

**SVK**

**STUDENTSKÁ  
VĚDECKÁ  
KONFERENCE**  
FCHI VŠCHT PRAHA

**2025**

**Sborník anotací**



**FAKULTA  
CHEMICKO-INŽENÝRSKÁ  
VŠCHT PRAHA**



# Fakulta chemicko-inženýrská

## Organizační tým

### FAKULTNÍ KOORDINÁTOR

doc. Ing. Jitka Čejková, Ph.D.

### ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOŘI

402 Ústav analytické chemie

Ing. Martin Člupek, Ph.D.

403 Ústav fyzikální chemie

doc. Ing. Ondřej Vopička, Ph.D.

409 Ústav chemického inženýrství

doc. Dr. Ing. Pavlína Basařová

444 Ústav fyziky a měřicí techniky

RNDr. Pavel Galář, Ph.D.

446 Ústav matematiky, informatiky a kybernetiky

Ing. Iva Nachtigalová, Ph.D.

[fchi.vscht.cz/svk](http://fchi.vscht.cz/svk)





# SVK

# STUDENTSKÁ VĚDECKÁ KONFERENCE FCHI VŠCHT PRAHA

# 2025



FAKULTA  
CHEMICKO-INŽENÝRSKÁ  
VŠCHT PRAHA

20. listopadu

## Děkujeme sponzorům SVK 2025

### Zlatí sponzoři

**ZENTIVA**



**ORLEN**  
UNIPETROL

**PRO.MED.CS**  
Praha a.s.

### Stříbrní sponzoři



**MSD**



**NICOLET CZ**  
MOLECULAR SPECTROSCOPY



**FZU**

**SIDAT**  
AUTOMATION-INFORMATICS

### Bronzoví sponzoři



**mondi**

**pinflow**  
energy storage

**SPOLCHEMIE**

**synthos**



**MemBrain**



**arxada**

**EATON**  
Powering Business Worldwide

**KEMWATER**  
PROCHEMIE

**LOVOCHEMIE**

**Metrohm**

**HUMUSOFT**  
**MathWorks**

**num**  
solution

**ANAMET**  
ANALYTICAL & MEASURING & TESTING

**avantar**

**Kapaji**



**LECO**  
EMPOWERING RESULTS



**Ranido**

**synthomer**

**tevak**

**Altium**

**SHIMADZU**  
Excellence in Science

**pragolab**



**EXPS**  
Engineering Technology

**RENISHAW**  
apply innovation™





# ZENTIVA

**Přinášíme zdraví a wellbeing pro více než  
100 milionů lidí po celé Evropě.**

## VYVÍJÍME



Inovujeme a hledáme nové způsoby výroby vysoce kvalitních a dostupných léků.

## VYRÁBÍME



Přímo v Praze vyrábíme více než 1500 kvalitních generických léčivých přípravků.

## SLOUŽÍME



Přinášíme zdraví a wellbeing pro všechny generace. Naším lékům ročně důvěřuje více než 100 milionů lidí po celé Evropě.

## STARÁME SE



O naše lidi, naše partnery a naši planetu. Vytváříme skvělé místo pro práci.



**Staňte se součástí našeho týmu. Nascanujte QR kód a prozkoumejte aktuálně otevřené pozice.**

**top**  
EMPLOYER

Česká republika  
Czech Republic  
**2025**

FOR A BETTER WORLD OF WORK



**[www.zentiva.cz](http://www.zentiva.cz)**



# INOVACE V GENERIKÁCH: JAK MŮŽE CHEMIK MĚNIT SVĚT PACIENTŮ

## S PAVLEM ŠEBKEM



Zentiva patří mezi největší výrobce léčiv v České republice. Každý rok přímo v Praze vyrobí téměř 140 milionů balení generických léků. Zentiva působí ve více než 30 evropských zemích, jejím srdcem ale zůstává Praha – nejen sídlo vedení firmy, ale také centrum pro výzkum a vývoj. Právě zde vznikají inovace, které posouvají generická léčiva o úroveň výš. Co obnáší vývoj generik a kde je prostor pro mladé chemiky a farmaceuty? Odpovídá Pavel Šebek, ředitel výzkumu a vývoje v Zentivě.

### Proč by měli studenti chemie a farmacie přemýšlet o kariéře v generickém průmyslu?

Současný generický průmysl stojí na inovacích, které skutečně zlepšují život pacientů. Už dávno nejde jen o „kopírování“ originálních léčiv, ale o vytváření nových, dostupnějších a účinnějších řešení. Mladí odborníci zde mají obrovskou příležitost skutečně něco změnit.

### Jak se tedy v generikách inovuje?

Inovace v generickém průmyslu probíhají na třech úrovních. Na první úrovni je cílem uvést generikum na trh co nejdříve po vypršení patentu originálního léčiva. To vyžaduje nalézt vlastní produktová a technologická řešení, která neporuší duševní vlastnictví třetích stran. Díky včasnému vstupu generického léčiva na trh se pak moderní terapie stávají dostupnější pro širší okruh pacientů. Druhá úroveň se zaměřuje na efektivnější

a udržitelnější výrobní procesy. Tyto inovace umožňují snížit výrobní náklady, ale zároveň i ekologickou stopu léčiva. Na třetí úrovni vytváříme novou přidanou hodnotu pro pacienta – hledáme způsoby, jak vylepšit existující terapie.

### Co může být taková přidaná hodnota pro pacienta?

Zaměřujeme se například na eliminaci nežádoucích účinků, zvýšení klinické účinnosti, nové indikace pro existující molekuly, rychlejší nástup účinku, nebo naopak na protrahovaný účinek tam, kde je to pro pacienta vhodnější, popřípadě na změnu režimu podávání léčiva. Příkladem může být analgetikum, které dnes pacient bere každé čtyři hodiny. Lék jsme upravili tak, aby účinek nastoupil okamžitě a vydržel celých osm hodin. Pacient tudíž může v klidu prospat celou noc.

### Takže inovace v generikách mají i sociální dopad?

Obrovský. Nejde jen o to, aby lék

fungoval. Například inovace vedoucí ke zlepšení adherence s medikací prokazatelně zlepšují terapeutický výsledek, snižují celkové náklady na léky či hospitalizace nebo operace, a tak šetří zdravotnímu systému značné množství prostředků.

### Jak vypadá vývoj v Zentivě?

Právě dokončujeme rozšíření vývojových kapacit v Praze. Nyní máme v laboratořích 230 spolupracovníků a 20 kolegů pracuje v Ankleshwaru v Indii. Chystáme také další rozšíření vývojových kapacit otevřením nového vývojového centra. Pracovní prostředí je mezinárodní, pracovník jazykem je angličtina. Kromě generik spolupracujeme také s partnerskými startupovými firmami na vývoji originálních léčiv. Stále hledáme mladé talentované vědce, kteří mají ambici dělat špičkovou farmaceutickou vědu na světové úrovni.

## KDO JSME?

PRO.MED.CS  
Praha a. s.

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

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

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

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

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

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

**ČESKÁ FARMACEUTICKÁ SPOLEČNOST**

**SÍDLO NA PRAZE 4**

**VÍCE NEŽ 900 ZAMĚSTNANCŮ**

**PŮSOBNOST VE VÍCE NEŽ 30 ZEMÍCH**

**VLASTNÍ VĚDECKÝ VÝZKUM A VÝVOJ**

**VLASTNÍ VÝROBA V PRAZE**



**ZAJÍMÁŠ SE O SVĚT FARMACIE?**

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



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

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



**Vývoj lékových forem**



**Výroba léčiv**



**Farmakovigilance**



**Registrace léčiv**



**CO TI NABÍDNEME?**



**Práci na projektech, které vedou ke zlepšení kvality života pacientů**



**Prostředí firmy, které podporuje inovativní léčebné metody**



**Atraktivní mzdu i bez předchozí praxe**



**Mnoho prostoru pro odborné vzdělávání a kariérní rozvoj**



**Lákavé benefity**



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



**Designové kanceláře na Brumlovce**

[www.promedcs.com](http://www.promedcs.com)



3.

NEJVĚTŠÍ  
TECHNOLOGICKÉ  
CENTRUM



4.

NEJVĚTŠÍ FARMACEUTICKÁ  
SPOLEČNOST NA  
SVĚTE



40

PLNĚ PLACENÝCH  
DOBROVOLNICKÝCH  
HODIN



90+

NÁRODNOSTÍ



140+

POBOČEK PO  
CELÉM SVĚTE



2021

2022

2023

ZAMĚSTNAVATEL  
ROKU



PŘÍLEŽITOSTÍ



MSD

#MSDPlaceToBe





## SIDAT, spol. s r.o.

### Základní údaje o společnosti:

Za 35 let jsme automatizovali a projekty výrobní informatiky vybavili technologie za bezmála 40 miliard Kč. Obory naší činnosti jsou Komplexní automatizace, Výrobní informatika, Dodávky HW, Servis 24/7 a Školení. V počtu více než 100 zaměstnanců dosahujeme obrátu téměř 400 milionů Kč na projektech v České republice i zahraničí.

### Nabízíme:

Nekorporátní firemní kulturu, moderně zařízené kanceláře na Praze 5, možnost částečného HO a další. Především ale zajímavou a ceněnou práci a podporu Vašeho profesního rozvoje.

### Možnosti pro studenty a absolventy:

| Junior PLC programátor/<br>projektový inženýr                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | Junior PLC programátor/<br>projektový inženýr<br>OIL & GAS                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      | Junior programátor<br>webových aplikací                                                                                                                                                                                                                                                   |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <ul style="list-style-type: none"> <li>• Budete uvádět do života výrobní linky a jednoúčelové stroje pro zákazníky v ČR i zahraničí</li> <li>• Zapojíte se do vytváření řídicího SW v prostředí SIEMENS TIA PORTAL, SIEMENS PCS7 nebo ProLeIT</li> <li>• Naučíte se navrhovat a programovat operátorské panely</li> <li>• Získáte přístup ke kurzům v našem certifikovaném SIEMENS školicím středisku</li> </ul> | <ul style="list-style-type: none"> <li>• Budete uvádět do života technologické celky a výrobní procesy pro zákazníky v ČR i zahraničí</li> <li>• Zapojíte se do vytváření řídicího SW v prostředí SIEMENS PCS7, TIA PORTAL včetně HMI vizualizace</li> <li>• Získáte přístup ke kurzům v našem certifikovaném SIEMENS školicím středisku</li> <li>• Spolupráce s kolegy se zahraničí</li> </ul> | <ul style="list-style-type: none"> <li>• Budete spolupracovat na tvorbě aplikací pro sběr a prezentaci dat z výroby</li> <li>• Zapojíte se do konfigurace aplikace dle požadavků zákazníka a řešení jeho požadavků</li> <li>• Budete se rozvíjet pod dohledem zkušených kolegů</li> </ul> |

### Čeho můžete být součástí:



**Energy Manager Pro**  
v pivovaru Starobrnno



**Indorama Ventures**  
Mobility Bohemia



**Řídicí a Batch**  
systémy pro PPF

### Kontakt:

Ing. Petra Majerová  
Vedoucí personálního oddělení  
SIDAT, spol. s r.o., Jinonická 80, 158 00 Praha 5, Česká republika  
M: +420 737 811 096  
[petra.majerova@sidat.cz](mailto:petra.majerova@sidat.cz) / web: [www.sidat.cz](http://www.sidat.cz)

# Ústav analytické chemie (402)

## ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Martin Člupek, Ph.D.

## SEZNAM SEKČÍ

- Analytická chemie I
- Analytická chemie II

SPONZOŘI ÚSTAVU ANALYTICKÉ CHEMIE





# Analytická chemie I

MÍSTO: A105

## KOMISE

- doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D. (předseda)
- Ing. Lucie Habartová, Ph.D.
- Ing. Karel Vávra, Ph.D.
- RNDr. František Kesner, Ph.D. (NICOLET CZ s.r.o.)

## SOUTĚŽÍCÍ

- Bc. **Matyáš Garnol** – Optimalizace ex vivo Ramanovy spektroskopie vzorků v nativním stavu: potkaní brzlík a mozek (M2, Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.)
- Bc. **Barbora Kolářová** – Hydrochlorid 3,4-DMMC v hledáčku kvantové chemie: vibrační analýza (M2, doc. Mgr. Tereza Uhlíková, Ph.D.)
- Bc. **Anna Mašková** – Příprava 1-buten-3-yn-2-olu a jeho spektroskopická analýza (M2, doc. Ing. Lucie Kolesníková, Ph.D.)
- Bc. **Jana Pavlišová** – Studium NMR interakčních konstant přes více vazeb pro strukturní analýzu molekul (M2, doc. RNDr. Martin Dračínský, Ph.D.)
- Bc. **Katarína Požgayová** – Analýza pigmentov v nábrusových preparátech pomocou Ramanovej mikrospektroskopie (M2, Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.)
- Bc. **Adéla Přádová** – Srovnání SERS-aktivních velkoplošných a kompozitních substrátů pro detekci a identifikaci dopaminu (M2, Ing. Vadim Prokopec, Ph.D.)
- Bc. **Eliška Rádlová** – Analýza aerosolových částic pomocí NMR spektroskopie (M2, Ing. Jan Sýkora, Ph.D.)

# Analytická chemie II

MÍSTO: A21

## KOMISE

- prof. Dr. RNDr. David Sýkora (předseda)
- doc. Ing. Kamil Záruba, Ph.D.
- Ing. Gabriela Broncová, Ph.D.

## SOUTĚŽÍCÍ

- **Michal Charvát** – Vliv dlouhodobého skladování na radiofotoluminiscenční vlastnosti fosfátových analogových dozimetrů (B3, doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.)
- Bc. **Tomáš Formánek** – Povrchově modifikované magnetické nanočástice pro enantioseparaci mandlové kyseliny (M2, doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.)
- Bc. **Tomáš Frýba** – Studium závislosti pH roztoků organických chlorovaných látek na obdržené dávce  $\gamma$  záření. (M2, doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.)
- Bc. **Bogdan Hryshkevich** – Srovnání disolučních technik pro léčivé přípravky ve vývojové fázi a optimalizace vybrané metody (M2, doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.)
- Bc. **Monika Maroušková** – Příprava, charakterizace a studium vazebných vlastností magnetických nanočástic modifikovaných  $\beta$ -cyklodextrinem (M1, doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.)
- **Barbora Mišková** – Studium sorpčních vlastností geopolymeru pro Cs-137 při různých teplotách (B3, doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.)
- Bc. **Michal Šerfel** – Elektrochémiou proti zločinu: Screening krvných stôp redoxným farbivom (M1, Ing. Gabriela Broncová, Ph.D.)
- Bc. **Marek Šimko** – Analýza potenciálního antiobezitika na bázi triazolů (M2, prof. Dr. RNDr. David Sýkora)

# *Vliv dlouhodobého skladování na radiofotoluminiscenční vlastnosti fosfátových analogových dozimetrů*

Michal Charvát (B3)

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

Tato práce se zabývá vlivem čtyřicetiletého skladování na radiofotoluminiscenční vlastnosti krystalů metafosforečnanu sodného dopovaného stříbrem ( $\text{Na}_3\text{PO}_4\cdot\text{Ag}$ ). Zmíněné krystaly se dříve používaly jako materiál citlivý na ionizační záření při výrobě dozimetrů. Cílem bylo posoudit, zda i po dlouhodobém skladování je odezva krystalů při ozáření dostatečná pro jejich zamýšlené použití. Byly změřeny hodnoty luminiscenční odezvy po skladování a srovnáním s výsledky získanými jiným přístrojem stejného typu bylo pomocí dvouvýběrového t-testu zjištěno, že při měření nedochází k staticky významným rozdílům. Následně byly krystaly ve spolupráci se Státním ústavem radiační ochrany ozařovány gama zářením emitovaného radionuklidem  $^{60}\text{Co}$  v postupných dávkách o velikostech 0,05, 0,15 a 0,3 Sv. Z naměřené odezvy byla vypočtena účinnost jednotlivých krystalů a vyhodnocena stabilita luminiscenční odezvy. Následně bylo několik vybraných vzorků mechanicky očištěno a byla sledována případná změna odezvy, na základě, které bylo vyhodnoceno, zda nedochází k poškození struktury.



# *Povrchově modifikované magnetické nanočástice pro enantioseparaci mandlové kyseliny*

Bc. Tomáš Formánek (M2)

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

Chiralita léčiv zásadně ovlivňuje jejich biologickou aktivitu, neboť odlišné enantiomery jedné látky mohou vykazovat zcela rozdílné farmakologické účinky od terapeuticky žádoucích až po toxické, karcinogenní, teratogenní či mutagenní projevy. Z tohoto důvodu je velmi důležité při syntéze nově vyvíjených léčiv obsahujících chirální centra jednoznačně určit, která konfigurace je biologicky aktivní, a následně zajistit účinnou separaci cíleného enantiomeru z reakční racemické směsi.

Vzhledem k neustálému rozvoji metod enantiomerní separace se zvyšuje i význam využití moderních přístupů, které kombinují vysokou separační účinnost, selektivitu, snadnou průmyslovou implementaci a ekonomickou výhodnost.

Jedním z perspektivních řešení je použití vhodně modifikovaných magnetických nanočástic na bázi  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ , které díky svým fyzikálně-chemickým vlastnostem umožňují efektivní a opakovaně proveditelnou separaci chirálních sloučenin v laboratorní i průmyslové praxi. Tato práce se zaměřuje na přípravu, charakterizaci a použití modifikovaných magnetických nanočástic.

## *Studium závislosti pH roztoků organických chlorovaných látek na obdržené dávce $\gamma$ záření.*

Bc. Tomáš Frýba (M2)

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

Při interakci chlorovaných látek s  $\gamma$  zářením dochází ke vzniku kyseliny chlorovodíkové, což se projevuje změnou pH roztoku. Jestliže je k ozařovanému roztoku chlorované látky přidán vhodný pH indikátor, je možné pozorovat barevnou změnu směsi. Pozorování barevného přechodu je základním principem detekce  $\gamma$  záření kolorimetrickými dozimetry. Tato práce se v první části zaměřuje na studium závislosti změny pH roztoků vybraných chlorovaných látek rozpuštěných v methanolu v závislosti na obdržené dávce  $\gamma$  záření. Pro další zkoumání byl následně připraven roztok se zvoleným pH indikátorem a chlorovanou látkou, která podléhá skokové změně hodnoty pH.

# *Optimalizace ex vivo Ramanovy spektroskopie vzorků v nativním stavu: potkaní brzlík a mozek*

Bc. Matyáš Garnol (M2)

Školitel: Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.

Včasná diagnostika a sledování vývoje onemocnění lidských tkání vyžadují spolehlivé metody zpracování biomedicínských dat. Ramanova spektroskopie umožňuje neinvazivní získání chemického „otisku“ tkání, který může sloužit jako základ pro jejich klasifikaci pomocí metod strojového učení. Úspěšnost těchto přístupů však zásadně závisí na kvalitě a reprezentativnosti dostupných dat. Cílem projektu je optimalizovat měření nativních vzorků brzlíku a mozku potkanů tak, aby vznikla rozsáhlá, kvalitní a dobře anotovaná sada dat Ramanových spekter. Optimalizace zahrnuje výběr vlastností vzorku, výběr měřících parametrů, minimalizaci šumu a zajištění reprodukovatelnosti měření. Takto vytvořená sada dat umožní testování a srovnání různých metod strojového učení a zároveň poslouží jako základ pro vývoj modelů využitelných v rámci přenosového učení, které mohou být později aplikovány i na lidské tkáně. Očekávaným přínosem práce je vytvoření robustního datového základu pro následné biomedicínské analýzy a demonstrace významu optimalizace datového sběru pro úspěch algoritmických metod v diagnostice.

