentech zaznamenávána pomocí spektrometru s rozsahem vlnových délek od 350 do 1000 nm. Cílem experimentů je vytypovat si vlnovou délku, při které dojde k maximální absorpci či rozptylu záření vzorkem v závislosti na obsahu tuku, bílkoviny či laktózy. Pro provozní měření kvality mléka se na základě těchto experimentů navrhne vhodný zdroj záření (LED nebo polovodičový laser) a detektor (fotodioda či fototranzistor).



Závislost korelačního koeficientu (levá y) a směrnice (pravá y) lineární závislosti na vlnové délce – výběr vhodné vlnové délky



Ověření proložené závislosti absorbance (osa x) a tučnosti mléka (osa y) pro vlnovou délku 840 nm

Příprava Arduino obvodu a programu pro otvírání/závírání optiky laseru k přípravě citlivých vrstev senzorů

Bc. Oskar Marelja (M2)

Školitel: prof. Ing. Dr. Martin Vrňata

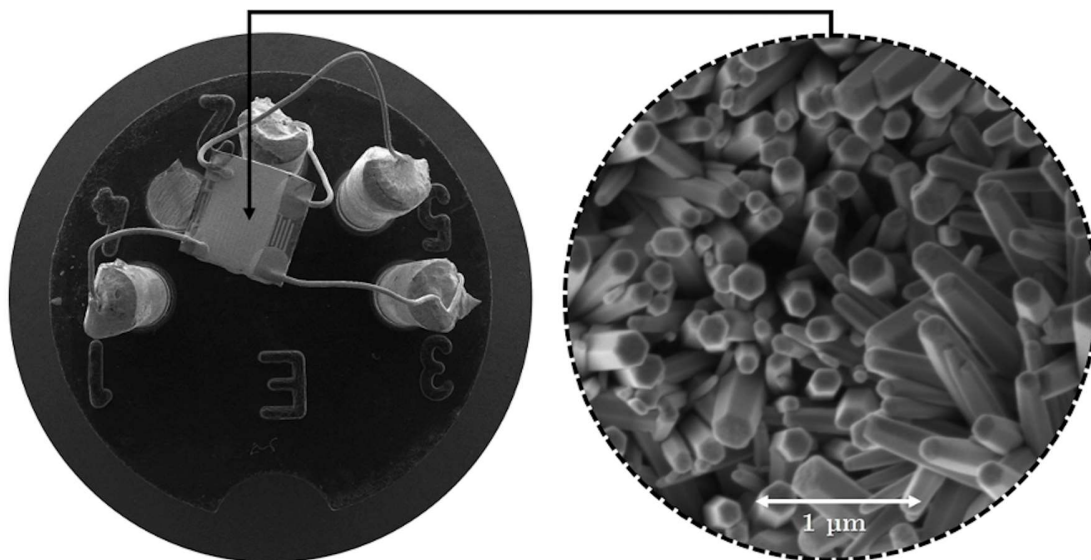
V rámci práce byl vytvořen Arduino systém, jehož úkolem je pomáhat s pulzní laserovou depozicí při vytváření citlivých vrstev senzorů. Jedná se o jednoduchý stavový automat se třemi stavy - výběr stavu, stav nastavování počtu pulzů a stav počítání pulzů na vstupu. Software je psán v jazyce Arduino. Hardware je Arduino UNO, mechanické relé, display (LCD/OLED) a 16-tlačítková klávesnice.

Detekce plyných látek vznikajících bakteriálním rozkladem živočišné tkáně

Bc. Lucie Vabroušková (M2)

Školitel: Ing. Přemysl Fitl, Ph.D.