# Srovnání disolučních technik pro léčivé přípravky ve vývojové fázi a optimalizace vybrané metody

Bc. Bogdan Hryshkevich (M2)

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

Disoluční testy představují klíčový nástroj pro hodnocení uvolňování účinné látky (API) z léčivých přípravků a pro predikci jejich chování *in vivo*. Nejčastěji používanou aparaturou je USP Apparatus 2 však nemusí vždy dostatečně přesně simulovat podmínky v gastrointestinálním traktu. Pokročilejší aparatury, jako USP Apparatus 3 (reciprokující válec) a USP Apparatus 4 (průtočný systém), umožňují realističtější modelování *in vivo* prostředí a mohou být vhodné pro komplikovanější přípravky. V rámci této práce byly studovány potahované tablety obsahující špatně rozpustnou účinnou látku, jejichž bioekvivalenční studie (BES) vykazala opačné výsledky oproti očekávání, což vedlo k potřebě vývoje disoluční metody s vyšší prediktivní hodnotou. Prototypy tablet byly testovány na aparaturách USP Apparatus 2, USP Apparatus 3 a USP Apparatus 4 v různých disolučních médiích a podmínkách. Zatímco disoluční testy provedené na aparaturách USP Apparatus 2 a USP Apparatus 4 neodrážely trendy pozorované v BES, výsledky získané pomocí aparatury USP 3 vykazovaly obdobné trendy v uvolňování API, což naznačuje, že aparatura USP 3 může lépe simulovat fyziologické podmínky gastrointestinálního traktu a představuje vhodný nástroj pro vývoj prediktivní disoluční metody. Další optimalizace této metody by mohla přispět k lepšímu porozumění vztahu *in vitro–in vivo* a zefektivnění vývoje perorálních lékových forem.

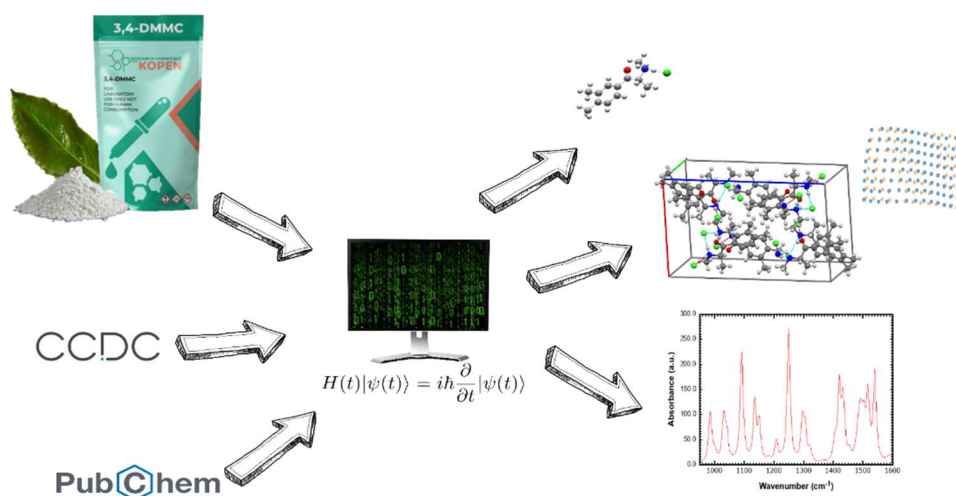


# Hydrochlorid 3,4-DMMC v hledáčku kvantové chemie: vibrační analýza

Bc. Barbora Kolářová (M2)

Školitel: doc. Mgr. Tereza Uhlíková, Ph.D.

Syntetické katinony představují závažnou hrozbu pro lidské zdraví vzhledem k jejich silným stimulačním účinkům, které mohou při zneužívání vést k předávkování i úmrtí. Kvůli rychlému uvádění nových derivátů katinonu na trh a nedostatku údajů o nich je potřeba mít k dispozici spolehlivé metody jejich identifikace a detekce využitelné ve forenzní praxi. K hlubšímu porozumění těmto látkám na strukturní úrovni lze efektivně využít metody vibrační spektroskopie spolu s kvantově chemickými výpočty, založenými například na teorii funkcionálu hustoty (DFT). Tyto výpočetní metody nám umožňují predikci spektrálních a dalších vlastností nově vznikajících derivátů, jejich konformerů i různých polymorfních struktur. Předmětem této práce je studium vibračních vlastností hydrochloridu 3,4-dimethylmethkathinonu (3,4-DMMC), který je řazen na seznam č. 4 psychotropních látek v příloze č. 4 k nařízení vlády č. 463/2013. Byla provedena optimalizace geometrií mateřské molekuly, samostatného hydrochloridu 3,4-DMMC a jeho krystalické formy. Následně byla predikována vibrační spektra, která budou dále porovnávána s experimentem.



Zdroje obrázky:

David Becking (Walter Sisulu NBG)

Callister, W. D., Jr.; Rethwisch, D. G. Vibrational Heat Capacity. *Materials science and engineering: an introduction*. John Wiley & Sons, Inc. (2018), p. 700. 3,4-DMMC (3,4-Dimethylmethcathinone). Dostupné z: <https://researchchemicalskopen.net/pt/produto/34-dmmc-34-dimethylmethcathinone/>.

# *Příprava, charakterizace a studium vazebných vlastností magnetických nanočástic modifikovaných $\beta$ -cyklodextrinem*

Bc. Monika Maroušková (M1)

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

Rozlišení enantiomerních forem léčiv je naprosto stěžejní při jejich vývoji a analýze z důvodu možných odlišných účinků jednotlivých optických izomerů. V rámci testování vhodnosti různých separačních technik byl vytvořen modelový systém modifikovaných magnetických nanočástic určený pro budoucí využití v separaci tokem v magnetickém poli. Byly vytvořeny  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  magnetické nanočástice, na něž byl prostřednictvím (3-isokyanátopropyl)triethoxysilanu navázán chirální selektor  $\beta$ -cyklodextrin. Jako modelová sloučenina byl použit fenolftalein, který, ač achirální, je vhodnou testovací látkou, neboť je schopen se vázat na  $\beta$ -cyklodextrin a má vysoký molární absorpční koeficient při 554 nm. Systém byl charakterizován pomocí následujících analytických technik: UV-VIS spektrofotometrie k určení podmíněné konstanty stability komplexu cyklodextrin-fenolftalein; infračervená spektroskopie (zeslabený totální odraz a transmise pro pevnou a kapalnou fázi) a termogravimetrie pro sledování jednotlivých fází syntézy; dynamický rozptyl světla pro zjištění průměrů a zeta potenciálu nanočástic. Výsledkem práce jsou důležité informace o modelovém separačním systému pro budoucí využití podobných systémů nejen ve farmaceutickém výzkumu.

# *Příprava 1-buten-3-yn-2-olu a jeho spektroskopická analýza*

Bc. Anna Mašková (M2)

Školitel: doc. Ing. Lucie Kolesníková, Ph.D.

Kyslíkaté sloučeniny představují významnou skupinu látek intenzivně zkoumaných v mezihvězdném prostředí. Příkladem jsou aldehydy, ketony a jejich tautomerní formy, enoly, které jsou považovány za klíčové meziprodukty v syntéze prebioticky významných látek. V mezihvězdném prostředí byly na základě rotačních přechodů doposud identifikovány tři enoly: ethenol, (Z)-ethen-1,2-diol a 3-hydroxyprop-2-enal. Jednoznačná detekce těchto látek v astronomických spektrech by však nebyla možná bez předchozích laboratorních experimentů poskytujících referenční data. Tato studie se zaměřuje na přípravu 1-buten-3-yn-2-olu, dalšího astrofyzikálně významného enolu, a jeho následnou charakterizaci pomocí rotační spektroskopie. Tento nestabilní enol byl pozorován v plynné směsi vzniklé pyrolýzou 1-ethynylcyklobutanolu a ve frekvenčním rozsahu od 153 do 179 GHz se podařilo poprvé jednoznačně identifikovat a změřit rotační přechody jeho dvou možných konformací. Výsledky této práce představují první krok pro budoucí hledání 1-buten-3-yn-2-olu v mezihvězdném prostředí.

# *Studium sorpčních vlastností geopolymery pro Cs-137 při různých teplotách*

Barbora Mišková (B3)

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

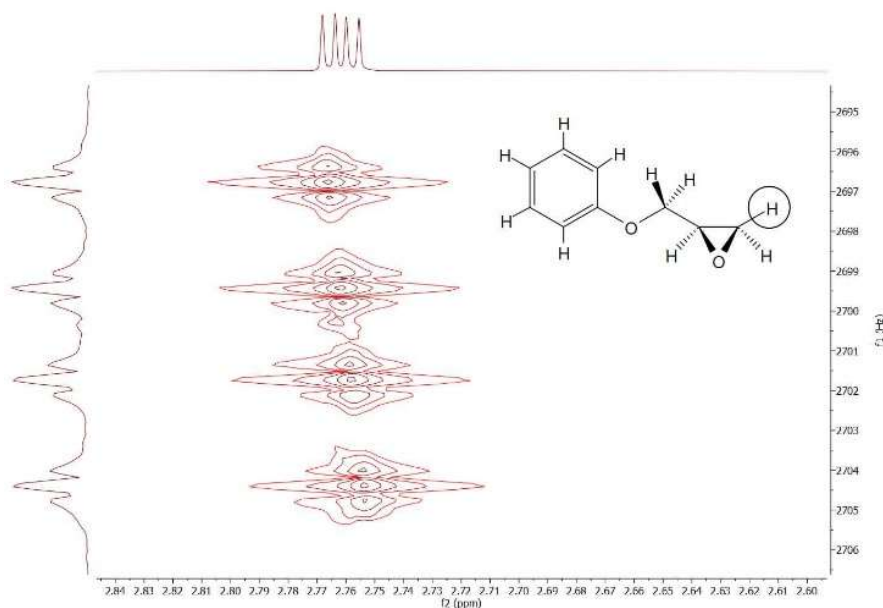
Využití jaderných elektráren jako zdroje elektrické energie ve větším měřítku je i nadále aktuální téma, které s sebou přináší potřebu efektivního a bezpečného způsobu nakládání s radioaktivním odpadem. Jeho nevhodné uskladnění by totiž mohlo vést k úniku vysoceaktivních radionuklidů do životního prostředí a způsobit závažné ekologické i zdravotní následky. Proto se v ČR plánuje výstavba hlubinných úložišť, ve kterých by byly právě pro bezpečné uchování aktivních materiálů a ochranu biosféry před radionuklidy využívány inženýrské bariéry. Jedním z možných materiálů, který by byl součástí těchto bariér, je geopolymer. Během svého provozu v hlubinném úložišti bude vystavován působení podzemní vody při různých teplotách. Prozkoumat vliv teploty na sorpční vlastnosti geopolymery pro izotop Cs-137 si klade za cíl předkládaná práce.

# Studium NMR interakčních konstant přes více vazeb pro strukturní analýzu molekul

Bc. Jana Pavlišová (M2)

Školitel: doc. RNDr. Martin Dračínský, Ph.D.

NMR spektroskopie je důležitým nástrojem pro strukturní analýzu molekul. Pro určování molekulové struktury jsou v NMR běžně využívány interakční konstanty  $^1\text{H}$ – $^1\text{H}$  přes dvě a tři vazby. Předmětem tohoto výzkumu však byly interakční konstanty přes více vazeb (přes čtyři a pět vazeb), které v běžném 1D spektru často nejsou pozorovatelné. Pro získání těchto malých interakčních konstant byla měřena homonukleární J-resolved spektra s vysoce rozlišenou osou ukazující interakční konstanty. Dále byla měřena long-range COSY spektra, ve kterých lze pozorovat malé interakce mezi vodíky. Experimentální data byla doplněna o DFT výpočty. Bylo analyzováno více látek, obsahujících ve své struktuře vodíky vzdálené více než tři vazby – jednou z nich byl 1,2-epoxy-3-fenoxipropan. Cílem práce bylo změřit interakční konstanty přes více vazeb a zhodnotit, zda tyto interakční konstanty umožňují detailnější charakterizaci struktury organických látek. Konkrétně v případě 1,2-epoxy-3-fenoxipropanu bylo ukázáno, že interakční konstanty přes více vazeb mohou rozlišit diastereotopní vodíky, které se v molekule vyskytují.



J-resolved spektrum ukazující existenci malých interakčních konstant přes čtyři vazby mezi vodíky v molekule 1,2-epoxy-3-fenoxipropanu



# *Analýza pigmentov v nábrusových preparátoch pomocou Ramanovej mikrospektroskopie*

Bc. Katarína Požgayová (M2)

Školiteľka: Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.

Ramanova mikrospektroskopia predstavuje kľúčovú analytickú metódu využívanú pri materiálovom výskume a charakterizácii umeleckých diel, najmä v oblasti identifikácie pigmentov v historických a moderných vrstvách malieb. Technika umožňuje neinvazívnu alebo mikroinvazívnu analýzu a vďaka vysokému priestorovému rozlíšeniu poskytuje možnosť analyzovať jednotlivé častice pigmentov priamo v mikrovrstvách maľby. Nábrusové preparáty predstavujú vhodnú formu vzorkovania, ktorá umožňuje študovať stratigrafiu vzoriek a súčasne minimalizujú invazivitu zásahu do originálu. Cieľom tejto práce je identifikovať pigmenty prítomné v nábrusových preparátoch pomocou Ramanovej mikrospektroskopie a posúdiť jej prínos pri charakterizácii malieb s komplexnou štruktúrou. Rovnako sa práca zameriava na optimalizáciu experimentálnych podmienok vrátane výberu vlnovej dĺžky laseru, času a počtu akumulácií a následného spektrálneho spracovania. Analýza sa zameriava na identifikáciu anorganických aj organických pigmentov či detekciu degradačných produktov. Ramanova mikrospektroskopia preukázala vysokú citlivosť pri identifikácii pigmentov a výsledky práce zároveň poukazujú aj na jej limity, najmä v prípadoch výraznej fluorescencie alebo prítomnosti zmesí pigmentov s komplexnou štruktúrou.

# *Srovnání SERS-aktivních velkoplošných a kompozitních substrátů pro detekci a identifikaci dopaminu*

Bc. Adéla Přádová (M2)

Školitel: Ing. Vadim Prokopec, Ph.D.

Dopamin je důležitý neurotransmitter, který ovlivňuje řadu neurofyzilogických procesů. Má zásadní význam pro medicínu například kvůli diagnostice různých nervových onemocnění. V lidském těle se ovšem nachází ve stopovém množství, což je pro obvyklou Ramanovu spektroskopii pod mezí detekce. Díky povrchovému zesílení signálu molekul adsorbovaných na kovových nanostrukturách lze dosáhnout detekce velmi malých koncentrací. Cílem této práce je porovnání dvou různých typů substrátů na bázi křemíku a platiny a posouzení jejich vhodnosti pro detekci. V průběhu experimentů bylo zjištěno, že dopamin ve vodném roztoku oxidativně polymeruje za vzniku polydopaminu (PDA), což je látka s významnými fyzikálně-chemickými vlastnostmi, mezi něž patří nízká toxicita, citlivost na změnu pH nebo biodegradabilita. Polydopamin má potenciál se v budoucnosti uplatňovat například v chemoterapii či fototerapii. V této práci byl křemíkový i platinový substrát deponován ve stříbrné lázni a následně byly naměřeny koncentrační řady při dvou různých vlnových délkách 785 nm a 532 nm.

# *Analýza aerosolových částic pomocí NMR spektroskopie*

Bc. Eliška Rádlová (M2)

Školitel: Ing. Jan Sýkora, Ph.D.

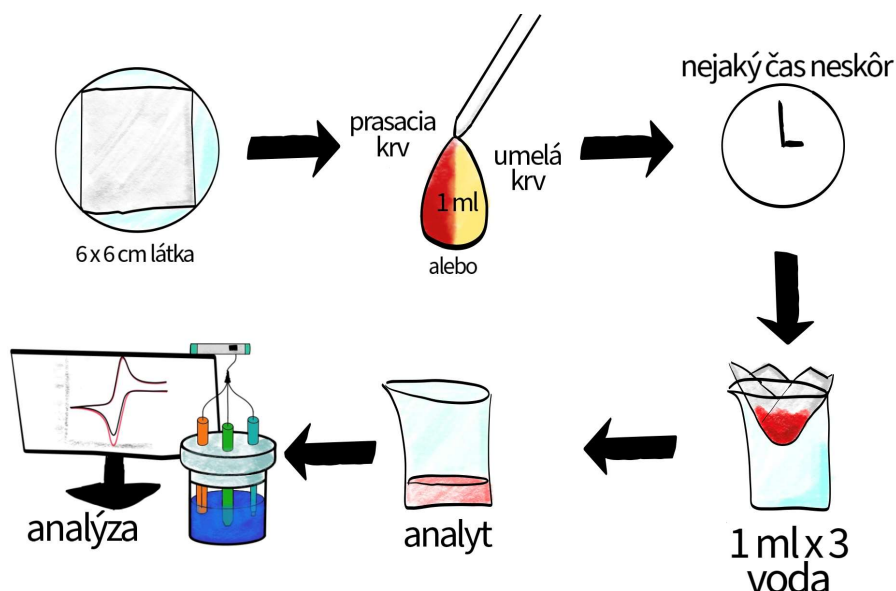
Aerosoly jsou neustále přítomné v našem okolí, kde ovlivňují kvalitu ovzduší a mohou mít i nepříznivé účinky na zdraví. Vyznačují se velmi rozmanitým složením, které zahrnuje anorganické i organické látky mající různé vlastnosti. Polární organické sloučeniny rozpustné ve vodě tvoří hlavní podíl organických sloučenin v atmosférických aerosolech. Jejich chemická analýza umožňuje mimo jiné sledovat variabilitu složení aerosolových částic v závislosti na ročním období a dokonce identifikovat i jejich původ, čímž následně určíme zdroje znečištění atmosféry. Jednou z metod vhodných pro analýzu polárních organických látek je NMR spektroskopie. Předmětem práce proto bylo připravit knihovnu  $^1\text{H}$  NMR spekter sloučenin spojených s chemií aerosolů a použít ji k analýze série vzorků reálných aerosolových částic. Vhodné vzorky byly získány z odběrové stanice umístěné v blízkosti tepelné elektrárny v Tušimicích. Odběry probíhaly do dobu 30 dní v zimním i letním období. Získaná data byla následně analyzována pomocí jednorozměrných statistických metod.

## Elektrochémiou proti zločinu: Screening krvných stôp pomocou redoxného farbiva.

Bc. Michal Šerfel (M1)

Školiteľ: Ing. Gabriela Broncová, Ph.D.

Tradičné predbežné testy na detekciu krvi na mieste činu často poskytujú falošne pozitívne alebo negatívne výsledky, čo poukazuje na potrebu spoľahlivejších analytických postupov. Voltametrická metóda s využitím metylénovej modrej (MM) ako redoxného mediátora ponúka citlivú elektrochemickú detekciu hemoglobínu (Hb). Merania boli realizované pomocou cyklickej voltametrie v trojelektrodovom usporiadaní s uhlíkovou pracovnou elektródou vo fosfátovom pufri o pH 5 ako elektrolyte. Prítomnosť funkčnej vrstvy MM na povrchu elektródy bola potvrdená a charakterizovaná infračervenou a impedančnou spektroskopiou. Pomocou MM bol úspešne detekovaný Hb v umelých aj prasacích krvných stopách s rôznou dĺžkou schnutia (30 min až 2 týždne) a boli získané konzistentné výsledky aj pri čiastočne degradovaných vzorkách v rozmedzí  $20\text{--}29\text{ }\mu\text{g}\cdot\text{ml}^{-1}$ . Realistickosť forenzných situácií bola otestovaná použitím čistiacich prostriedkov. Žlčové mydlo nemalo vplyv na kvalitatívnu detekciu Hb v krvných stopách, zatiaľ čo Persil™ znemožnil úplne analýzu. Navrhnutá metóda poskytuje vysokú citlivosť, reprodukovateľnosť a nízku toxicitu a indikuje potenciál pre praktické využitie vo forenzej detekcii krvných rezíduí.



# *Analýza potenciálního antiobezitika na bázi triazolů*

Bc. Marek Šimko (M2)

Školitel: prof. Dr. RNDr. David Sýkora

Obezita představuje závažné civilizační onemocnění s rychle rostoucí prevalencí, které zvyšuje riziko metabolických, kardiovaskulárních a dalších komplikací a představuje významnou zátěž pro zdravotní systémy. Tento trend podtrhuje nutnost hledání nových terapeutických přístupů. Klíčovou roli v regulaci příjmu potravy hraje hormon ghrelin, který prostřednictvím receptoru GHSR1a v hypothalamu stimuluje pocit hladu a příjem potravy, čímž představuje potenciální vhodný cíl pro vývoj terapeutik regulujících příjem potravy. Některé látky na bázi 1,2,4-triazolu jsou antagonisté GHSR1a, a proto mají terapeutický potenciál. V této práci byla vyvinuta a optimalizována LC-MS metoda pro kvantifikaci vybrané triazolové látky, zaměřená na hodnocení její in vitro stability a farmakokinetiky. Získaná data poskytují cenné informace pro další optimalizaci chemické struktury studované látky a posouzení její vhodnosti pro preklinické studie.

# Ústav fyzikální chemie (403)

## ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

doc. Ing. Ondřej Vopička, Ph.D.

## SEZNAM SEKČÍ

- Fyzikální chemie I
- Fyzikální chemie II
- Fyzikální chemie III
- Fyzikální chemie IV
- Fyzikální chemie V
- Fyzikální chemie VI



SPONZOŘI ÚSTAVU FYZIKÁLNÍ CHEMIE



**ORLEN**  
UNIPETROL

**zeNTIVA**



**NICOLET CZ**  
MOLECULAR SPECTROSCOPY



**MSD**



**LEANCAT**



**pragolab**

**RENISHAW**  
apply innovation™

**Metrohm**

**tevak**



# Fyzikální chemie I

MÍSTO: B26

## KOMISE

- prof. RNDr. Jiří Kolafa, CSc. (předseda)
- Ing. Daniel Bím, Ph.D.
- Mgr. Ing. Eva Krupičková Pluhařová Ph.D.
- Felipe Castro Nepomuceno, MSc. (MSD)

## SOUTĚŽÍCÍ

- David Fiala – Theoretical insights into ultrafast core-level transient absorption spectroscopies of organometallic complexes (B2, Ing. Vít Svoboda, Dr. sc. ETH Zürich)
- Magdaléna Jursová – Computational Investigation of the Ultrafast Photoinduced Dissociation Dynamics of Iron Pentacarbonyl (B2, Ing. Vít Svoboda, Dr. sc. ETH Zürich)
- Ondřej Kejzlar – Time-Resolved Approach to Ultrafast Chirality Changes Mediated by Photodissociation of Epichlorohydrin (B2, Ing. Vít Svoboda, Dr. sc. ETH Zürich)
- Tomáš Mráz – In silico interpretace tvorby kokrystalů ibuprofenu s biokompatibilními koformery (B2, doc. Ing. Ctirad Červinka, Ph.D.)
- Denis Šebo – Conformational properties of erythromycin bound to the ribosome exit tunnel (B2, doc. RNDr. Michal Kolář, Ph.D.)
- Lukáš Tabery – Hledání tranzitních stavů minimalizací: reakční bariéry z perspektivy excitovaných stavů (B2, prof. RNDr. Bc. Petr Slavíček, Ph.D.)

# Fyzikální chemie II

MÍSTO: B24

## KOMISE

- prof. RNDr. Jiří Ludvík CSc. (předseda)
- Ing. Magdalena Bendová, Ph.D.
- doc. RNDr. Michal Kolář, Ph.D.

## SOUTĚŽÍCÍ

- David Gabaj – (Spektro)elektrochemická studie nitroaromátů a jejich poutavě barevné interakce s nukleofily (B3, Ing. Karolína Salvadori, Ph.D.)
- Filip Holeček – Photochemistry of Phosphine-Based Nickel Complexes (B2, Ing. Daniel Bím, Ph.D.)
- Patchawee Jarucharttada – Finding the Right Mix: Designing Flexible Drug–Polymer Formulations for 3D Printing (B3, prof. Ing. Michal Fulem, Ph.D.)
- Klára Mládková – Tetrasubstituted Allenes as Probes of Axial Chirality in Photoelectron Circular Dichroism: Theory and Synthesis (B2, Ing. Vít Svoboda, Dr. sc. ETH Zürich)
- Emmeline Murton – Thermodynamic properties and phase behaviour of oxazolines with model APIs. (B3, prof. Ing. Růžička Květoslav, CSc.)
- Michal Novotný – Diarylethene Based Acylhydrazones Photoswitches: Synthesis and Spectroscopy (B3, doc. RNDr. Eva Muchová, Ph.D.)

# Fyzikální chemie III

MÍSTO: B34

## KOMISE

- prof. Mgr. Alexandr Malijevský, Ph.D., DSc. (předseda)
- doc. RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.
- doc. Ing. Pavel Izák, Ph.D., DSc.

## SOUTĚŽÍCÍ

- Vladislav Bojko – Zhášení fluorescence BODIPY tetrazinem: Ab Initio studie a molekulová dynamika (B3, prof. RNDr. Bc. Petr Slavíček, Ph.D.)
- Matěj Červenka – Exploring Biologically Relevant Cation– $\pi$  Interactions in Aqueous Solutions (B3, prof. Mgr. Pavel Jungwirth, CSc., DSc.)
- Jiří Hrubant – Sigma-díry a jejich nekovalentní interakce jako kohezní motiv pro molekulární krystaly (B3, doc. Ing. Ctirad Červinka, Ph.D.)
- Jakub Ježek – Construction of Wannier Orbitals and Determination of Crystal Field Parameters for Ce-Doped  $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$  (B3, prof. Dr. Ing. David Sedmidubský)
- Michael Křivan – The role of non-canonical amino acids on the protoribosome (B3, doc. RNDr. Michal Kolář, Ph.D.)
- Marek Plachý – Ab initio modelování MOST systémů (B3, prof. RNDr. Bc. Petr Slavíček, Ph.D.)

# Fyzikální chemie IV

MÍSTO: A125

## KOMISE

- prof. Ing. Květoslav Růžička, CSc. (předseda)
- Ing. Tereza Edlová, Ph.D.
- Ing. Marcela Tkadlecová, CSc.

## SOUTĚŽÍCÍ

- Bc. Michal Čotek – Vliv thiokyanátu guanidného na modelová rozhraní (M1, Ing. Daniel Ondo, Ph.D.)
- Bc. Jakub Havránek – Elektrochemicky indukované adsorpční mechanismy aromatických thiolů studované pomocí SERS (M1, Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.)
- Bc. Tomáš Navrátil – Povrchové napětí různých roztoků surfaktantů (M1, Ing. Mária Zedníková, Ph.D.)
- Bc. Jiří Šnajdr – Studium polymorfismu z pohledu kalorimetrie a měření tlaků sytých par (M1, doc. Ing. Vojtěch Štejf, Ph.D.)
- Bc. Adéla Ulrichová – Vývoj a testování nových kompozitních materiálů na bázi polyHEMA a UiO-66-NH<sub>2</sub> pro membránové separace CO<sub>2</sub> od permanentních plynů (M1, prof. Ing. Karel Friess, Ph.D.)
- Bc. Jakub Vokrouhlický – Chiral X-ray Spectroscopies in the Liquid Phase (M2, prof. RNDr. Bc. Petr Slaviček, Ph.D.)

# Fyzikální chemie V

MÍSTO: A11

## KOMISE

- prof. Ing. Michal Fulem, Ph.D. (předseda)
- doc. Ing. Ctirad Červinka, Ph.D.
- Ing. Vít Svoboda, Dr. sc. ETH Zürich
- Ing. Martin Balouch, Ph.D. (Zentiva)

## SOUTĚŽÍCÍ

- Bc. Zuzana Hybnerová – Exploring Microsolvation Effects in the UV-VIS Absorption Spectra of Aromatic Radical Anions (M1, prof. Mgr. Pavel Jungwirth, CSc., DSc.)
- Bc. Marek Klíma – Non-Condon effects with Spin–Orbit Coupling: A Route to Quantitative Spectra (M2, prof. RNDr. Bc. Petr Slavíček, Ph.D.)
- Bc. Jan Koreš – EUV Source Chemistry: Ab Initio Dynamics for Sn-Ion Reduction by Molecular Hydrogen (M1, prof. RNDr. Bc. Petr Slavíček, Ph.D.)
- Bc. Rudolf Kvasňovský – Simulation Model of the Mitochondrial Ribosome (M1, doc. RNDr. Michal Kolář, Ph.D.)
- Bc. Jan Mišek – Ab initio modelování fotooxidace katalyzované Sc(III) komplexy (M1, prof. RNDr. Bc. Petr Slavíček, Ph.D.)
- Bc. Daniel Myšák – How substrates enter glutamate dehydrogenase active site in crowded environment: cleft or shortcut? (M1, Mgr. Ing. Eva Krupičková Pluhařová, Ph.D.)



# Fyzikální chemie VI

MÍSTO: A12

## KOMISE

- doc. RNDr. Eva Muchová, Ph.D. (předsedkyně)
- Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.
- doc. Ing. Vojtěch Štejfa, Ph.D.

## SOUTĚŽÍCÍ

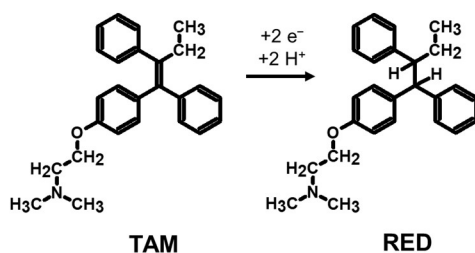
- Bc. Vojtěch Bičák – Elektrochemie tamoxifenu (M2, prof. RNDr. Jiří Ludvík, CSc.)
- Bc. Ondřej Hlaváček – Studium magnetického pole v kontextu chirální separace přes membránu (M2, doc. Ing. Pavel Izák, Ph.D., DSc.)
- Bc. Tomáš Mathauser – Příprava magnetických nanočástic na bázi UiO-66-NH<sub>2</sub> a ZIF-8 pro efektivní separaci O<sub>2</sub> a N<sub>2</sub> (M2, prof. Ing. Karel Friess, Ph.D.)
- Bc. Rebeka Morvaiová – Štúdium vlastností reakčných medziproduktov niklovej fotoredoxnej katalýzy pomocou elektroanalytických metód (M2, Ing. Daniel Bím, Ph.D.)
- Mgr. Richard Sochor – Biofyzikální charakterizace lipidových kapének: Role lipidového složení (M2, Mgr. Šárka Jungwirth Pokorná, Ph.D.)
- Bc. Katarína Vosovičová – Ribose Photochemistry in Space: Nonadiabatic Reaction Pathways (M2, prof. RNDr. Bc. Petr Slaviček, Ph.D.)

# Elektrochemie tamoxifenu

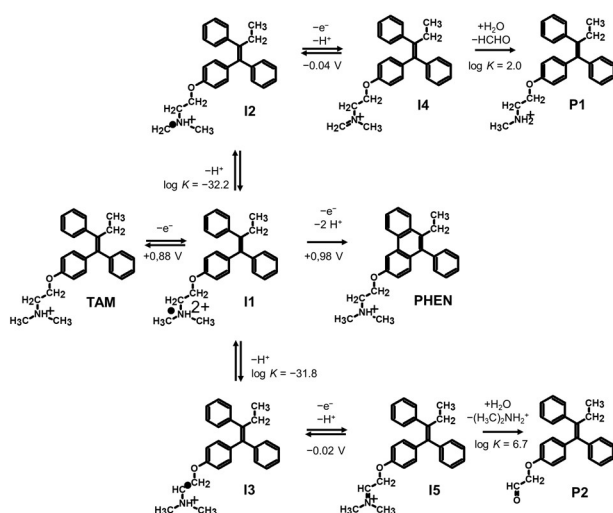
Bc. Vojtěch Bičák (M2)

Školitel prof. RNDr. Jiří Ludvík, CSc.

Tamoxifen (TAM, Schéma 1 a 2) je syntetické léčivo. V žádném z dosud publikovaných prací se nevyskytuje jednoznačný důkaz o jeho elektrochemických produktech. Práce zabývající se elektrochemickou redukcí (Schéma 1) se odkazují na nasycený produkt (RED). Práce zabývající se elektrochemickou oxidací (Schéma 2) uvádějí jako produkt substituovaný fenanthren (PHEN, shodný s produktem fotochemické oxidace). V obou případech se předpokládá výměna 2 elektronů na jednu molekulu TAM. Možných elektrochemických produktů oxidace je více (viz Schéma 2). Tato práce si klade za cíl systematickou studii elektrochemie TAM, zjištění jeho elektrochemických produktů a upřesnění mechanismu redukce i oxidace. Proto jsme se nejprve zaměřili na obecný elektrochemický výzkum TAM (DC-polarografie, RDE, CV). Pro syntézu produktů byly provedeny preparativní elektrolýzy, následované jejich analýzou pomocí NMR. Aktuálním cílem je optimalizace preparativní elektrolýzy a následná analýza produktů dalšími metodami (GC-MS, fluorescenční spektroskopie).



**Schéma 1: Redukce TAM**



# Zhášení fluorescence BODIPY tetrazinem: *Ab initio* studie a molekulová dynamika

Vladislav Bojko (B3)

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

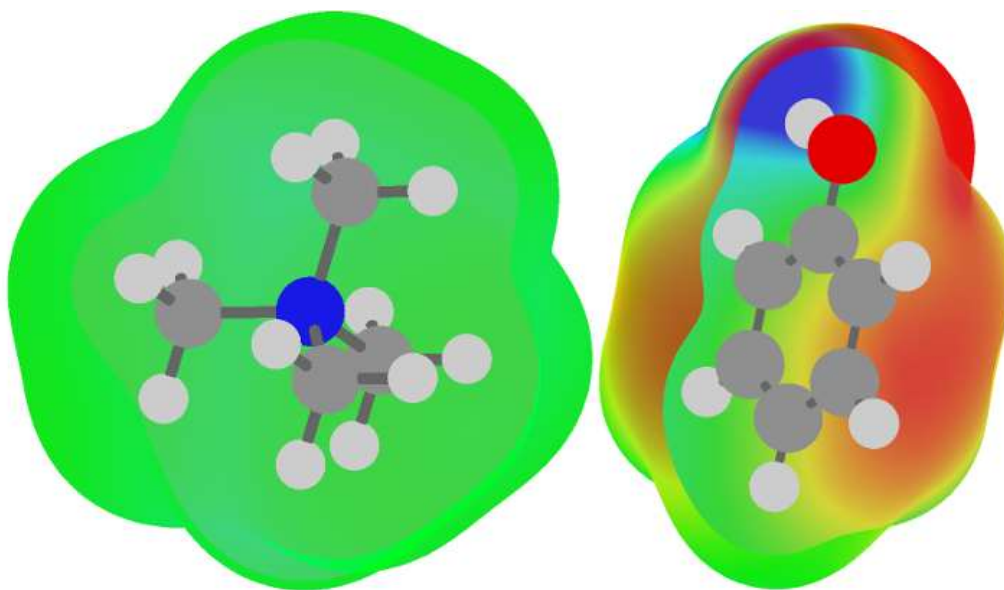
Fluorogenní sondy v bioortogonálním zobrazování se aktivují až po specifické reakci, což umožňuje selektivní detekci biomolekul. Typickým systémem je fluorofor BODIPY (dipyrromethenbordifluorid) značený tetrazinem, kde jádro BODIPY nese fluorescenční signál a tetrazin jej zháší až do okamžiku reakce. Dosavadní studie naznačují zhášecí mechanismy, ale chybí popis procesů na úrovni časového vývoje v elektronově excitovaných stavech. V této práci byly charakterizovány elektronové přechody v energetickém minimu pro dva modelové BODIPY–tetrazinové komplexy, které se liší mírou  $\pi$ -konjugace, i pro jejich jednotlivé fragmenty. U obou komplexů byly nalezeny delokalizované i fragmentově lokalizované přechody, u nichž došlo k posunu excitačních energií a intenzit přechodu. Dále byla vypočtena absorpční spektra různými metodami elektronové struktury a způsoby vzorkování geometrie, se zahrnutím kvantových efektů jader. Pro tetrazin byly porovnány výpočty metodou *nuclear ensemble method* s výpočtem vibronických spekter v Condonově aproximaci. Ukázalo se, že pro reprodukci spektra tetrazinu je nutné zahrnout vibronické efekty. Byly také provedeny pilotní výpočty emisních spekter. Dále byl simulován časový vývoj v excitovaných stavech pomocí neadiabatické molekulové dynamiky.

# Exploring Biologically Relevant Cation– $\pi$ Interactions in Aqueous Solutions

Matěj Červenka (B3)

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

Cation– $\pi$  interactions are widespread in biological systems, contributing to membrane protein stability, gene regulation, and molecular recognition. Yet their direct observation in bulk aqueous solution has long been considered experimentally challenging, if not impossible. Here, we present direct measurements of cation– $\pi$  interactions in water using neutron diffraction and photoelectron spectroscopy, applied to a model system of tetramethylammonium and phenol. These compounds mimic the methylated ammonium groups present in the neurotransmitter acetylcholine and the aromatic sidechain of tyrosine, respectively. Both neutron diffraction and photoelectron spectroscopy indicate the presence of cation– $\pi$  interactions, and their concordance lends strength and clarity to the overall interpretation. Molecular dynamics simulations provide complementary structural insight that supports the experimental observations. This study builds upon our recent work (J. Phys. Chem. B, 2025, DOI: 10.1021/acs.jpcb.5c02001).



# *Effect of guanidinium thiocyanate on model interfaces*

Bc. Michal Čotek (M1)

Školitel: Ing. Daniel Ondo, Ph.D.

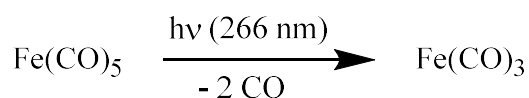
Guanidinium thiocyanate (GdmSCN) is a strong protein denaturant. Recently, we have developed a Kirkwood–Buff–based force field for GdmSCN, which quantitatively reproduces the bulk properties of aqueous solutions, such as density and activity. In this contribution, we use molecular dynamics simulations to explore the impact of GdmSCN on the stability of model hydrophobic interfaces. First, we studied the influence of added GdmSCN on the surface tension at the air/water interface. Second, we examined the effect of GdmSCN on the solubility of small hydrophobic solutes, such as methane. Our results provide the first step towards the microscopic rationalization of the extraordinary potency of GdmSCN in protein denaturation.