Při rozkladu živočišné tkáně dochází ke vzniku směsí plyných látek, které spadají do kategorie VOC (Volatile Organic Compounds), tedy vysoce těkavé organické sloučeniny. Takovými sloučeninami jsou například alkoholy, aldehydy, ketony, organické kyseliny a jejich estery. V této práci se zaměřuji na analýzu vybraných látek, a to především analýzu alkoholů a aldehydů (dekanal, nonanal, butanol, pentanol a hexanol). Vybrané VOC analyzuji pomocí hmotnostní spektrometrie (plynový analyzátor Omnistar GSD 320 – rozsah do 300 amu), a následně i senzory s nanostrukturovaným povrchem. U každé látky byl proměřen její rozpad s různým nastavením ionizačního zdroje hmotnostního spektrometru. Následně byly vybrané látky o koncentracích 50 ppm proměřeny jak hmotnostním spektrometrem, tak senzorem s aktivní vrstvou tvořenou ZnO nanodráty (viz. obrázek). Účelem tohoto srovnání je porovnat parametry (mez detekce, rychlost odezvy) připravených senzorů s parametry komerčního analyzátoru s hmotnostním spektrometrem.



chemorezistor s nanodráty ZnO

Ústav počítačové a řídicí techniky (445)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Iva Nachtigalová, Ph.D.

SEZNAM SEKCI

1. [Aplikovaná informatika a kybernetika I](#)
2. [Aplikovaná informatika a kybernetika II](#)

SPONZOŘI ÚSTAVU POČÍTAČOVÉ A ŘÍDICÍ TECHNIKY



Aplikovaná informatika a kybernetika I

MÍSTO: A40

KOMISE

Ing. Iva Nachtigalová, Ph.D. (předseda)

Ing. Jan Vrba, Ph.D.

RNDr. Pavel Cejnar, Ph.D.

Ing. Jan Švihlík, Ph.D.

PROGRAM

08:15 **zahájení**

08:30 [Bc. Ondřej Vácha](#) (M1, Ing. Olga Rubešová)

Analýza a zpracování obrazu z termální kamery Panasonic grid-eye

08:50 [Bc. Matěj Fričl](#) (M2, prof. Ing. Aleš Procházka, CSc.)

Adaptivní rozpoznávání obrazových segmentů

09:10 [Bc. Jakub Tomeš](#) (M1, Ing. Olga Rubešová)

Utilization of ESP32 for object detection applications

09:30 [Jakub Seiner](#) (B2, Ing. Jan Vrba, Ph.D.)

Počítačová aplikace pro analýzu dat pomocí detekce novosti

09:50 [Bc. Adéla Nováková](#) (M2, Ing. Jan Vrba, Ph.D.)

SCADA systém pro zkušebnu elektrických motorů

10:10 [Bc. Tomáš Jirsa](#) (M1, Ing. Jan Vrba, Ph.D.)

Generování syntetických snímků hydrogelových robotů pomocí generativních kompetitivních neuronových sítí

10:30 [Bc. Patrik Valábek](#) (M1, Ing. MSc. Martin Klaučo, PhD., Slovenská technická univerzita v Bratislave)

Bezdotykové ovládanie zariadení gestami rúk

10:50 [Bc. Monika Špáková](#) (M1, Ing. Richard Valo, Ph.D., Slovenská technická univerzita v Bratislave)

Konštrukcia a programovanie robotického vozidla so všesmerovými kolesami

vyhlášení výsledků

Analýza a zpracování obrazu z termální kamery

Panasonic grid-eye

Bc. Ondřej Vácha (M1)

Školitel: Ing. Olga Rubešová

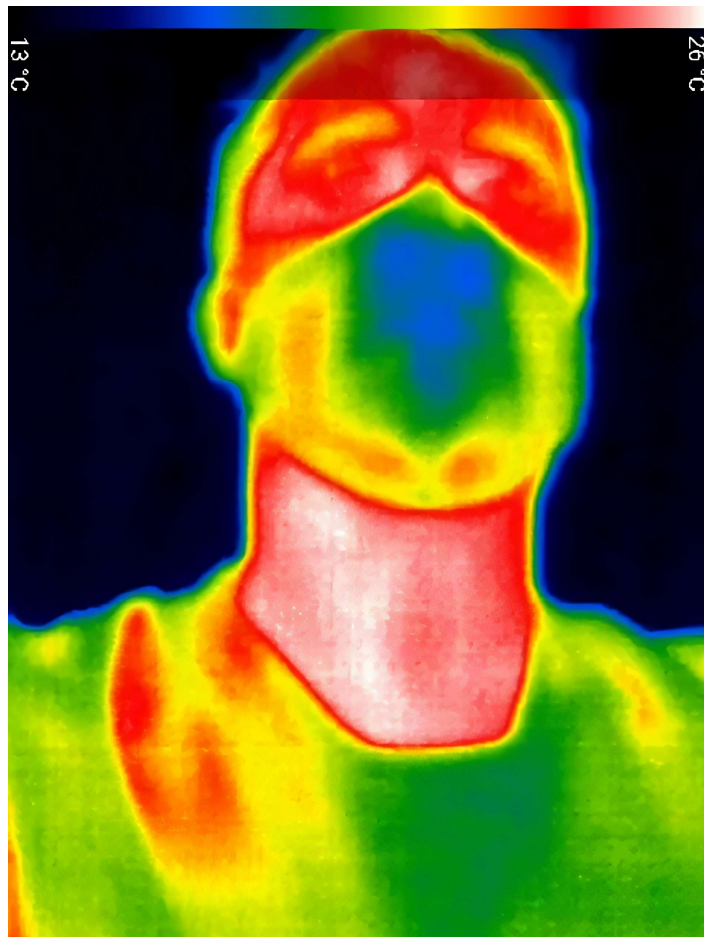
Termální kamery jsou využívány v celé škále odvětví. Svoje uplatnění nacházejí například při kontrolách teplot různých mechanických částí, při detekci úniků tepla v domech nebo se také využívají jako senzory pro detekci gest. V této práci za pomoci cenově dostupné termální kamery Grid-EYE od Panasonic navrhuji, vytvářím a testuji systém pro analýzu a zpracování obrazových dat. Celý systém je navržen na Raspberry Pi a napsán v jazyce Python. Zvolená termální kamera Panasonic Grid-EYE má rozlišitelnost 8x8 pixelu. Právě z důvodu malého rozlišení kamery, které neumožňuje snadnou identifikaci zkoumaného objektu, se v práci také věnuji interpolaci dat pro zjemnění výsledného obrazu. Zpracované a upravené pole dat z termální kamery je následně zobrazováno pomocí knihovny matplotlib do obrázkového formátu png. V závěru práce porovnávám získaná data z Grid-EYE kamery s daty z komerčně dostupných termálních kamer. Dále by se dalo pokračovat zakomponováním neuronové sítě pro rozlišení předem naučených scén, například odlišit hořící oheň a horkou ploténku na sporáku.

Adaptivní rozpoznávání obrazových segmentů

Bc. Matěj Fričl (M2)

Školitel: prof. Ing. Aleš Procházka, CSc.

Dobrá interpretace termografického videa je důležitá pro správné stanovení fyziologických funkcí člověka. Cílem této práce je strojové rozpoznávání číslic na barevných termogramech naměřených termokamerou Seek Thermal FF pro zařízení Android, jejich následný převod na teplotní matici a spolu s daty z pulsmetru a oxymetru vyvinout metodiku pro sledování fyziologických funkcí člověka zatěžovaného na rotopedu s respirátorem a bez něj. Klasifikace pomocí dvouvrstvé neuronové sítě zahrnuje sestavení matice příznaků, trénování a validaci výsledků.



Utilization of ESP32 for object detection applications

Bc. Jakub Tomeš (M1)

Školitel: Ing. Olga Rubešová

The ESP32 is an inexpensive embedded platform with enough processing power for light machine learning tasks. The ESP32-Cam development board combines an ESP32-S module with an OmniVision OV2640 camera module. This combination allows high resolution image data acquisition, along with light image analysis and wireless communications. More involved calculations can be carried out by an AI accelerator like the EDGE TPU or a cloud platform by utilizing the wireless capabilities of the ESP32. This work aims to assess the possibilities of the ESP32 platform by designing a machine learning model capable of identifying whether a license plate is present in the current camera feed. Transfer learning is utilized in order to simplify dataset acquisition and reduce compute time required to train a viable machine learning model.