# *Theoretical insights into ultrafast core-level transient absorption spectroscopies of organometallic complexes*

David Fiala (B2)

Školitel: Ing. Vít Svoboda, Dr. sc. ETH Zürich

Organometallic complexes hold great promise as photocatalysts due to their tunable electronic structures and intrinsic photoactivity. Among them, iron pentacarbonyl  $\text{Fe}(\text{CO})_5$  represents a prototypical system for investigating ultrafast studies focusing on metal-to-ligand charge transfer (MLCT) dynamics. Upon photoexcitation at 266 nm,  $\text{Fe}(\text{CO})_5$  undergoes stepwise ligand dissociation, forming the unsaturated  $\text{Fe}(\text{CO})_3$ , which can act as a catalytically active intermediate. However, the early electronic and structural dynamics that initiate this process remain insufficiently understood. In this work, theoretical interpretation of ultrafast dynamics probed by transient absorption spectroscopy measurements is being presented. Our detailed analysis of transient absorption spectroscopy identifies the orbitals involved in MLCT state, which ligand dissociates and clarifies how our insights correlate with the experimental observations. A detailed understanding of these ultrafast processes governing the onset of photoinduced dissociation dynamics in organometallic complexes is essential for the rational design of sustainable photocatalysts based on earth-abundant metals, for the development of next-generation photovoltaic materials, and for addressing existing gaps in the literature of ultrafast science.



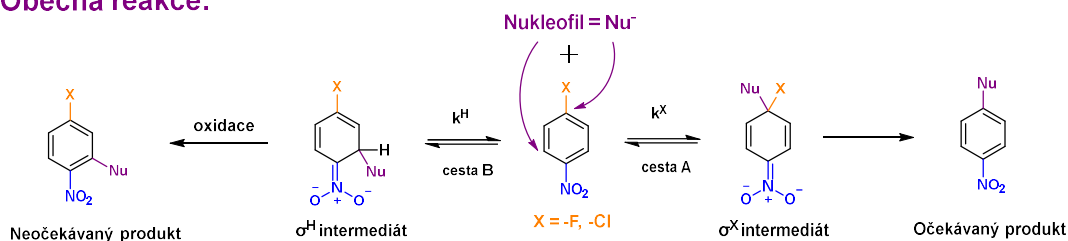
# (Spektro)elektrochemická studie nitroaromátů a jejich poutavě barevné interakce s nukleofily

David Gabaj (B3)

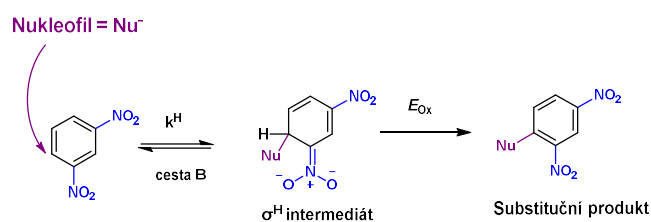
Školitelka: Ing. Karolína Salvadori Ph.D.

Elektronově deficitní aromatická jádra obsahující dobře odstupující skupiny (nejčastěji halogenidy) představují klasické substráty pro nukleofilní aromatické substituce. V případech, kdy aromatické jádro takové skupiny neobsahuje, případně jsou-li vhodně upraveny reakční podmínky, lze v rámci syntetických strategií uvažovat i o méně obvyklé substituci atomů vodíku na aromatickém kruhu. Tyto atomy však nejsou schopny samovolně odstoupit ze vznikajících Meisenheimerových intermediátů bez vnějšího zásahu. Tímto zásahem může být například oxidace za použití silných chemických oxidačních činidel. Selektivnější a zároveň ekologičtější alternativu k těmto činidlům může představovat elektrochemická oxidace, jejíž studium je hlavním cílem této práce. V úvodní části byly pomocí vybraných analytických metod charakterizovány výchozí aromatické nitroderiváty. Následně byla podrobně zkoumána reaktivita modelové nitrosloučeniny s vybranými nukleofily. Na základě získaných poznatků byla provedena elektrochemická oxidace, která vedla ke vzniku očekávaného substitučního produktu. Přestože výsledky potvrdily původní předpoklady, detailní studium chování vzniklých intermediátů zároveň otevřelo řadu nových otázek pro další výzkum.

## Obecná reakce:



## Námi studované modelové reakce:



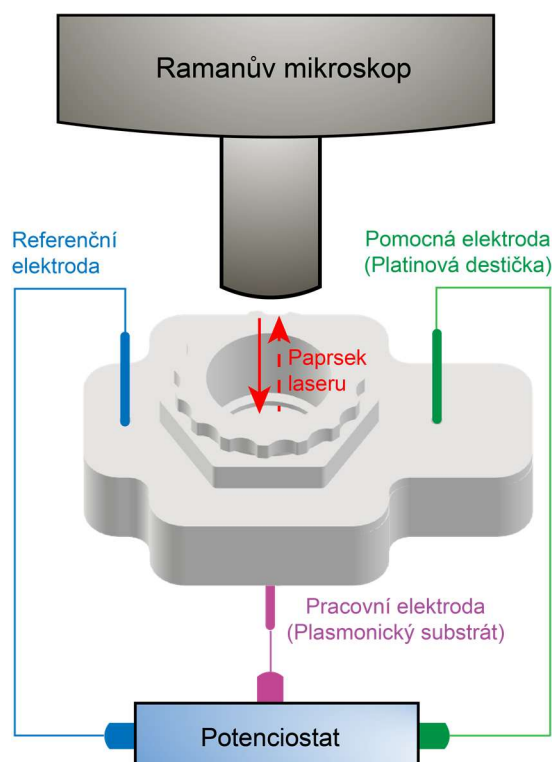


# Elektrochemicky indukované adsorpční mechanismy aromatických thiolů studované pomocí SERS

Bc. Jakub Havránek (M1)

Školitelka: Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.

Elektrochemická povrchem zesílená Ramanova spektroskopie (EC-SERS) umožňuje detailní studium adsorpčních procesů na rozhraní kov–molekula s vysokou citlivostí i selektivitou. Tato práce se zaměřuje na elektrochemicky řízenou adsorpci dvou aromatických thiolů *p*-xylen- $\alpha$ -thiolu a 4-aminobenzenethiolu na zlatých a stříbrných plasmonických substrátech. Měření probíhala v námi navržené elektrochemické cele kompatibilní s Ramanovým mikroskopem inVia (Renishaw), při třech excitačních vlnových délkách (532, 633 a 785 nm). Sledovány byly změny v intenzitě a poloze charakteristických Ramanových pásů v závislosti na aplikovaném potenciálu a tyto změny byly korelovány s orientací a uspořádáním molekul vůči povrchu substrátu. Výsledky naznačují odlišné adsorpční chování obou zkoumaných molekul, přičemž analyzovaná data ukazují komplexní závislost vibrační odezvy na typu substrátu, excitační vlnové délce i aplikovaném potenciálu. Pozorované trendy poskytují nový pohled na elektrochemicky řízené interakce aromatických thiolů s kovovými povrchy a otevírají prostor pro jejich další využití v oblasti plasmonicky laditelných senzorů a povrchové chemie.



# *Studium magnetického pole v kontextu chirální separace přes membránu*

Bc. Ondřej Hlaváček (M2)

Školitel: doc. Ing. Pavel Izák, Ph.D., DSc.

Chirální organické sloučeniny se vyskytují ve formě enantiomerů, jejichž fyzikálně-chemické vlastnosti jsou ve většině případů téměř totožné. Tato skutečnost ztěžuje jak selektivní syntézu jednoho z enantiomerů v enantiomerním přebytku, tak jejich následnou separaci z racemické směsi. Jedním z nových přístupů k jejich oddělování je chirální membránová separace, které je předmětem této experimentální práce. Záměrem je zvýšit účinnost separace využitím dalších hnacích sil než pouze koncentračního gradientu. V této práci se kromě samotného výzkumu enantioselektivní membránové separace soustředím také především na studium vlivu magnetického pole na její průběh. K měření je využívána difúzní cela s dvěma odběrovými místy (před a za membránou) a magnet o síle přibližně 0,3 T. K modifikaci polymerní membrány byl využit sulfobutylether- $\beta$ -cyklodextrin (SBE- $\beta$ -CD), jehož aniontový charakter a prostorová selektivita umožňují navázání na membránu a interakci s enantiomery. Analytem byl běžný Boc-Trp (oba enantiomery) a jeho speciálně syntetizovaná magneticky responzivní forma, použitá pro experimenty v magnetickém poli.

# Photochemistry of Phosphine-Based Nickel Complexes

Filip Holeček (B2)

Školitel: Ing. Daniel Bím, Ph.D.

Nickel is increasingly popular in organic catalysis for its unconventional reactivity differing from traditional palladium catalysts, showcasing  $\text{Ni}^{\text{I}}$  species as one of the key intermediates. However, this oxidation state is highly unstable; therefore, a reliable method for *in situ* generation is needed. We report on the photoactivity of (phosphine) $\text{Ni}^{\text{II}}\text{ArCl}$  complexes and their potential as accessible sources of  $\text{Ni}^{\text{I}}$  by direct irradiation. Our work focuses on synthesis and characterization of phosphine-based complexes with varying electron-donating ability and steric hindrance of the ligands. Studied complexes, commercially available or prepared by two-step synthesis, show a change in their absorption spectra upon irradiation by 385 nm light, most notably, an increase in the absorbance at  $\sim 360$  nm (Figure 1 for  $\text{DCPFNi}^{\text{II}}(\text{o-tolyl})\text{Cl}$ ). Kinetic studies of photoactivations were carried out, showing first-order kinetics. Exposure of irradiation products to air reveals high reactivity of the generated species, observed by the disappearance of the peak at  $\sim 360$  nm. Lastly,  $\text{DCPFNi}^{\text{I}}\text{Cl}$  was prepared synthetically, and its absorption spectrum was compared with the one obtained by irradiation. Results confirmed the irradiation of  $\text{DCPFNi}^{\text{II}}(\text{o-tolyl})\text{Cl}$  yields target  $\text{DCPFNi}^{\text{I}}\text{Cl}$ .

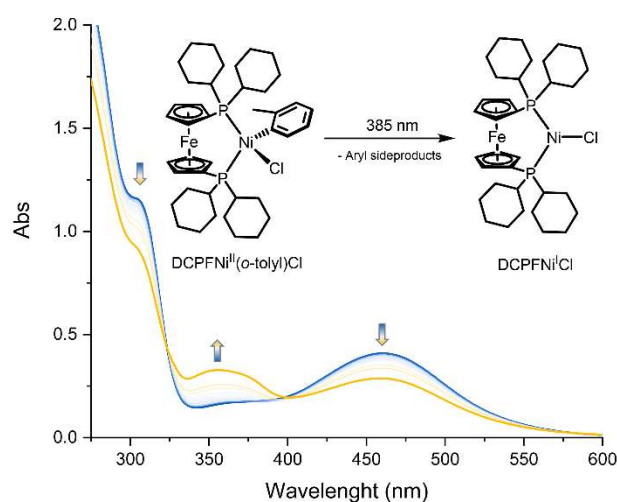


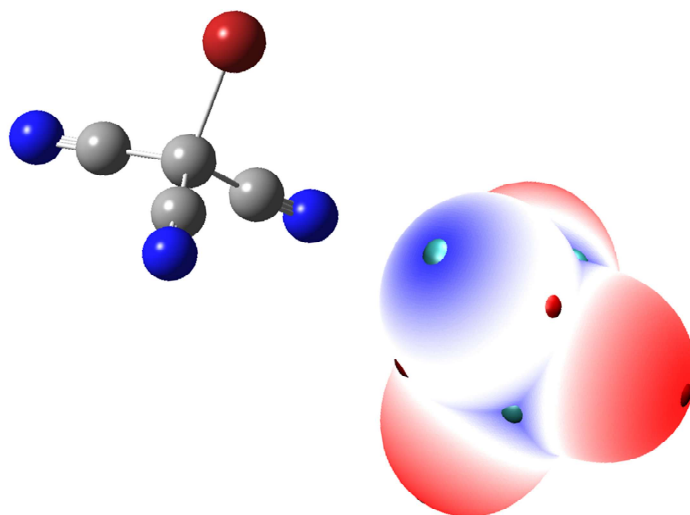
Figure 1: Time-dependent absorption spectra obtained by 385 nm LED irradiation of  $\text{DCPFNi}(\text{o-tolyl})\text{Cl}$  for a total time of 4 hours.

# *Sigma-díry a jejich nekovalentní interakce jako kohezí motiv pro molekulární krystaly*

Jiří Hrubant (B3)

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

Nevazebné interakce hrají velkou roli v molekulárních krystalech a ovlivňují přitom jejich fyzikálně-chemické vlastnosti. K nevazebným interakcím patří i relativně nedávno objevené interakce sigma-děr. Vliv sigma-děr na kohezi molekulárních krystalů může být zkoumán chemickými výpočetními metodami na vybraných organických molekulách, které obsahují skupiny odčerpávající elektrony schopné v krystalové mřížce významně interagovat se sigma-dírou vhodného nekovového prvku. Tato interakce je v této práci zkoumána z pohledu interakčních energií párových interakcí a také z pohledu celkové koheze polymorfních krystalových struktur, v nichž se interakce sigma-děr vyskytují v různé míře. Kvantově-chemické výpočty mřížkových energií a kvazi-harmonické modelování fononů pak umožňuje detailní analýzu a srovnání termodynamické stability zkoumaných struktur v závislosti na teplotě. Modelovány jsou i krystalové struktury s cílenými substitucemi atomů vykazujících sigma díry svými analogy z téže skupiny periodické tabulky, což umožňuje specificky se zaměřit právě na vyhodnocení interakcí sigma děr a jejich vlivů na kohezi molekulárních krystalů.



# *Exploring Microsolvation Effects in the UV-VIS Absorption Spectra of Aromatic Radical Anions*

Bc. Zuzana Hybnerová (M1)

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

Radical anions of aromatic hydrocarbons serve as key intermediates in wide range of chemical reactions. They are typically formed in an electron transfer process from an alkali metal (assumed to take place via a solvated electron intermediate) into an unoccupied  $\pi^*$  valence orbital. Gaining insight into the electronic structure of these specimens is crucial to understand and optimize reaction conditions in Birch-like reductions. Moreover, their characteristic absorption in the UV-VIS makes them interesting for photo-induced reactions. In previous research endeavours, electronic structure calculations (TD-DFT and multi-reference) were utilised to predict the absorption spectra of the radical anions, including focus on the vibrational resolution present in the concurrently measured experiment. Based on the alignment of theory and experiment (or lack thereof) one of the potential paths to improvement could be focusing on the specific solvation effects present. While this research is still ongoing, preliminary results are presented.

# *Finding the Right Mix: Designing Flexible Drug–Polymer Formulations for 3D Printing*

Patchawee Jarucharttada (B3)

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

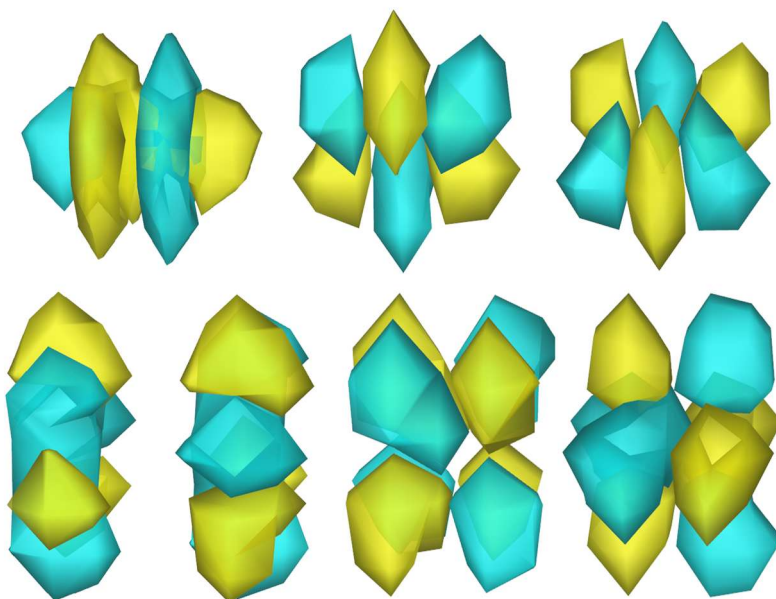
3D printing presents new opportunities for personalized drug delivery, particularly for poorly soluble compounds with limited bioavailability. Realizing this potential requires printable, flexible drug–carrier systems with well-characterized thermal behavior. In this study, a representative model compound and a versatile polymeric carrier were used to develop formulations suitable for extrusion-based processing. Key thermal and solubility properties were predicted using computational and theoretical methods, then validated experimentally via calorimetry. Modeling indicated limited solubility of the compound in the polymer, informing the selection of a moderate-concentration blend for initial extrusion trials to assess processability and mechanical flexibility. A plasticizer was incorporated to improve flexibility, with its proportion optimized through thermal analysis. The resulting blend was successfully processed under controlled conditions, yielding a material with favorable thermal and mechanical properties suitable for further development as a printable, amorphous filament.

# *Construction of Wannier Orbitals and Determination of Crystal Field Parameters for Ce-Doped $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$*

Jakub Ježek (B3)

Školitel: prof. Dr. Ing. David Sedmidubský

In Density Functional Theory (DFT), the  $4f$  states in lanthanides are often too delocalized, which leads to unreliable energy levels. To address this, two approaches are applied. The first approach involves transforming the DFT electronic structure into Wannier functions, which are localised on an atom, enabling direct evaluation of the Crystal Field Parameters and calculation of the Zero-field Splitting. The second approach focuses on determining the effective Hubbard parameter  $U_{\text{eff}}$ , the local correlation potential that is usually considered as an adjustable parameter. The assessment from DFT is shown for a well-studied material, Ce-doped  $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$  garnet, a compound with applications ranging from scintillation detectors to light-emitting diode phosphors. The results are compared with the standard spin-orbit calculation.



# *Computational Investigation of the Ultrafast Photoinduced Dissociation Dynamics of Iron Pentacarbonyl*

Magdaléna Jursová (B2)

Školitel: Ing. Vít Svoboda, Dr. sc. ETH Zürich

Catalysis by transition metal complexes has become a crucial part of modern chemistry. Although their catalytic effects are well established, the exact steps often involving ultrafast excited-state dynamics remain poorly understood. The photoinduced dissociation of  $\text{Fe}(\text{CO})_5$  is a representative example. Excitation at 266 nm triggers dissociation of CO to form  $\text{Fe}(\text{CO})_4$  within tens of femtoseconds, followed by a second cleavage producing  $\text{Fe}(\text{CO})_3$  on the picosecond timescale, generating unsaturated, catalytically active species. Despite recent efforts, there are still many open questions about the early dynamics of this light-triggered reaction. M-edge spectroscopy, which probes 3p to valence transitions, has emerged as a promising tool to study such processes. This work presents a computational investigation of the primary photodissociation step of  $\text{Fe}(\text{CO})_5$  leading to  $\text{Fe}(\text{CO})_4$ . The study explores the electronic and structural landscapes of the system and provides data relevant to its photochemistry. The results will be used to interpret upcoming experiments using attosecond transient absorption spectroscopy. Finally, these efforts will improve understanding of the ultrafast excited-state processes in catalytic complexes, thus improving their properties opening new venues in catalysis.