Počítačová aplikace pro analýzu dat pomocí detekce novosti

Jakub Seiner (B2)

Školitel: Ing. Jan Vrba, Ph.D.

Detekce novosti je ve zpracování signálů poměrně důležitou metodou se značným potenciálem využití. Jedním z míst, kde leží její využití je například zdravotnictví nebo internetová bezpečnost (detekce demence z EEG, detekce podvodného přihlášení). Jejím cílem je hledání abnormalit ve velkém množství dat. Jedním z možných přístupů k detekci novosti je využití tzv. adaptivních metod. Adaptivní metody detekce novosti jsou implementovány v knihovně PADASIP. Pro její využití bylo ale doposud potřeba mít alespoň elementární znalosti programování v jazyce Python, což s aplikací, o které pojednává tento příspěvek, už nebude potřeba. V rámci projektu bylo vytvořeno grafické uživatelské rozhraní k této knihovně vhodné pro použití neobornou veřejností. Uživateli je umožněno načíst soubor s daty, vybrat danou časovou řadu, typ adaptivního filtru a jeho parametry a zobrazit si v interaktivní formě výsledek několika metod detekce novosti a porovnávat různé přístupy. Uživatel si může výsledky svého zpracování ukládat ve formě obrázků a textových souborů, ve kterých jsou uložena potřebná nastavení programu.

SCADA systém pro zkušebnu elektrických motorů

Bc. Adéla Nováková (M2)

Školitel: Ing. Jan Vrba, Ph.D.

Cílem práce je sestavit testovací stand na měření charakteristik elektrických motorů, navrhnout a implementovat nadřazený řídicí kontrolér, který bude posílat požadavky do řídicích jednotek dílčích částí a monitorovat stav systému přes síť zabudovaných senzorů.

Generování syntetických snímků hydrogelových robotů pomocí generativních kompetitivních neuronových sítí

Bc. Tomáš Jirsa (M1)

Školitel: Ing. Jan Vrba, Ph.D.

Hydrogeloví roboti jsou malé objekty s rozměrem v řádu stovek mikrometrů, které lze ovládat pomocí laserového paprsku. Roboty je možné spojovat do větších komplexnějších celků, které pak mohou poskytovat nové funkce. K manipulaci s roboty slouží automatická platforma, na níž jsou roboti lokalizováni pomocí kamery a následně jsou automaticky zaměřováni a ozařováni laserovým paprskem. Experimenty jsou však časově náročné a proto by bylo vhodné vytvořit digitální dvojče této platformy pro ověření funkcionality nových robotů, testování algoritmů pro jejich lokalizaci, plánování tras atp., což by umožnilo testovat celou řadu problémů spjatých s touto problematikou in silico, včetně fotorealistické vizualizace. Cílem této práce je ověřit, zda lze generovat fotorealistické obrazy mikrorobotů pomocí kompetitivních neuronových sítí (GAN), aby mohly být použity jako fotorealistický výstup simulace a případně tuto síť navrhnout, natrénovat a optimalizovat.

Bezdotykové ovládanie zariadení gestami rúk

Bc. Patrik Valábek (M1, Slovenská technická univerzita v Bratislave)

Školiteľ: Ing. MSc. Martin Klaučo, PhD.

V práci sa venujeme rozpoznávaniu statických gest rúk v reálnom čase. Využitím polohy ruky na obrazovke v kombinácii s rozpoznaným gestom sa nám podarilo plne nahradiť myšku zariadenia. Vytvorený program je naprogramovaný v jazyku Python. Venovali sme sa úlohám ako rozpoznávanie ruky od pozadia, tréning a testovanie rozpoznávacieho algoritmu a ovládanie zariadenia v reálnom čase. V prvej časti je potrebné pomocou web kamery zachytiť práve ruku užívateľa. Nasnímame samostatne pozadie a odfiltrujeme ho aby sme dostali obraz našej ruky. Pomocou takéhoto spôsobu si vytvoríme databázu obrázkov. Ruka bude znázorňovať rozličné gestá v rôznych polohách a vzdialenostiach od kamery. Pre rozpoznávanie gest použijeme konvolučné neurónové siete (CNN). CNN sú známe ako trieda neurónových sietí používaných na rozpoznávanie obrazu a klasifikácia. Budeme porovnávať jednotlivé siete, ktoré sme natrénovali. Pozrieme sa aj na to, ako vplýva zmena svetelnej jasnosti gesta na presnosť predikcie. V poslednej časti sa pokúsime predikciu z CNN previesť na akčný zásah do zariadenia. Akonáhle CNN dané gesto rozozná, vyšle príkaz do systému. Okrem gest, snímame aj polohu ruky, čím vieme zabezpečiť pohyb kurzora po obrazovke.

Konštrukcia a programovanie robotického vozidiel so všesmerovými kolesami

Bc. Monika Špaková (M1, Slovenská technická univerzita v Bratislave)

Školiteľ: Ing. Richard Valo, Ph.D.

V posledných desaťročiach priťahuje pozornosť všesmerový mobilný robot, ktorý má širokospektrálne využitie. Pri robotoch využívame všesmerové kolesá, ktoré sa môžu pohybovať do všetkých smerov. V práci sa zaoberáme zhotovením a ovládaním dvoch robotických vozidiel. Pri prvom robotovi využívame riadiacu jednotku EV3 z rady LEGO MINDSTORMS a v druhom robotovi je zavedený modul WEMOS ESP32. Oba roboty sú skonštruované tak, aby bolo umožnené ich vzdialené ovládanie. Využitý je infračervený senzor pri prvom vozidle, ktorý zachytáva signál z infračerveného ovládača. Vozidlo s modulom ESP32 je ovládané pomocou mobilnej aplikácie, ktorá spočíva v Bluetooth komunikácii medzi zariadením a vozidlom. Pomocou senzorov pre meranie vzdialenosti sme u vozidiel naprogramovali autonómne parkovacie manévry. Tieto manévry spočívali v hľadaní parkovacieho miesta do ktorého by vozidlo zaparkovalo a následné zaparkovanie podľa senzorov a vyparkovanie na pôvodné pozície. Pri prvom vozidle sme taktiež navrhli program pre vyhýbanie sa nehybnej prekážke.

Aplikovaná informatika a kybernetika II

MÍSTO: A335

KOMISE

doc. Ing. Dušan Kopecký, Ph.D. (předseda)

doc. Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D.

Ing. Hana Soušková, Ph.D.

Ing. Lukáš Mrazík

PROGRAM

08:15 **zahájení**

08:30 [Bc. Tereza Svatoňová](#) (M2, RNDr. Michal Kolář, Ph.D.)

Struktura a dynamika zúžení peptidového tunelu v ribozomu

08:50 [Bc. Ondřej Skládal](#) (M1, doc. Ing. Dušan Kopecký, Ph.D.)

Měření pohody prostředí pomocí meteorologické stanice

09:10 [Bc. Markéta Štejdířová](#) (M1, doc. Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D.)

PLGA systémy s kolchicinem pro cílené dodávání léčiv

09:30 [Anna Kovárnová](#) (B3, Ing. Martin Isoz, Ph.D.)

Redukce řádu modelu pomocí vlastního ortogonálního rozvoje s posuvem a umělých neuronových sítí

09:50 [Bc. Ondřej Golda](#) (M2, Ing. Jan Vrba, Ph.D.)

Systém pro měření objemového koeficientu přestupu hmoty

10:10 [Bc. Timotej Piták](#) (M2, Ing. Jan Vrba, Ph.D.)