# *Time-Resolved Approach to Ultrafast Chirality Changes Mediated by Photodissociation of Epichlorohydrin*

Ondřej Kejzlar (B2)

Školitel: Ing. Vít Svoboda, Dr. sc. ETH Zürich

Chirality is the non-superimposability of an object on its mirror image, a property that shapes its interactions with light and matter. Understanding chiral molecules is therefore essential across many fields. Photoelectron circular dichroism (PECD) is a powerful technique that measures asymmetries in the spatial distribution of electrons photoionised by circularly polarised light, providing information about molecular chirality. In this work, I calculate PECD of epichlorohydrin (ECH). Excitation with a 200 nm ( $\approx 6.2$  eV) laser pulse induces dissociation of the C–Cl bond in ECH, and time-delayed circularly polarised light pulses capture the resulting time-resolved PECD (TRPECD) signal. My work focuses on simulating the molecular dynamics of ECH triggered by the photodissociation and performing electron-molecule scattering computations to predict TRPECD spectra. These results will later be compared to experiments. Combining these simulations with experiments allows us to visualise chiral dynamics and gain insight into the mechanisms of photoinduced dissociation, chiral selectivity, and ultrafast molecular processes.

# *Non-Condon effects with Spin–Orbit Coupling: A Route to Quantitative Spectra*

Bc. Marek Klíma (M2)

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

My work explores the combination of two extensions to the usual approximation made while modelling UV absorption spectroscopy. First one of these approximations is Franck–Condon approximation. I expand it by employing second-order Herzberg–Teller expansion. Second thing I am accounting for is spin–orbit coupling (SOC), since I want to model forbidden singlet–triplet transition. As a part of this effort, I explore behaviour of spin-orbit coupling and the dependency of transition dipole moment on molecular vibrations within model systems, which include  $\text{NO}_3^-$ , butadiene, and 9-phenyl-9H-karbasol. Those systems are known for the importance of second-order Herzberg–Teller expansion and show singlet–triplet transition. The ultimate goal of my work is then to implement newly developed approach for modelling direct singlet–triplet one- or two-photon absorption or emission spectra employing second-order Herzberg–Teller expansion with constant SOC in time-dependent representation.

# *EUV Source Chemistry: Ab Initio Dynamics for Sn-Ion Reduction by Molecular Hydrogen*

Bc. Jan Koreš (M1)

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

Extreme ultraviolet (EUV) lithography is a new major advancement for the semiconductor industry, which allows printing tiny features onto silicon wafers for the creation of advanced computer chips. A tin plasma is used for the generation of EUV light at 13.5 nm. The plasma is, however, emitting high-energy Sn ions, which damage the mirrors collecting the EUV light. To prevent this, the plasma is surrounded by hydrogen gas in order to slow down and reduce the highly charged ions. The reduction process is successfully used in practice, yet the quantitative characteristic and molecular understanding of elementary processes is not known. In my previous work, I have developed a tool which allows us to perform ab initio molecular dynamics in a diabatic basis using constrained density functional theory (CDFT) and the Landau–Zener formula. The tool can be adapted to the collisions of Sn ions and molecular hydrogen. Therefore, the aim of this work is to try to describe these reactions using CDFT and explore them using this framework, uncovering the reaction mechanism.

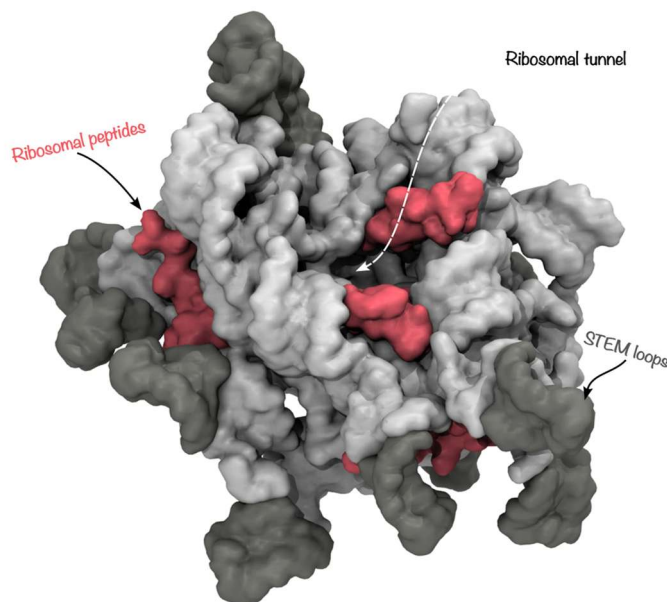
# *The role of non-canonical amino acids on the protoribosome*

Michael Křivan (B3)

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

The protoribosome, carrying the peptidyl transferase centre, represents an ancestral core of modern ribosomes. Fragments of several ribosomal proteins, so called rPeptides, extend toward the PTC and stabilize the RNA (1). In this study, we explore the conformational stability of a *T. thermophilus* protoribosome model upon substitution of lysine and arginine residues with their shorter prebiotic analogues, diaminobutyric acid (DAB) and diaminopropionic acid (DPR). We aim to probe the prebiotic chemical space with its distinct amino acid composition, which differs from that of contemporary proteins. Using all-atom molecular dynamics simulations, we observe weaker binding of certain rPeptides to the RNA, although their overall association is maintained. These findings suggest that while the prebiotic analogues provide reduced structural stabilization compared to the canonical residues, they may have been sufficient to support a stable protoribosomal construct during early evolutionary stages.

(1) Codispoti et al.: The interplay between peptides and RNA is critical for protoribosome compartmentalization and stability, *Nucl. Acids Res.* 2024.



# *Simulation Model of the Mitochondrial Ribosome*

Bc. Rudolf Kvasňovský (M1)

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

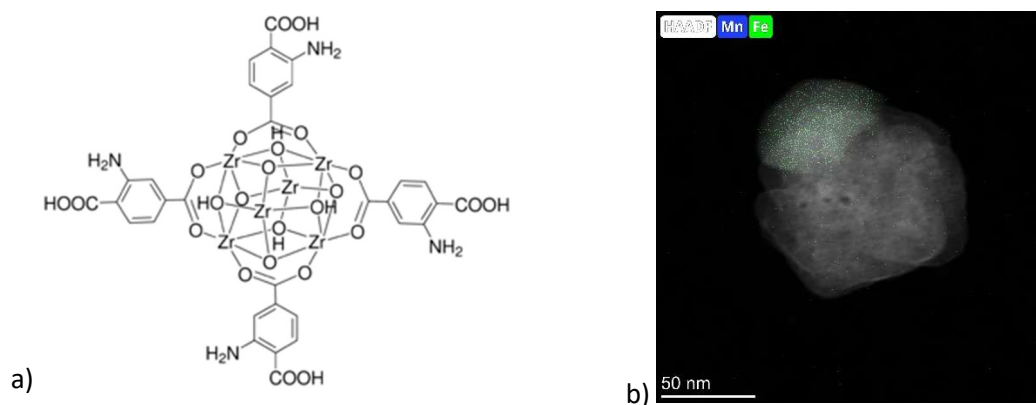
Mitochondrial ribosomes (mitoribosomes) are biomacromolecular complexes composed of dozens of proteins and several RNA chains. Located within mitochondria, they facilitate mitochondrial translation. Compared to other ribosomes, mitoribosomes are highly specialised and, in mammals, synthesise only 13 mitochondrial proteins. Their study may have a major impact, for example on the development of more efficient antibiotics, as bacterial ribosomes are their evolutionary ancestors and share certain structural similarities. However, during evolution, mitoribosomes have also acquired many unique structural features that make their composition distinct. This project focuses on building an all-atom simulation model of the human mitoribosome in explicit solvent and ions to mimic physiological conditions. It includes obtaining a suitable experimental model, followed by optimisation and equilibration steps performed using the molecular dynamics program *GROMACS*. Due to the system's size and computational demands, the project progresses slowly and is not yet complete, but it is already in its final stage. As no such model currently worldwide exists, this work may significantly advance understanding of mitoribosomal dynamic behaviour and contribute to progress in simulations of large biomacromolecular systems.

# Příprava magnetických nanočástic na bázi UiO-66-NH<sub>2</sub> a ZIF-8 pro efektivní separaci O<sub>2</sub> od N<sub>2</sub>

Bc. Tomáš Mathauser (M2)

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

Kryogenní destilace a absorpční vypírky patří k nejčastěji používaným metodám separace plynů. Nicméně jejich energetická náročnost vede k rozvoji alternativních procesů, jako jsou membránové separace nebo adsorpční metody PSA (Pressure Swing Adsorption) a TSA (Temperature Swing Adsorption). V PSA/TSA procesech se směs plynů cyklicky vede kolonami s adsorbentem, který díky rozdílné afinitě selektivně váže konkrétní plyny. Inovativní porézní nanočástice MOF (Metal–Organic Frameworks) představují nadějnou novinku pro adsorpční aplikace. Jedná se o prostorově uspořádané 2D/3D struktury, tvořené kovovými ionty (klastry) s propojkami z organických ligandů. Modulární struktura MOFů umožňuje jejich snadnou modifikaci pro zvýšení afinity vůči konkrétním plynům. Vedle funkcionalizace -NH<sub>2</sub> skupinami, se jedná o navázání magnetické komponenty, která umožní efektivní separaci paramagnetického O<sub>2</sub> (přitahován magnetickým polem) od diamagnetického N<sub>2</sub> (odpuzován polem). Cílem této práce je syntéza hybridních magnetických nanočástic (HMN, Obr.1) na bázi MOFů UiO-66-NH<sub>2</sub> a ZIF-8 a oxidů MnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>. Nejprve budou připraveny MnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> nanočástice s cílem optimalizovat jejich magnetickou sílu a poté budou solvotermálně připravené HMN testovány s využitím gravimetrické sorpční metody pro O<sub>2</sub> a N<sub>2</sub>.



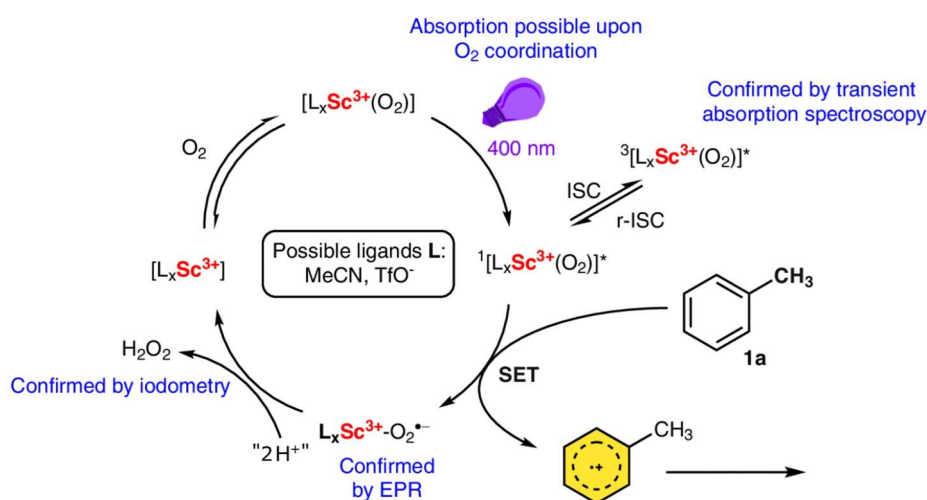
**Obrázek 1:** a) Strukturní vzorec UiO-66-NH<sub>2</sub>; b) STEM analýza hybridního materiálu UiO-66-NH<sub>2</sub>-MnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> se zvýrazněným výskytem Mn a Fe iontů

# Ab initio modelování fotooxidace katalyzované Sc(III) komplexy

Bc. Jan Mišek (M1)

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

Čerstvá práce z naší univerzity (*Nature Communications* 16, 7851, 2025) ukazuje, že komplex skandia  $\text{Sc}(\text{OTf})_3$  překvapivě slouží jako fotokatalyzátor. Koncept je demonstrován na aerobní oxidaci benzylové skupiny (např. toluenu, arylových alkoholů, ...) či substituci nitrilové skupiny za vodík v aromatických systémech (např. difenylether, bifenyl, ...). Cílem této práce je pomocí technik *ab initio* modelování objasnit strukturu vznikajících Sc(III) komplexů solvatací  $\text{Sc}(\text{OTf})_3$  v acetonitrilu. Následně bude za pomoci metod kvantové chemie prozkoumána jejich fotokatalytická aktivita simulací absorpčních spekter včetně energetiky excitovaného stavu. Důraz bude dále kladen na podrobnou charakterizaci reakčního mechanismu iniciující oxidaci. Klíčovým krokem tohoto mechanismu je přenos elektronu (SET, z anglického *single-electron transfer*) mezi reaktantem a Sc(III) komplexem v excitovaném stavu, který bude popsán technikami umožňující deskripci diabatických stavů. Bude také diskutována elektronová struktura Sc(III) iontu a možnosti charakterizace rychlosti jednotlivých elementárních dějů.



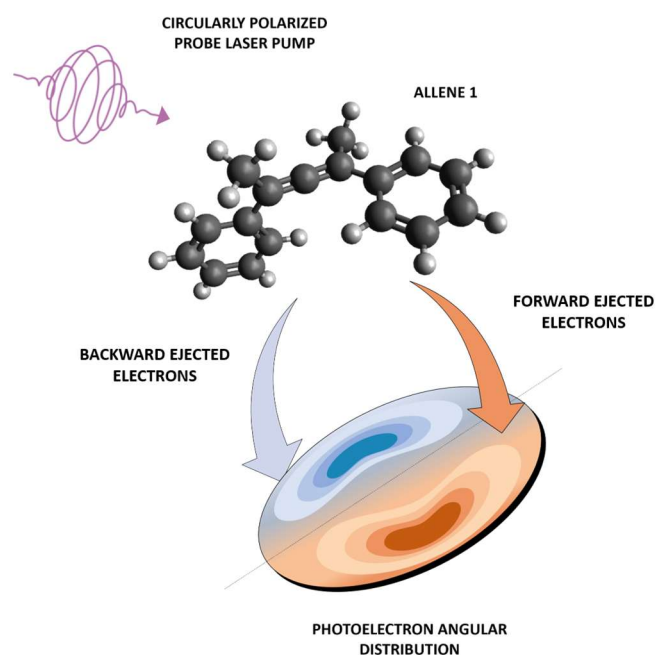
**Obrázek 1:** Část návrhu reakčního schématu katalýzy Sc(III) komplexu v acetonitrilu na základě experimentu (*upraveno*) (Tolba, A.H., El-Zohry, A.M., Khan, J.I. et al. Redox-innocent scandium(III) as the sole catalyst in visible light photooxidations. *Nat Commun* 16, 7851 (2025). <https://doi.org/10.1038/s41467-025-63233-4>; CC-BY: <http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>)

# *Tetrasubstituted Allenes as Probes of Axial Chirality in Photoelectron Circular Dichroism: Theory and Synthesis*

Klára Mládková (B2)

Školitel: Ing. Vít Svoboda, Dr. sc. ETH Zürich

Chirality governs molecular behaviour, making its control essential for the rational design of pharmaceuticals, catalysts, and functional materials. Advances in ultrafast spectroscopy now allow probing of chiral photoelectron circular dichroism (PECD) spectroscopy. This method is based on directional asymmetry in photoelectron emission after ionization, offering an insight into electron dynamics inaccessible to conventional optical methods. To explore axial chirality by PECD, tetrasubstituted allenes were chosen as model systems. Their linear C=C=C backbone with orthogonal  $\pi$ -bonds gives rise to chirality when terminal substituents differ. In this work, theoretical UV/VIS and ECD spectra calculations identified several promising candidates for future PECD measurements. A target molecule (allene **1**) was synthesized via two synthetic pathways yielding a racemic mixture. Comprehensive  $^1\text{H}$  and  $^{13}\text{C}$  NMR analyses, including 1D and 2D ( $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  COSY, long-range COSY and NOESY, and  $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$  HSQC and HMBC) techniques, confirmed its structure. Theory and synthetic work are essential to obtain suitable compounds for planned PECD measurements to study axially chiral molecules, so far omitted structural motif in PECD experiments.





# Štúdium vlastností reakčných medziproduktov niklovej fotoredoxnej katalýzy pomocou elektroanalytických metód

Bc. Rebeka Morvaiová (M2)

Školiteľ: Ing. Daniel Bím, Ph.D.

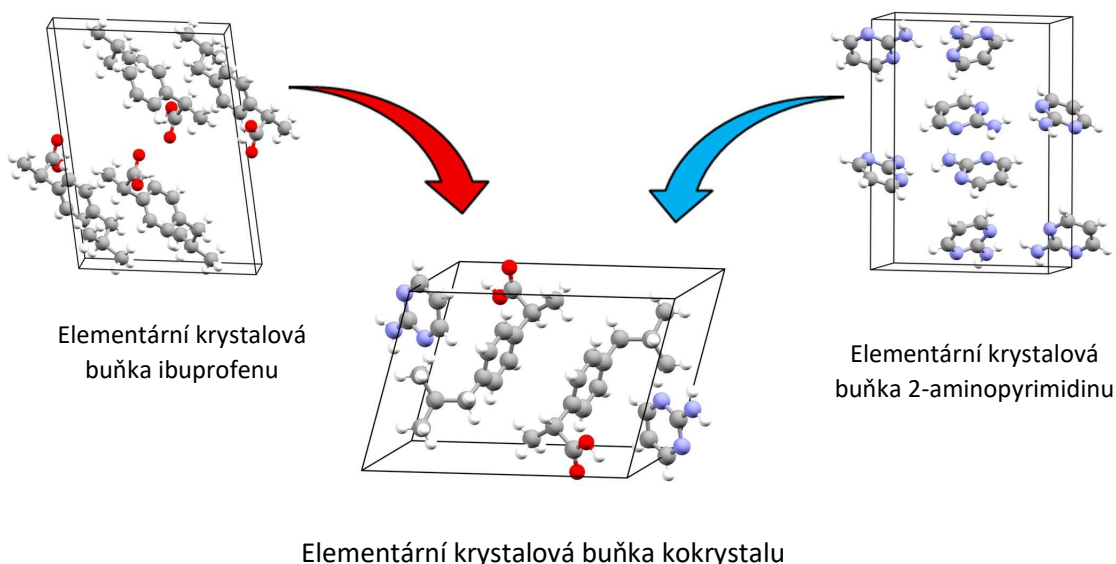
Jedným z najčastejšie používaných postupov prípravy C–C a C–heteroatóm väzieb sa stali cross-couplingové reakcie katalyzované prechodnými kovmi. V súčasnosti sa ako účinný katalyzátor do popredia dostáva nikel, ktorý v redoxných reakciách prednostne podlieha dvojelektrónovým prechodom, čo z neho robí dôležitú náhradu za vzácne kovy v katalýze. Pod tieto prechody spadá  $\text{Ni}(0)/\text{Ni}(II)$  a v súčasnosti zaujímavejší prechod  $\text{Ni}(I)/\text{Ni}(III)$ , využívaný v katalytických cykloch, ktorý kombinuje tradičný dvojelektrónový redoxný mechanizmus v oxidatívnej adícii a reduktívnej eliminácii organických látok s jedoelektrónovým redoxným mechanizmom aktivácie niklu a/alebo reaktivitou s organickými radikálmi. Samotná štruktúra a reaktivita niklových intermediátov je kvôli ich metastabilite nedostatočne preskúmaná. Keďže niklové komplexy v oxidačných stavoch  $\text{Ni}(I)$  sú veľmi nestabilné, cieľom tejto práce bola príprava komerčne nedostupných  $\text{Ni}(II)$  komplexov a následne ich analýza spojená s analýzou komplexov bežne dostupných pomocou UV-Vis spektroskopie a elektroanalytických metód, vďaka ktorým sme schopní  $\text{Ni}(I)$  komplexy generovať *in situ*. Porovnaním redukčne-oxidačných vlastností bežne používaných niklových katalyzátorov a ich metastabilných reakčných medziproduktov budeme schopní lepšie pochopiť vzťah medzi štruktúrou a reaktivitou týchto medziproduktov v cross-couplingových reakciách.