Path planning for microrobots

10:30 [Bahadır Mert Erdugan](#) (M1, doc. Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D.)

Preparation and characterization of PLGA microparticles for drug delivery

10:50 [Bc. Tímea Mészáros](#) (M1, doc. Ing. Radoslav Paulen, Ph.D., Slovenská technická univerzita v Bratislave)

Modelovanie laboratórnej destilačnej kolóny v gPROMS ModelBuilder

vyhlášení výsledků

Struktura a dynamika zúžení peptidového tunelu v ribozomu

Bc. Tereza Svatoňová (M2)

Školitel: RNDr. Michal Kolář, Ph.D.

Syntéza proteinů je pro život naprosto nezbytná, protože proteiny se účastní všech dějů v živých organismech. Klíčovou roli při proteosyntéze hraje komplex zvaný ribozom, který je zodpovědný za vznik peptidové vazby mezi jednotlivými aminokyselinami tvořícími proteiny. Tyto vazby vznikají hluboko v ribozomu a rodící se protein posléze putuje výstupním tunelem, který má proměnlivou šířku a v nejužším místě je tvořen ribozomálními proteiny uL22 a uL4. Význam tohoto zúžení zatím není známý. K lepšímu pochopení jeho významu nám mohou pomoci počítačové simulace, ty ovšem generují rozsáhlá data a je zapotřebí je efektivně a přesně interpretovat. Vhodným nástrojem k popisu struktury a dynamiky zúžení by měla být konstrukce Markovova stavového modelu (MSM), který v ideálním případě umožní zhrubený popis termodynamického a kinetického chování. Ještě před zahájením konstrukce MSM je vhodné simulace analyzovat pomocí střední kvadratické odchylky atomárních pozic (RMSD). Analyzována byla sada 4 trajektorií ribozomu, výpočty RMSD naznačují asi 4 hlavní konformace proteinu uL22 a asi 2 hlavní konformace uL4.

Měření pohody prostředí pomocí meteorologické stanice

Bc. Ondřej Skládal (M1)

Školitel: doc. Ing. Dušan Kopecký, Ph.D.

Cílem práce bylo vytvořit webovou aplikaci schopnou zpracovávat a zobrazovat data, naměřená meteorologickou stanicí Vantage Pro2 a senzorem kvality ovzduší Airlink od společnosti Davis Instrument. V samotném počátku řešení bylo nutné navrhnout, jaká data budou vykreslována, včetně jejich podoby, a to vše v závislosti na dostupném hardware a software. Ke zpracování a vykreslování bylo přistupováno více způsoby. V aplikaci se zobrazují jednak trendy vývoje veličin ve formátu *.png, které jsou generovány přímo na straně meteorologického serveru Meteoberry, který je propojen s konzolí Davis Vantage Pro2. Dále jsou zobrazovány aktuální hodnoty měřených veličin, které jsou získány z XML souboru, generovaného meteoseverem Meteoberry. Poslední způsob je sběr dat přímo z cloudu WeatherLink společnosti Davis Instruments. Na cloud jsou data průběžně nahrávána přes WeatherLink Live, což je samostatně fungující interní jednotka, schopná sbírat data z meteorologické stanice, či dalších přídatných senzorů. Součástí řešení je také popis probíhající komunikace, použitého software a hardware a postupu pro zobrazování meteorologických dat ve webové aplikaci.

Projekt INI-2 Úvod Vývoj vnitřního měření Vývoj venkovního měření Informace o stanici a Meteoberry Informace k projektu Zdroje

Aktuální hodnoty měřených veličin

Aktuální hodnoty Průměrné hodnoty v rámci hodiny Průměrné hodnoty v rámci dne

Čas posledního měření: 24.03.2021 17:12:01

Vnitřní teplota [°C]	19.3
Tlak na konzoli [hPa]	993.3
Vnitřní vlhkost [%]	31

Aktuální hodnoty

Vytvořil
Jméno: Ondřej Skládal
Email: skladal@vscit.cz

PLGA systémy s kolchicinem pro cílené dodávání léčiv

Bc. Markéta Štejdířová (M1)

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

Vývoj systémů pro dodávání léčiv založený na polymerních nanočásticích může řešit jednu z hlavních výzev při boji s rakovinou, a to zlepšení biologické dostupnosti léčiva v těle. Hlavním cílem je tedy vytvoření takového systému, který podpoří cílení léčiva a umožní mu kontrolované uvolňování. Zároveň musíme myslet na velkou toxicitu cytostatických léčiv a na možnosti ochrany zdravých buněk. Kopolymer kyseliny glykolové a kyseliny mléčné (poly(lactide-co-glycolide) - PLGA) patří k nejpoužívanějším biologicky odbouratelným polymerům, pro jeho dobrou biologickou kompatibilitu a možnost kontrolovatelné degradace hydrolýzou. Další výhodou je možná úprava povrchu PLGA na požadované vlastnosti (např. zvýšení rozpustnosti). Uzavření kolchicinu do polymerního systému má potenciál z důvodu cytostatických účinků kolchicinu, ale zároveň pro snížení jeho vysoké toxicity.

Redukce řádu modelu pomocí vlastního ortogonálního rozvoje s posuvem a umělých neuronových sítí

Anna Kovárnová (B3)

Školitel: Ing. Martin Isoz, Ph.D.

Z důvodu nároků průmyslu 4.0 na digitalizaci vývoje technologií a pokročilé řízení systémů roste složitost modelů běžně využívaných v inženýrské praxi. To s sebou přirozeně přináší rostoucí výpočetní čas nutný k vyhodnocení těchto modelů, což komplikuje jejich využití v optimalizaci či řízení procesů. Jedním z možných řešení tohoto problému jsou metody redukce řádu modelu, které snižují výpočetní náročnost opakovaného vyhodnocení modelu při změně jeho parametrů. Jednou z rozšířených metod redukce řádu modelu je metoda kombinující vlastní ortogonální rozvoj (ang. proper orthogonal decomposition, POD) s Galerkinovou projekcí (GP). Tato metoda má však dvě hlavní omezení, (i) GP vyžaduje znalost rovnic popisující daný problém, a (ii) výstup redukovaného modelu vytvořeného POD je rekonstruován superpozicí v čase neměnných prostorových struktur, což se ukazuje jako nevhodné pro systémy s dominantním transportem. Cílem této práce je odstranění těchto dvou omezení, (i) nahrazením GP umělou neuronovou sítí, a (ii) kombinací POD s časově závislým transportním operátorem umožňujícím efektivní zpracování systémů s významnou transportní složkou. Vyvíjené metody a jejich výhody jsou ilustrovány na příkladech z oblasti výpočetní dynamiky tekutin.

Původní model

(2 kuličky transportované doménou)



Redukovaný model s využitím POD



16 módů

Redukovaný model s využitím sPOD



2 módy (⇒ osmkrát méně dat)

Systém pro měření objemového koeficientu přestupu hmoty

Bc. Ondřej Golda (M2)

Školitel: Ing. Jan Vrba, Ph.D.

Cílem tohoto projektu je sestavit funkční systém pro měření objemového koeficientu přestupu hmoty. Tento koeficient je klíčovým parametrem pro výpočet aerační kapacity bioreaktorů (fermentorů). Přímé využití je v navrhování fermentorů a určování optimálních rychlostí otáček míchadel. Projekt vychází ze zastaralého řešení tohoto systému, který byl umístěn v laboratořích chemického inženýrství (VŠCHT Praha) a je založen na úzké spolupráci s ústavem Chemického inženýrství na VŠCHT Praha. Obsahem projektu je analýza zmíněného procesu měření objemového koeficientu přestupu hmoty s kolegy z chemického inženýrství, následně pak na základě zjištěných informací návrh a nákup všech potřebných zařízení pro stavbu celé aparatury a v neposlední řadě pak nastavení všech potřebných členů systému a tvorba softwarového řešení celého měření.