# In silico interpretace tvorby kokristalu ibuprofenu s biokompatibilními koformery

Tomáš Mráz (B2)

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

Určitě každý z nás alespoň jednou v životě užil analgetikum (lék proti bolesti), ať už například na bolest hlavy, zubů nebo menstruační bolesti. Mnoho z těchto léčiv obsahuje jako účinnou léčivou látku (API – *active pharmaceutical ingredient*) 2-(4-isobutylfenyl)propionovou kyselinu známou pod oficiálním názvem ibuprofen. Vyskytuje se v různých chemických formách jako je racemát, amorfní forma, sůl a další. Moderní farmacie hledá způsoby, jak zlepšit vlastnosti běžně používaných léčiv, například zvýšit jejich rozpustnost, vstřebatelnost a kinetickou stabilitu, pomocí nových chemických forem. Jedna z nabízených forem je kokystal, pevná látka složená ze dvou nebo více různých molekul spojených pomocí nekovalentních interakcí. Tyto látky jsou ve vztahu hostitel-host, kde v roli hostitele vystupuje daná API a hostem je biokompatibilní koformer. V této práci se zabývám právě interpretací jednoho z takových systémů, kde je účinná léčivá látka ibuprofen, který zde vystupuje za doprovodu 2-aminopyrimidinu. Tento systém jsem studoval pomocí *in silico* (modelování pomocí výpočetní techniky) výpočetních metod využívajících kvantově mechanických výpočtů a hodnocení termodynamické stability. Zaměřil jsem se na porovnání Gibbsových energií čistých látek a kokristalu v rámci kvaziharmonické aproximace na úrovni teorie hustotního funkcionálu a na modelování acidobazické reaktivity ibuprofen s daným koformerem s cílem posoudit možnosti přeskoku protonů vedoucích od kokristalu k iontové soli.



# *Thermodynamic properties and phase behaviour of oxazolines with model APIs*

Emmeline Murton (B3)

Supervisor: prof. Ing. Květoslav Růžička, CSc.

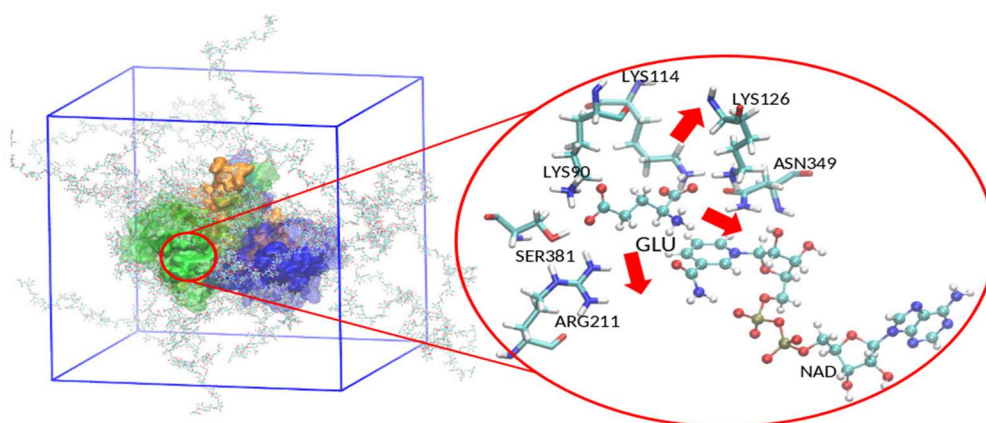
This work investigates the thermodynamic properties and phase behavior of selected mono(2-oxazoline) compounds with naproxen as a model active pharmaceutical ingredient (API). The studied oxazoline derivatives include 2-methyl-, 2-ethyl-, 2-butyl-, and 2-phenyl-2-oxazoline. Due to complex thermodynamic behavior observed for 2-ethyl- and 2-butyl-2-oxazoline, the focus is on 2-methyl- and 2-phenyl-2-oxazoline. The heat capacities of the condensed phases were measured using Tian–Calvet calorimetry (SETARAM Microcalvet) between 255.15 and 331.15 K. Measurements above 331.15 K were limited by sample loss, mitigated by sealing vessels with Teflon cord. The phase behavior of naproxen–2-methyl-2-oxazoline and naproxen–2-phenyl-2-oxazoline systems was studied by differential scanning calorimetry (DSC 2500) from 183.15 to 438.15 K. Tammann diagrams were constructed to determine eutectic compositions and molar enthalpy changes, and corresponding phase diagrams were developed to illustrate liquidus and eutectic temperatures. These results provide new insights into the intermolecular interactions between naproxen and mono(2-oxazoline) derivatives, enhancing understanding of their thermodynamic behavior and relevance to poly(2-oxazoline) systems.

# *How substrates enter glutamate dehydrogenase active site in crowded environment: cleft or shortcut?*

Bc. Daniel Myšák (M1)

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

Living organisms regulate their life functions through enzymes, whose activity is highly sensitive to the surrounding environment. The cellular interior is densely packed with macromolecules, yet most in vitro enzyme studies are performed in simple aqueous buffers, neglecting crowding effects. Using all-atom molecular dynamics simulations, we studied effects of pH, different substrates and crowded environment on glutamate dehydrogenase (GDH) structure and dynamics [1]. Our current research focuses on the ligand access, since under certain conditions product release represents the rate-limiting step [2]. Using enhanced sampling methods (steered MD and umbrella sampling), we modeled and quantified substrate release pathways. Several exit routes were identified and grouped into three dominant ones. Optimized pulling simulations under different solvent conditions revealed how molecular crowding influences the Gibbs free energy profiles and substrate release mechanisms of GDH.



**Figure 1: Our model system with zoom into the active site and highlighted three leaving paths'**

[1] Rosario G. et al. Can macromolecular crowding help regulate glutamate dehydrogenase activity? ACS Omega. 2025 Oct 30;10. doi:10.1021/acsomega.5c07618

[2] Bera AK. et al. Allosteric regulation of glutamate dehydrogenase deamination activity. Scientific Reports. 2020;10:16785. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-73743-4>

# *Povrchové napětí různých roztoků surfaktantů*

Bc. Tomáš Navrátil (M1)

Školitel: Ing. Mária Zedníková, Ph.D.

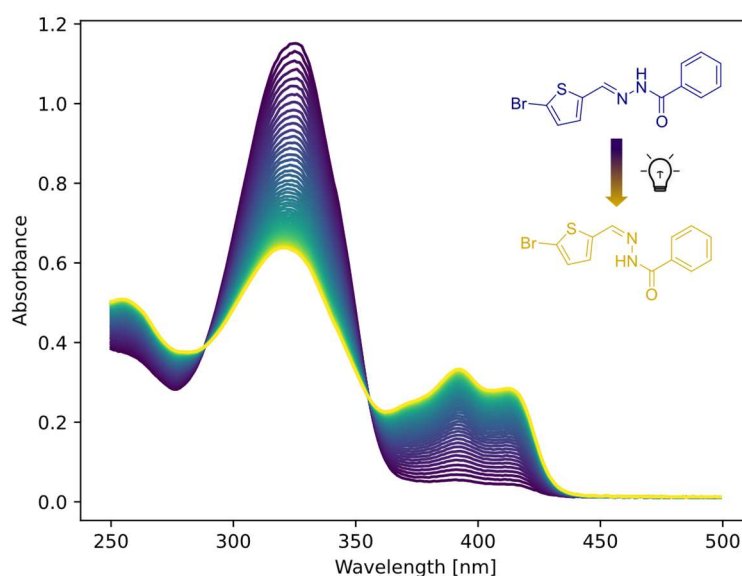
Tato práce se zabývá studiem interakcí slabě povrchově aktivních látek na rozhraní kapalina–plyn. Cílem bylo experimentálně popsat chování 1-pentanolu, 1-oktanolu a  $\alpha$ -terpineolu z hlediska jejich vlivu na statické a dynamické povrchové napětí a viskoelastické vlastnosti rozhraní. Povrchová napětí byla měřena metodami Wilhelmyho destičky, Du Noüyho prstence a bublinkového tensiometru, reologické vlastnosti pak rotačním reometrem. Získaná data byla analyzována pomocí adsorpčních izoterm (Langmuirova, Frumkinova) a modelů kinetiky adsorpce (difuzní, Langmuir–Hinshelwoodova a její modifikovaná verze). Výsledky ukázaly, že i slabě povrchově aktivní látky mohou významně ovlivňovat povrchové napětí a mezifázovou reologii. Nejvýraznější účinky byly pozorovány u 1-oktanolu, který vykázal nejvyšší afinitu k rozhraní a největší reologickou odezvu.

# Diarylethene Based Acylhydrazones Photoswitches: Synthesis and Spectroscopy

Michal Novotný (B3)

Školitel: doc. RNDr. Eva Muchová, Ph.D.

This work focuses on diarylethene-based acylhydrazone photoswitchable molecules, in which one aryl unit is either a thiophen-2-yl or a thieno[3,2-b]thiophen-2-yl group, and the other is a phenyl group. The study covers all stages of research—from molecular design and synthesis to spectral and computational characterization. Several compounds were synthesized in larger quantities in preparation for liquid-jet X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) experiments. All compounds were confirmed using  $^1\text{H}$  NMR and HRMS, and characterized using UV–Vis spectroscopy and solid-state XPS. Additionally, single crystals of two compounds were grown and analyzed using X-ray crystallography. For the computational studies, MRSF-TDDFT was employed to describe the complex open-shell systems. Molecular dynamics coupled with LR-TDDFT was used to simulate highly accurate UV–Vis absorption spectra. Finally, methods for describing core excitations, such as EOM-CCSD, were also utilized.



# *Ab initio Modelling of Molecular Solar-Thermal (MOST) Systems*

Marek Plachý (B3)

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

Conventional solar panels are a popular, inexhaustible, and emission-free alternative to traditional fuel-based sources. However, the whole concept has one major drawback – they cause electrical grid instability. Solar generation peaks during high-irradiance periods causing overvoltage and conversely, ceases completely at night, requiring compensation. Molecular Solar-Thermal Systems offer a compelling alternative. A photon-induced isomerisation of the norbornadiene/quadricyclane (NBD/QC) system was studied. Potential energy surface (PES) was examined using rigid, relaxed, and nudged elastic band (NEB) scans at the CASSCF(2,2) level to estimate the reaction coordinate. Energetic properties of the reaction (energy storage density, enthalpy, reverse reaction barrier) were calculated also at the CASSCF(4,4) and semiempirical OM3-MRCISD levels. Nonadiabatic molecular dynamics with widely used fewest switches surface hopping (FSSH) algorithms will be applied for further analysis. Developed procedure will be used for benchmarking NBD/QC derivatives and structurally different molecular frameworks (azobenzene, stilbene, DHA/VHF, spiropyran, etc.). Results will be discussed in the context of engineering implementation of MOST devices, including recommendations for rational molecular design with balanced properties.

# *Conformational properties of erythromycin bound to the ribosome exit tunnel*

Denis Šebo (B2)

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

Erythromycin is a representative of the macrolide antibiotic class that inhibits bacterial protein synthesis by binding within the ribosomal nascent peptide exit tunnel near the peptidyl transferase center. In this work, I examined the conformational variability of erythromycin across 23 ribosome–erythromycin complexes publicly available in the Protein Data Bank and analyzed local tunnel flexibility to identify structural motifs associated with ligand accommodation. To complement the structural comparison, I performed a molecular dynamics simulation of erythromycin in water and evaluated its intrinsic flexibility. Obtained results provide insight into the relationship between erythromycin conformation and ribosomal tunnel geometry and will be extended toward quantifying the energetic barrier of the transfer of erythromycin into its binding pocket.



# *Studium polymorfismu z pohledu kalorimetrie a měření tlaků sytých par*

Bc. Jiří Šnajdr (M1)

Školitel: doc. Ing. Vojtěch Štejfa, Ph.D.

Tato práce navazuje na předchozí činnosti v rámci akce COST BEST-CSP zaměřené na studium polymorfního chování organických materiálů. Zabývá se popisem a interpretací organických polymorfních systémů, doplňuje nová data pro již studované látky a rozšiřuje záběr o nové. Na polymorfní chování zde je nahlíženo z pohledu diferenční skenovací kalorimetrie (DSC), která umí detekovat transformace mezi kondenzovanými fázemi, i z pohledu rovnováhy krystalická forma – pára.

Z pohledu DSC jsem se nejvíce věnoval 2,2'-dipyridylaminu, a sice všem třem jeho známým krystalickým formám. Mimo jiné jsem zjistil, že je lze všechny připravit *in situ* krystalizací z taveniny vhodnou volbou teplotního režimu, ačkoli dosud byly krystalizovány z různých rozpouštědel. Díky tomu není nutné připravovat pro každý DSC experiment nový vzorek, což práci výrazně zefektivňuje.

Dále jsem měřil sublimační tlaky 4'-Hydroxyacetofenonu, pro který jsem v předchozí práci určil tlaky sytých par kapaliny. Zatím se podařilo z tohoto pohledu studovat pouze krystalickou formu I, i tak lze alespoň posoudit konzistenci tlaků sytých par s měřením teploty a entalpie tání pomocí DSC. Nyní měřím sublimační tlaky formy  $\alpha$  pyrazinamidu, u něhož data z DSC naznačují, že bude možné studovat i sublimační tlaky forem  $\delta$  a  $\gamma$ .

# Biofyzikální charakterizace lipidových kapének: Role lipidového složení

Mgr. Richard Sochor (M2)

Školitel: Mgr. Šárka Pokorná Jungwirth Ph.D.

Lipidové kapénky (z angl. *lipid droplets*, LDs) jsou dynamické buněčné organely, které slouží jako hlavní intracelulární zásobárna neutrálních lipidů, především triacylglycerolů (TAG) a sterolových esterů (SE). Dříve byly považovány pouze za pasivní úložiště energie, avšak moderní výzkumy ukazují, že hrají aktivní roli v celé řadě buněčných procesů. Strukturálně jsou lipidové kapénky unikátní. Na rozdíl od většiny ostatních organel nejsou obklopeny klasickou dvojitou lipidovou membránou, ale monovrstvou fosfolipidů, která odděluje hydrofobní jádro neutrálních lipidů od cytosolu. Naším cílem je experimentálně vytvořit LD o definovaném složení různých TAG a SE a pomocí různých fluoroforů, citlivých na polaritu okolního prostředí, zkoumat vliv těchto lipidů na biofyzikální vlastnosti LD. Budeme využívat fluorescenční techniky jako je měření emisních spekter a časově-rozlišných spekter. Charakterizace LD s různým lipidovým složením pomocí fluorescenčních parametrů následně umožní studovat vliv složení LD v živých buňkách v reálném čase. Dlouhodobým záměrem tohoto projektu je ověřit vliv lipidového složení na interakci a případnou agregaci alpha-synucleinu, proteinu, který tvoří toxické plaky v mozku pacientů s Parkinsonovou chorobou.

# Hledání tranzitních stavů minimalizací: reakční bariéry z perspektivy excitovaných stavů

Lukáš Tabery (B2)

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

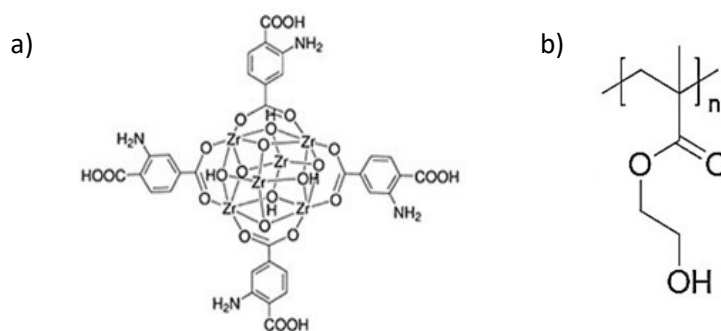
Cílem práce je vývoj nové techniky umožňující hledání tranzitních stavů prostou minimalizací s využitím informací o více elektronových stavech. Tranzitní stav (TS) bývá chápán jako sedlový bod na ploše potenciální energie a hledán sofistikovanými numerickými metodami. Jejich použití je však výpočetně náročné a vyžaduje dobrou znalost lokálního tvaru PES. Obvykle je nutné znát alespoň částečný Hessián a mít k dispozici počáteční strukturu v blízkosti skutečného tranzitního stavu. V rámci předkládané práce používám jinou perspektivu. Nahlížím na TS jako na výsledek interakce diabatických stavů odpovídajících reaktantům a produktům. V blízkosti jejich křížení na reakční koordinátě vzniká oblast odpovídající tranzitnímu stavu, přičemž reakční koordinátu lze pak chápat jako interpolaci elektronové struktury mezi těmito dvěma stavy. K získání diabatických stavů využívám metodu *constrained density functional theory* (CDFT), která umožňuje definovat nábojový a spinový charakter na vybraných fragmentech a tím konstruovat diabatické stavy s jasným chemickým významem. V práci navrhuji funkcionál, jehož minimalizací lze aproximovat tranzitní geometrii. Tato minimalizace je demonstrována na sadě jednoduchých, CDFT-popsatelných reakcí, jmenovitě nukleofilních substitucí a přenosech radikálu.

# Vývoj a testování nových kompozitních materiálů na bázi polyHEMA a UiO-66-NH<sub>2</sub> pro membránové separace CO<sub>2</sub> od permanentních plynů

Bc. Adéla Ulrichová (M1)

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

Tato práce je zaměřena na přípravu a testování inovativních kompozitních materiálů pro efektivní separaci CO<sub>2</sub> ze směsí plynů. Byla studována příprava tzv. mixed matrix membrane (MMM) s cíleně zabudovanými MOF nanočásticemi UiO-66-NH<sub>2</sub> (Obr. 1a) v poly(2-hydroxyethylmethakrylátu) (polyHEMA) (Obr. 1b). Nanočástice UiO-66-NH<sub>2</sub>, které byly syntetizovány v rámci práce, mohou díky přítomnosti –NH<sub>2</sub> skupin reagovat s –OH skupinami v polymerním nosiči. Takto kontrolovaná depozice nanočástic do polymerní matrice umožňuje překonání obvyklých potíží spojených s přípravou MMM materiálů, u kterých vlivem nekontrolované depozice aditiva při vytváření membrány dochází k agregaci a sedimentaci nanoaditiva a dalším defektům v morfologii membránového materiálu, což se negativně projevuje na výsledné separační schopnosti materiálu vlivem poklesu selektivity. V rámci práce byla studována sorpce CO<sub>2</sub> v neplněném polymeru a ve vzorcích MMM s kontrolovanou i nekontrolovanou depozicí UiO-66-NH<sub>2</sub>. Gravimetrické sorpční experimenty potvrdily pozitivní vliv kontrolované depozice na separační vlastnosti polyHEMA–UiO-66-NH<sub>2</sub> membránových materiálů, které vykazovaly 4x větší sorpci v porovnání s neplněným polymerem. Sorpce nekontrolovaně plněného polymeru se stejným množstvím nanoaditiva pak byla jen 1,5x větší.