Path planning for microrobots

Bc. Timotej Piták (M2)

Školitel: Ing. Jan Vrba, Ph.D.

Soft robotics is a relatively new field, so even their basic locomotion needs to be researched. The thesis provides an overview of the classic path planning approaches and investigates two of them on an automated platform for hydrogel microrobots. The algorithms were tested and compared by path length, computation time, and ability of robots to follow the path by calculating the ratio of planned path and actual path which the robot took. A* and the optimal version of rapidly exploring random trees (RRT*) were implemented for the experiment. Taken together, the findings suggest that A* is more suitable. Path length for five maps was always shorter with A*, and average computation time was 5.40 seconds, while rapidly exploring trees yielded results in 9.78 seconds. The ratio of the path was 0.51 and 0.57 using A* and RRT*, respectively. The final number is in favor of RRT*. However, RRT* had outliers present and the calculated values had high variance, while results using A* were approximately the same with low variance. This kind of unpredictability using RRT* is hardly desirable, so A* was also considered as better in this aspect. Thus, the A* is more appropriate for microrobots used for the thesis.

Preparation and characterization of PLGA microparticles for drug delivery

Bahadir Mert Erdugan (M1)

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

Polymeric microparticles are very popular carriers that are used to enhance the bioavailability (e.g., poorly water soluble drugs) and the bio-distribution of the active pharmaceutical ingredients (APIs). Among the different types of polymers, poly(D, L-lactide-co-glycolide) (PLGA) is a widely studied and FDA-approved polymeric drug delivery vehicle. The main role of the PLGA is to carry and control the kinetics of the API release and therefore effective release of the API. Despite these advances, there is a lack of knowledge about the relationship between the structural features of the polymeric carrier, API–polymer miscibility, encapsulation efficiency, and API release profile. Therefore, as a model study, PLGA based microparticles were prepared by oil-in-water (o/w) single emulsion using four APIs (i.e., indomethacin, ibuprofen, naproxen, and paracetamol) at different API loadings. The effect of the processing conditions on the properties (shape, mean size, etc.) of the particles was studied. The drug loading, encapsulation efficiency, physico-chemical and solid state properties of the microparticles were investigated using various analytic techniques. The relationship between the latter properties and the API–polymer miscibility was established.

Modelovanie laboratórnej destilačnej kolóny v gPROMS ModelBuilder

Bc. Tímea Mészárosová (M1, Slovenská technická univerzita v Bratislave)

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

Destilačný proces tvorí dôležitú súčasť mnohých priemyselných odvetví. Presný matematický model môže byť užitočný nástroj na simuláciu podmienok, ktorých identifikácia na fyzickom zariadení je nereálna alebo príliš finančne náročná. Preto sme sa rozhodli zostrojiť matematický model laboratórnej destilačnej kolóny v pokročilom programe gPROMS ModelBuilder, ktorý je navrhnutý pre modelovanie chemickotechnologických procesov. Vzhľadom na to, že destilačná kolóna je pomerne komplexný systém, celkový model bol vytvorený postupne a skladá sa z čiastkových modelov, ako napríklad varák, kondenzátor a destilačná kolóna. Navrhnutý model sa následne ladí podľa parametrov reálnej destilačnej kolóny. Funkčnosť vytvoreného modelu v programovom prostredí gPROMS ModelBuilder sme overili porovnaním simulačných výsledkov a experimentálnych dát. Vzhľadom na dosiahnuté výsledky možno konštatovať, že navrhnutý model má pomerne vysokú presnosť v porovnaní s reálnou destilačnou kolónou a verne opisuje jej správanie. Počas modelovania sme uvažovali separáciu binárnej zmesi metanol-voda. V budúcnosti by sme sa chceli daný model zovšeobecniť a aplikovať aj pre separáciu ďalších zmesí.