**Obr. 1:** Strukturní vzorec a) MOF nanočástic UiO-66-NH<sub>2</sub>, b) polyHEMA

## *Chiral X-ray Spectroscopies in the Liquid Phase*

Bc. Jakub Vokrouhlický (M2)

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

An intriguing and little explored aspect is the chirality transfer from (chiral) solute to an achiral solvent molecule, a phenomenon known as chiral imprinting. We anticipate that the X-ray core-level spectroscopies are ideally suited to tackle this effect: they allow an element-specific but also a site-specific probing of individual atoms within a molecule even in condensed environments. My study focuses on investigating the chirality of alanine in aqueous solution by employing K-edge X-ray absorption spectroscopy (XAS), specifically X-ray circular dichroism (XCD). I have performed TD-DFT calculations of alanine + water clusters and calculated their corresponding K-edge XAS and XCD spectra. XCD spectra were also calculated from snapshots of alanine and its immediate solvation shell, extracted from quantum mechanical/molecular mechanical dynamics simulations of alanine within a water droplet. The next crucial step is to compare these computational spectra against experimental results, which is now possible as I have been awarded beamtime at the Berlin synchrotron (BESSY). For this project, I will collaborate with Dr. Christian Schewe, a pioneer in liquid flat-jet technology, which allows for element-specific K-edge probing of solvents and solutes within the bulk liquid.

# Ribose Photochemistry in Space: Nonadiabatic Reaction Pathways

Bc. Katarína Vosovičová (M2)

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

The number of identified saccharide-type molecules in the interstellar medium and on comets has been steadily increasing, raising the key question of their stability under cosmic radiation. The photochemistry of ribose can provide insights into the chemical processes on early planets, and the formation of life in space or on Earth, as it is a component of RNA. Despite its importance, there are no available *ab initio* photodynamical studies of most saccharides, including ribose. To mimic space-like conditions, computational chemistry methods were applied, overcoming the limitations of experimental setups. Building on previous research on amino acids, the photodynamics of ribose were studied in the gas phase, focusing on its global minimum form—cyclic  $\beta$ -D-ribopyranose. Two computational approaches were used for comparison: CASSCF (Complete Active Space Self-Consistent Field) and the newly developed approach MRSF-TDDFT (Mixed-Reference Spin-Flip Time-Dependent Density Functional Theory). With this state-of-the-art approach, possible reactive channels were identified to provide new insights into the photostability and chemical evolution of prebiotic molecules in astrochemical environments.

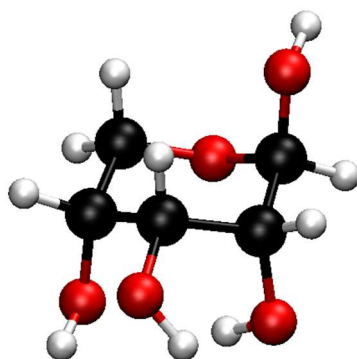


Figure 1: Ribose in its global minimum of  $\beta$ -D-ribopyranose

# Ústav chemického inženýrství (409)

## ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

doc. Dr. Ing. Pavlína Basařová

## SEZNAM SEKČÍ

- Chemical Engineering I
- Chemické inženýrství II
- Chemické inženýrství III
- Chemické inženýrství IV
- Chemické inženýrství V
- Chemické inženýrství VI
- Chemické inženýrství VII
- Chemické inženýrství VIII

SPONZOŘI ÚSTAVU CHEMICKÉHO INŽENÝRSTVÍ

|                                                                                     |                                                                                     |                                                                                       |                                                                                       |
|-------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------|
|    |                                                                                     |     |                                                                                       |
|    |    |    |                                                                                       |
|    |    |    |                                                                                       |
|  |  |  |                                                                                       |
|  |  |  |                                                                                       |
|  |  |   |  |
|  |  |   |  |



# Chemical Engineering I

MÍSTO: B141B

## KOMISE

- doc. Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D. (předseda)
- Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.
- Ing. Suada Dukaj
- Ing. David Gráf
- Ing. Martin Jakubec, Ph.D. (Ranido)
- Ing. Josef Beránek, Ph.D. (Zentiva)

## SOUTĚŽÍCÍ

- Bc. Milana Dejaková – Molecular dynamics observations of binary interactions of small molecules in aqueous solutions (M1, Ing. Terezie Císařová)
- Mathis Dupire – Population balance modelling of wet grinding processes for the production of pharmaceutical nanocrystals (M2, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)
- Bc. Monika Felcmanová – Design and Fabrication of a Microfluidic Flow Cell with Passive Mixers (M1, Ing. Anna Vanluchene, Ph.D.)
- Bc. Anežka Hendrychová – Deactivation and reactivation of Pd centers in SSZ-13 zeolite for NO<sub>x</sub> adsorption (M1, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)
- BSc. Iris Leitmannová – Optimization of current methodology for measuring physical parameters during the bread baking process (M1, prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha)
- Bc. Kryštof Luhan – Study of the partition coefficient in the liposomal membrane (M1, Ing. Martin Roudný)
- Bc. Tibor Malinský – Development of an in vitro bronchial cell model for testing respiratory drug delivery (M1, Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.)
- Bc. Andreas Maton – Singlet Oxygen Oxidations in the Microflow Cell Photocatalysed by g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> (M2, Ing. Anna Vanluchene, Ph.D.)
- Bc. Sebastián Guillermo Vásquez Lecaros – Development of Stable Emulsions for Sustainable Hair Dyes from Peruvian Plants (M1, Ing. Anna Vanluchene, Ph.D.)
- Petr Vítek – Atomically Precise CuPd Pentamer Clusters for Catalytic Dehydrogenation of Cyclohexene (B3, RNDr. Štefan Vajda CSc., Dr.habil.)

# Chemické inženýrství II

MÍSTO: BS4

## KOMISE

- prof. Ing. Dalimil Šnita, CSc. (předseda)
- Ing. Vojtěch Šálek, Ph.D.
- Ing. Dan Trunov
- Ing. Michal Dudák, Ph.D. (Anamet)
- Ing. Jiří Kolář, Ph.D. (MSD)
- Ing. David Smrčka, Ph.D. (Zentiva)

## SOUTĚŽÍCÍ

- Matouš Barták – Vývoj mikroprůtočné cely pro heterogenní fotokatalýzu (B3, Ing. Anna Vanluchene Ph.D.)
- Iva Brhelová – Kopermeace: vliv účinných látek na průchodnost lipozomálních membrán (B2, Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D.)
- Viktor Bursík – Development of in situ optical method in stirred small-scale bioreactor system (B3, prof. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.)
- Martin Drnec – Optimization of a Zinc–Iodine Hybrid Flow Battery: Influence of Current Density and Membrane Characteristics (B3, Ing. Petr Mazúr, Ph.D.)
- Daniel Petrok – Lineární kapslovačka pro flexibilní kombinace léčiv (B3, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)
- Ondřej Štoček – Příprava strukturovaných Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> katalyzátorů (B2, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)
- Johana Vaníčková – Sliding Ferroelectric Catalyst for Carbon Nanoparticle Generation (B2, Dr. Timotheus Verhagen)
- Mark Vashchenchuk – Reaktor na výrobu pukancov ako vzdelávací nástroj na výučbu chemického inžinierstva. (B3, Ing. Tomáš Kurák, PhD)
- Alex Vrabec – Příprava a charakterizace teplotně-responsivních mikrorobotů pro studium mechanostimulace (B3, doc. Ing. Viola Tokárová, Ph.D.)
- Lenka Vyhlídalová – Studium nanokrystalických formulací léčiv v pokročilém in vitro modelu plic (B3, Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.)

# Chemické inženýrství III

MÍSTO: BS9

## KOMISE

- doc. Ing. František Rejl, Ph.D. (předseda)
- Ing. Anna Vanluchene, Ph.D
- Ing. Libor Labík, Ph.D. (Mondi)
- Ing. Martin Hubička, Ph.D. (Lovochemie)
- Ing. Jakub Koktan, Ph.D. (Pro.Med.Cs)
- Ing. Jan Trnka

## SOUTĚŽÍCÍ

- Adam Boháč – Ověření radiometrického modelu popisující vícenásobné částečné odrazy na fázovém rozhraní (B3, doc. Ing. František Rejl Ph.D.)
- Tomáš Heimerle – Příprava a testování tenkých vrstev g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> pro mikrofluidní fotokatalytické reaktory (B3, Ing. Anna Vanluchene, Ph.D.)
- Radim Ivanovič – Studium tvorby vzorů kapek ethylsalicylátu v systémech se surfaktanty (B3, doc. Ing. Jitka Čejková, Ph.D.)
- Petr Mádlík – Testování pasivního adsorbéru NO<sub>x</sub> pro redukci emisí během studeného startu (B2, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D)
- Žofie Plchutová – Vliv provozní teploty na účinnost a střednědobou stabilitu vanadových redoxních průtočných baterií (B3, Ing. Petr Mazúr, Ph.D.)
- Adam Plšek – Vývoj mikrofluidního čipu pro studium oxidačních fotokatalytických reakcí v dvoufázovém toku (B3, Ing. Anna Vanluchene Ph.D.)
- Matěj Řeháček – Kontrola uvolňování léčiva pomocí potahu částic ve fluidním loži (B3, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)
- Marek Štěpánek – Preparation and characterization of oral dispersible films (ODFs) prepared by continuous melt procedure (B3, prof. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.)
- Vít Večerník – Vývoj automatizovaného prostředí pro testování řešiče s vnořenou hranicí a Reynoldsovým středováním: Vyhodnocení vlivu struktury výpočetní sítě (B3, Ing. Martin Isoz, Ph.D.)
- Tri Minh Vu – Vývoj a optimalizace produktu Oil Marbles (B2, Ing. Ondřej Rychecký, Ph.D.)
- Hubert Waněk – Vývoj in vitro metodiky měření pro uvolňování látek z lipozomů (B3, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D. )

# Chemické inženýrství IV

MÍSTO: B06

## KOMISE

- doc. Ing. Zdeněk Grof, Ph.D. (předseda)
- Ing. Petr Mazúr, Ph.D.
- Ing. Martin Bár (Orlen Unipetrol)
- Ing. Petr Hnídek (Synthomer)
- Ing. Samuel Uhliarik

## SOUTĚŽÍCÍ

- Bc. Vojtěch Dvořák – Enkapsulace allicinu pomocí inkluzní komplexace a rozprašovacího sušení (M1, doc. Ing. Ondřej Kašpar, Ph.D.)
- Bc. Dušan Hříbík – Modelovanie destilačného procesu C3 frakcie s dôrazom na limitné parametre (M2, doc. Ing. Miroslav Variny, Ph.D.)
- Bc. Jan Pavel Jíša – Studium vlivu elektrického pole na separaci enantiomerů pomocí iontovýmenné chirální membrány (M2, doc. Ing. Pavel Izák, Ph.D., DSc. )
- Bc. Kevin Klee – Neuronová síť jako metamodel při optimalizaci výroby bioplastů (M2, doc. Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.)
- Bc. Bára Pinčáková – Vliv sazí na CFD modely požárů (M2, Ing. Vojtěch Šálek, Ph.D.)
- Bc. Anna Reiserová – In vitro analýza inhalačních přípravků pro in situ výrobu antibiotik (M2, Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.)
- Bc. Veronika Rychlá – Stanovení hodnot kGa na sypané výplni NeXRing #0.7 v absorpční koloně (M1, Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.)
- Bc. Simona Staňová – Kontinuálna mikrofluidická syntéza lipozómov: štúdium vplyvu hydrodynamických parametrov (M2, doc. Ing. Jitka Čejková, Ph.D.)
- Bc. Ondřej Stejskal – Aplikace akustických vln v mikrofluidních zařízeních (M1, prof. Ing. Michal Přibyl, Ph.D.)
- Bc. Michal Števuliak – Štúdium redoxne mediovanej reakcie vývoja kyslíka pre zinkovo-kyslíkovú prietokovú batériu. (M1, Ing. Petr Mazúr, Ph.D.)

# Chemické inženýrství V

MÍSTO: B028

## KOMISE

- doc. Ing. Alexandr Zubov, Ph.D. (předseda)
- Ing. Vladislav Nevoral, Ph.D.
- Ing. Václav Babuka (Synthos)
- Ing. Marek Bobák, Ph.D. (MemBrain)
- Ing. Jiří Perner
- Ing. Petr Fatka

## SOUTĚŽÍCÍ

- Bc. Jiří Bohuslav – Využití vodních clon při úniku nebezpečného plynu (M1, doc. Dr. Ing. Milan Jahoda)
- Bc. Jan Cincibuch – Modelování hydrogenace a hydrogenolýzy methylbenzenů v trubkovém reaktoru se smáčeným ložem (M2, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)
- Bc. Hoang Phi Hung Do – Matematické modelování deaktivace a reaktivace katalyzátoru Pd/SSZ-13. (M1, prof. Ing. Petr Kočí Ph.D.)
- Bc. Tomáš Hanžl – Příprava a charakterizace strukturovaných povrchů pomocí laserové litografie (M1, doc. Ing. Ondřej Kašpar, Ph.D.)
- Bc. Vladimír Krucký – Imobilizace fotokatalytických deazaoflavinů pro aplikace v mikroreaktorech (M1, Ing. Anna Vanluchene, Ph.D.)
- Bc. Hana Moravčíková – Bioanalytické hodnocení nanokrystalů nintedanibu v in vitro modelu plicní fibrózy (M2, Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.)
- Bc. Jan Pchálek – Automatizace screeningu lipidických formulací léčiv a vliv míchání na jejich samoemulsifikaci (M1, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)
- Bc. Monika Poláčková – Controlled degradation of hyaluronic acid via thermal hydrolysis: Kinetic and thermodynamic aspects (M2, doc. Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.)
- Bc. Nastassia Shautsova – Stanovení hodnot k<sub>Ga</sub> na sypané výplni NeXRing 0.7 v absorpční koloně ID 15 (M1, Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.)
- Bc. Matěj Valta – Kontinuální odsolování roztoků chloridu zinečnatého pomocí modelového elektrodialyzyního systému (M1, doc. Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.)

# Chemické inženýrství VI

MÍSTO: B139

## KOMISE

- prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D. (předseda)
- Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.
- Ing. Martin Skala (NUM Solution)
- Ing. Jakub Staš
- Ing. Rostislav Huňa
- Ing. Petr Pokorný (Crytur)

## SOUTĚŽÍCÍ

- Bc. Jakub Fišner – Modelování nukleace a růstu nanočástic v mísící komoře (M1, doc. Ing. Zdeněk Grof, Ph.D.)
- Bc. Lukáš Halabuk – Návrh a optimalizácia reaktívnej absorpčnej kolóny na zachytávanie oxidu uhličitého (M2, prof. Ing. Ľudovít Jelemenský, DrSc.)
- Bc. Ivana Havlenová – Elektrochemický model a numerická implementace digitálního dvojčete Li-ion baterie (M1, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)
- Bc. Vilém Jančík – Extension of Flory's crystallization theory for polymer-diluent systems (M1, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)
- Bc. Filip Kříž – Vývoj mikrofluidní platformy pro studium bakteriálního biofilmu (M1, doc. Ing. Viola Tokárová, Ph.D.)
- Bc. Dalibor Krunť – Měření tepelného toku deskovými termočlánky v prostředí požáru (M2, doc. Dr. Ing. Milan Jahoda)
- Bc. Filip Lipowski – Stanovení hodnot kGa na sypané výplni NeXRing 1.2 systémem NH<sub>3</sub>/H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> (M1, Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.)
- Bc. Adam Opravil – Počítačová simulace dezintegrace a disoluce tablety (M1, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)
- Bc. Adam Pipiška – Vývoj meracieho zariadenia na určovanie sálavého a konvekčného prenosu tepla v priemyselných objektoch (M2, doc. Ing. František Rejl, Ph.D.)

# Chemické inženýrství VII

MÍSTO: B008

## KOMISE

- prof. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D. (předseda)
- Ing. Lucie Vobecká, Ph.D.
- Ing. Karolína Slonková
- Ing. Libor Šeda, Ph.D. (MemBrain)
- Ing. Radek Černý (Spolchemie)

## SOUTĚŽÍCÍ

- Bc. Lukáš Bednář – Vývoj 3D modelu palivového článku s pevným elektrolytem (M2, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)
- Bc. Lukáš Bukač – Studium transportních jevů v 3D tištěné hydrogelové matici (M1, doc. Ing. Ondřej Kašpar, Ph.D.)
- Bc. Romana Hupková – Design and development of microfluidic devices for tuberculosis research (M2, doc. Ing. Viola Tokárová, Ph.D.)
- Bc. Jan Korbel – Cesta k bezzbytkové recyklaci lithium-iontových baterií – kvantitativní zhodnocení 1. cyklu recyklace (M1, doc. Ing. František Rejl, Ph.D.)
- Bc. Ondřej Vaněček – Simulace požáru elektromobilu v garážovém prostoru (M1, Ing. Vojtěch Šálek, Ph.D.)
- Bc. Yuliia Viktosenko – Stanovení hodnot kGa na sypané výplni NeXRing 1.2 v absorpční koloně (M1, Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.)
- Bc. Vanesa Virsiková – Tracking the Invisible: Gas Diffusion in Polymer Melts through Optimized Simulation and Experiment (M1, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)
- Bc. Martin Weisl – Převedení vsádkové centrifugace na polovsádkovou při přípravě glukonových částic (M2, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)
- Bc. Kateřina Zedníčková – Matematický model nukleace v elektrickém poli (M1, prof. Ing. Michal Příbyl, Ph.D.)
- Bc. Lukáš Ziebiker – Vliv provozních podmínek na funkci pasivního adsorbéru NOx (M2, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

# Chemické inženýrství VIII

MÍSTO: BIII

## KOMISE

- prof. Dr. Ing. Juraj Kosek (předseda)
- Ing. Martin Isoz, Ph.D.
- Ing. Zdeněk Mühlhauser (Orlen Unipetrol)
- Ing. Milan Žalud (Arxada)
- Ing. Ondřej Horký (Membrain)
- Ing. Martin Spurný

## SOUTĚŽÍCÍ

- Bc. Jana Bursíková – Chirální separace s využitím membránových procesů (M1, doc. Ing. Pavel Izák, Ph.D., DSc.)
- Bc. Vojtěch Hampl – Příprava pevné amorfnní disperze pomocí sprejového sušení (M2, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)
- Bc. Matěj Honzík – Příprava a testování katalyzátoru pro rozklad  $\text{NH}_3$  a jeho využití v palivových článcích (M2, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)
- Bc. Jan Kršek – Microemulsion Electrolytes for Redox Flow Batteries: Membrane selection and permeability and symmetric-cell testing (M2, Ing. Petr Mazúr, Ph.D.)
- Bc. Filip Machač – Konstrukce expoziční komory pro testování inhalačních léčiv (M1, Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.)
- Bc. Jan Mazák – Dělení benzínu procesem rektifikace ve společnosti ORLEN Unipetrol (M1, Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.)
- Bc. Helena Petrářová – Desalination of Seawater for Oyster Farming using Electrodialysis (M1, Ing. Lukáš Václavík)
- Bc. Antonín Saifrt – Elektrochemické generování  $\text{H}_2\text{O}_2$  pro využití při úpravě vody (M1, Ing. Jan Haidl, Ph.D.)
- Bc. Barbora Šašková – Glukanové částice coby nosič nukleových kyselin (M1, Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D.)
- Bc. Mikuláš Vaszi – Model protiproudého praní buničiny varny Kamyr v papírně Mondi Štětí a.s. (M2, doc. Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.)



# *Vývoj mikroprůtočné cely pro heterogenní fotokatalýzu*

Matouš Barták (B3)

Školitel: Ing. Vanluchene Anna Ph.D.

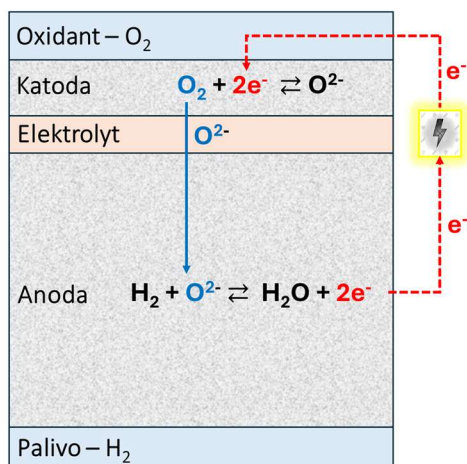
Grafitický nitrid uhlíku ( $g-C_3N_4$ ) je významný a udržitelný fotokatalyzátor, který nabízí řešení naléhavých environmentálních a energetických výzev. Jeho syntéza, pochopitelně možná mnoha způsoby, zaznamenává největší úspěch ve formě tepelné polymerizace. Jak praví klasik: „Levný džbán chová vznešený nápoj.“, a tak i v tomto případě platí, že z prekurzorů zanedbatelné ceny, jako jsou močovina, melamin či kyselina cyanurová může vzniknout přinejmenším praktický nástroj s využitím napříč obory chemického inženýrství. Díky jeho nečekaným vlastnostem, ať už jde o vrstvený povrch a  $sp^2$ -hybridizaci vedoucí k elektrické vodivosti a separaci nosičů náboje nezbytné pro efektivní fotokatalýzu; šířce zakázaného pásu umožňující využití viditelného záření, nebo téměř gargantuovskému specifickému povrchu poskytujícímu dostatek plochy pro adsorpci reaktantů zprostředkujícímu efektivní přestup hmoty. Jelikož se intenzita záření snižuje exponenciálně s tloušťkou vrstvy, cílem této práce je vývoj a výroba mikroprůtočné cely určené pro fotokatalytické experimenty s heterogenním katalyzátorem na bázi  $g-C_3N_4$  ve formě suspenze; syntéza, úprava a charakterizace dříve jmenovaného katalyzátoru a porovnání efektivity modelové reakce ve vsádce a v průtočném reaktoru.

# Vývoj 3D modelu palivového článku s pevným elektrolytem

Bc. Lukáš Bednář (M2)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Palivové články s pevným elektrolytem (SOFC) jsou zařízení, která umožňují chemickou přeměnou paliva a oxidantu produkovat elektřinu a teplo. Mezi jejich hlavní výhody patří vysoká účinnost konverze energie na elektřinu, zanedbatelná koncentrace nežádoucích vedlejších produktů a flexibilita v možných použitelných palivech (vodík, methanol, amoniak a další). V této práci byl vyvinut 3D CFD model reaktoru s planárním článkem. Model reaktoru se skládá z pěti regionů: katody, anody, pevné membrány a volného prostoru na straně anody i katody. Elektrody a pevný elektrolyt jsou popsány zónami s efektivními transportními a elektrochemickými vlastnostmi. Model zahrnuje proudění plynu, Stefanovu-Maxwellovu difuzi složek plynu k povrchu elektrod, elektrochemickou povrchovou reakci a transport iontů a elektronů skrz elektrody a membránu. Numerické řešení je získáno pomocí metody konečných objemů v prostředí OpenFOAM a je paralelizováno pro efektivní využití výpočetního výkonu. Vyvinutý model je vhodný pro zkoumání transportních omezení a jejich vlivu na funkci článku za různých provozních podmínek (provozní teplota, proudové zatížení, průtok a složení paliva).



# *Ověření radiometrického modelu popisující vícenásobné částečné odrazy na fázovém rozhraní*

Adam Boháč (B3)

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

Tato práce se zabývá experimentálním ověřením radiometrického modelu, který popisuje vícenásobné částečné odrazy vznikající primárně na optickém rozhraní KBr–vzduch v destilační aparatuře umožňující termografické sledování stékajícího kapalného filmu. Přítomnost těchto odrazů významně ovlivňuje termografické měření povrchové teploty kapalných filmů při destilaci, a proto je jejich pochopení klíčové pro přesnou interpretaci měření. Měření bylo realizováno pomocí termokamery pracující v infračervené oblasti 7,5–13  $\mu\text{m}$ , přičemž byla použita okénka z bromidu draselného umožňující průchod infračerveného záření. Odrazivost optického rozhraní byla vypočtena z Fresnelových rovnic, jejíž výsledná hodnota byla použita jako parametr radiometrického modelu. Experimentální měření bylo provedeno na aparatuře zahrnující termokameru, černé těleso, zrcátko a okénka z bromidu draselného. Naměřená data byla následně zpracována a porovnána s teoretickými hodnotami, čímž byla posouzena platnost modelu a jeho schopnost popisovat vliv vícenásobných odrazů na měření fázového rozhraní.



# *Využití vodních clon při úniku nebezpečného plynu*

Bc. Jiří Bohuslav (M1)

Školitel: doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

Práce se zabývá užitím vodních clon jako bezpečnostního zařízení v chemickém průmyslu. Vodní clony jsou standardním a dostupným prostředkem, který může při mimořádných situacích sloužit jako bariéra blokující šíření unikajícího nebezpečného plynu, či jako překážka pro šíření sálavého tepla při požáru, které může mít devastující účinky na okolní technologie v průmyslové výrobě. Jsou tedy prvkem omezujícím následky nehod na lidském zdraví, životním prostředí i na ekonomické úrovni. Důvodem pro rozhodnutí o jejich nenasazení při mimořádné situaci však může být příliš velký rozsah úniku či možnost vzniku elektrostatického náboje, který dokáže iniciovat požár oblaku uniklé hořlavé látky. Problémem je však také složitá předpověď chování unikajícího plynu interagujícího s vodními clonami. V rámci práce bude zkoumáno, jak využít možnosti CFD (Computational Fluid Dynamics) modelování k předpovědi účinku vodní clony při úniku amoniaku.

# *Kopermeace: vliv účinných látek na průchodnost lipozomálních membrán*

Iva Brhelová (B2)

Školitel: Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D.

S pokrokem medicíny a stárnutím populace se stalo běžné užívat více různých léků současně. Je důležité brát v potaz, zda se účinné látky neovlivňují, a jestli navzájem nemění svou prostupnost biologickými membránami, aby v důsledku nedocházelo k předávkování pacientů. Jako dobrý modelový systém pro studium biologických membrán slouží lipozomy, duté nanočástice se stěnou z fosfolipidové dvojvrstvy, které nám umožňují sledovat permeaci účinných látek bez dalších biochemických faktorů. Naším cílem je zkoumat běžně dostupné účinné látky s různou rozpustností a permeačními vlastnostmi a měřit, jak jejich přítomnost ovlivňuje vylučování účinné látky z lipozomů, v tomto případě fluorescenční látky 5(6)-karboxyfluoresceinu. Z toho hodláme určit, které látky permeaci podporují a které ji naopak limitují. Důležitým bodem, na který se chceme soustředit, je fázový přechod membrány, kde permeace rapidně stoupá.

# *Studium transportních jevů v 3D tištěné hydrogelové matici*

Bc. Bukač Lukáš (M1)

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

Kontrolované uvolňování bioaktivních látek je klíčové pro jejich terapeutické využití. Allicin, látka fungující jako přirozená obrana česneku, je známý svými silnými antimikrobiálními účinky, avšak zároveň se rychle rozkládá. Pomocí imobilizace prekurzorů allicinu v hydrogelu lze dosáhnout in-situ syntézy přímo v místě účinku. Pro dosažení aplikací na míru a lepší kontrolu nad procesem výroby nosičů prekurzorů se využívá 3D biotisk. Takto vytvořené filmy jsou před degradací ochráněny lyofilizací. Tento přístup nabízí slibnou možnost, jak využít antimikrobiální vlastnosti allicinu s přesností potřebnou pro lékařské aplikace. Tato studie se zaměřuje na zkoumání transportních a reakčních podmínek v hydrogelu s cílem stanovit parametry, které budou následně využity pro tvorbu 3D simulací celého systému. Hlavní zkoumané parametry jsou efektivní difuzní koeficienty allicinu a jeho prekurzorů, jak v neošetřených, tak v lyofilizovaných a následně hydratovaných filmech. K reakčně-difusnímu modelování bude využit program COMSOL. Pomocí těchto simulací bude možné efektivněji a ekonomičtěji navrhovat 3D struktury určené pro biotisk.

# *Vývoj in situ optické měřicí metody v míchaném laboratorním bioreaktoru*

Viktor Bursík (B3)

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

V buněčném inženýrství je správné míchání kultivačního média klíčové pro zajištění homogenního prostředí a optimálního růstu živočišných buněk. Nedostatečné promíchávání může vést k tvorbě buněčných agregátů, naopak přílišné míchání povede ke zvýšení mortality. Pro usnadnění a snížení nákladů na výzkum se místo vlastní buněčné linie často používají agregáty z polymethylmetakrylátu (PMMA). V praxi se k charakterizaci velikosti PMMA agregátů využívá metoda statického rozptylu světla (SLS), která je však obtížně proveditelná při práci s reaktory menších objemů, vzhledem k omezenému množství vzorku. V rámci této práce byla vyvíjena alternativní metoda umožňující měření velikosti agregátů pod optickým mikroskopem. Tento přístup je šetrnější ke spotřebě vzorku a umožňuje on-line analýzu. Suspenze PMMA agregátů je čerpána stříkačkovou pumpou do 3D vtištěné mikrofluidní cely vlastní výroby a pro měření velikosti snímaných agregátů byl implementován automaticky vyhodnocovací algoritmus v softwaru ImageJ. Klíčovým výsledkem práce je dostupná optická měřicí metoda schopna charakterizace hydrodynamického stresu uvnitř míchaného reaktoru ambr250® v závislosti na operačních podmínkách. Takto vyvinutá metoda umožní snadno charakterizovat používaný bioreaktor v závislosti na geometrii a typu míchadla, zároveň je snadno přenositelná a mohla by být využita pro vyhodnocování ostatních částicových systémů pozorovatelných pod optickým mikroskopem.

# *Chirální separace s využitím membránových procesů*

Bc. Jana Bursíková (M1)

Školitel: doc. Ing. Pavel Izák, Ph.D., DSc.

V současné době ve farmaceutickém průmyslu roste poptávka po enantiomerně čistých léčivech. Jednotlivé enantiomery často vykazují rozdílnou biochemickou aktivitu, což zásadně ovlivňuje účinnost léčiv i riziko jejich nežádoucích účinků. K výrobě chirálně čistých látek lze využívat asymetrickou syntézu, nebo různé techniky pro separaci racemických směsí. Tato práce se zabývá možností využití komerčních porézních membrán pro enantioselektivní separace založené na preferenční komplexaci chirálního selektoru s jedním z enantiomerů analytu. Modelovým analytem byl *N*-Boc-L,D-tryptofan, jehož L-forma preferenčně vytváří nekovalentní inkluzní komplexy s chirálním selektorem, sulfobutylether- $\beta$ -cyklodextrinem. Výrazný rozdíl ve velikosti tohoto komplexu a volného enantiomeru umožňuje jejich separaci pomocí filtrace přes porézní membránu Ultracel® 1 kDa. Práce se zaměřuje na optimalizaci parametrů ovlivňujících účinnost přímé filtrace kolmo k membráně (dead-end režim), zejména složení rozpouštědla, molárního poměru selektoru vůči analytu, provozního tlaku a způsobu provedení separace v jednotkovém nebo kaskádovém uspořádání. Cílem práce bylo posoudit, zda komerční porézní membrány mohou představovat vhodný základ pro enantioselektivní separace aminokyselinových derivátů založené na rozdílné velikosti komplexu a volného analytu.

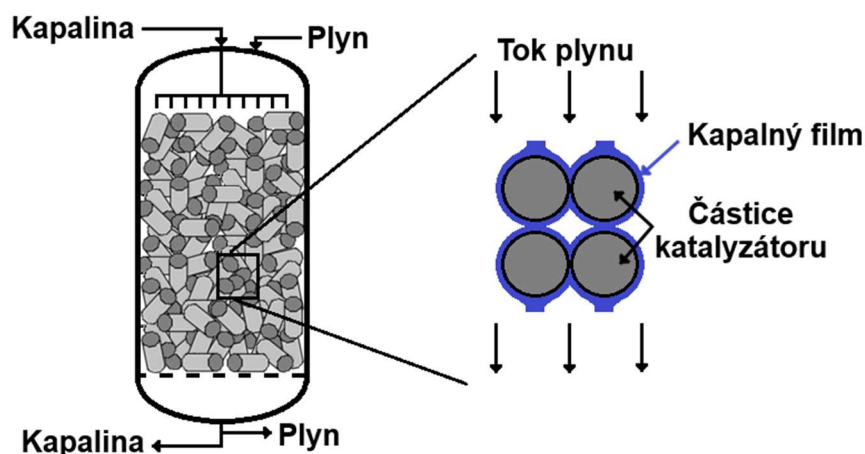


# Modelování hydrogenace a hydrogenolýzy methylbenzenů v trubkovém reaktoru se smáčeným ložem

Bc. Jan Cincibuch (M2)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Práce se zabývá vývojem matematického modelu katalytického trubkového reaktoru se smáčeným ložem, ve kterém probíhá hydrogenace a hydrogenolýza kapalných methylbenzenů. Cílem je vytvořit model reaktoru v souladu s experimentálními výsledky, zejména teplotními profily a naměřenými konverzemi. Model zahrnuje dvě následné reakce – hydrogenaci modelového aromatického uhlovodíku na cyklický nasycený uhlovodík a následné štěpení na modelový alifatický uhlovodík, přičemž druhá reakce probíhá až za zvýšené teploty. Na základě experimentálních dat byly vyhodnoceny kinetické parametry reakcí, které umožňují simulacím reprodukovat naměřené konverze při různých teplotních profilech. Materiálové a entalpické bilance pro osově souměrný trubkový reaktor se sdílením tepla přes plášť jsou řešeny metodou konečných objemů v C++ knihovně OpenFOAM. Vyvinutý model umožňuje simulovat reálné chování reaktoru a analyzovat vliv provozních parametrů na konverzi a selektivitu. Práce tak ilustruje, jak kombinací experimentálních dat a simulací lze vyvíjet modely využitelné pro lepší porozumění a optimalizaci průmyslových katalytických reaktorů.

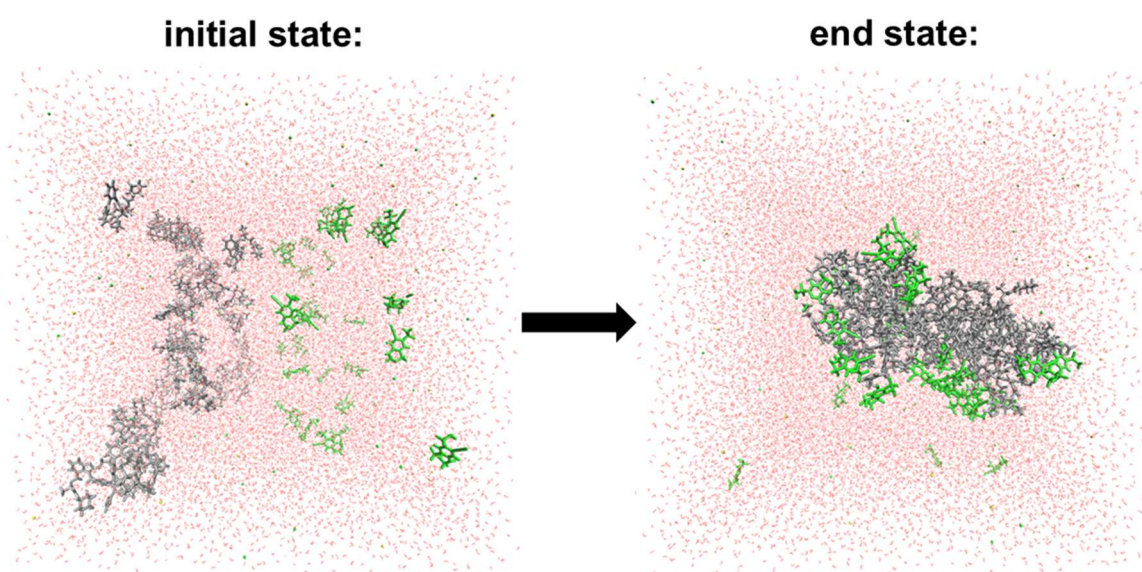


# *Molecular dynamics observations of binary interactions of small molecules in aqueous solutions*

Bc. Milana Dejaková (M1)

Školitel: Ing. Terezie Císařová

When a medication is taken, the overall behaviour and bioavailability inside the body are determined by its pharmacological and physicochemical properties. Pharmacological characteristics, such as the mechanism of action and pharmacokinetics of the formulation, are relatively well understood. On the other hand, the physicochemical characteristics of individual compounds remain less explored due to the complexity of experimental measurements. Mentioned properties, including permeability and hydrogen-bond donors and acceptors, are typically examined individually for each active pharmaceutical ingredient. However, in reality, drugs are often administered in combination, which raises questions about their mutual interactions. Do these molecules form clusters that slow their absorption in the body? Are there any interactions that enhance each other's transport? As these processes are difficult to study experimentally, this work employs molecular dynamics simulations to answer these questions. The aim is to study binary interactions between commonly prescribed drugs to explore their behaviour.

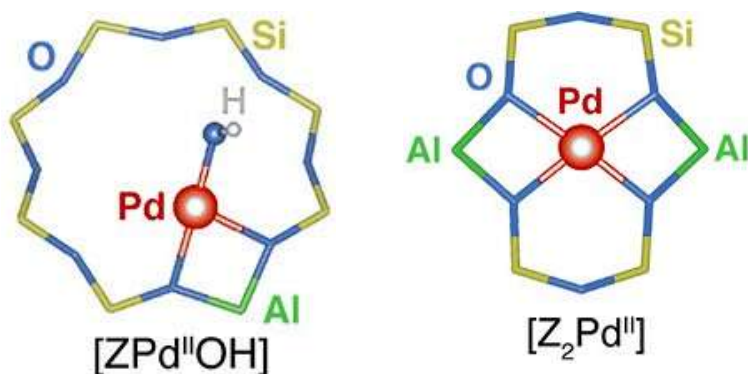


# Matematické modelování deaktivace a reaktivace katalyzátoru Pd/SSZ-13

Bc. Hoang Phi Hung Do (M1)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Navzdory růstu elektromobility jsou dieselové motory stále nejvíce zastoupeným typem pohonu a v případě nákladních automobilů tomu tak bude i v delším časovém horizontu. Spalovací motory jsou bohužel zdrojem emisí škodlivých oxidů dusíku ( $\text{NO}_x$ ), přičemž největším problémem je omezení emisí během studeného startu motoru, kdy ještě nefunguje systém pro selektivní katalytickou redukci  $\text{NO}_x$  (SCR). To lze řešit pomocí pasivního adsorbéru  $\text{NO}_x$  (PNA), například typu Pd/SSZ-13, který byl zkoumán v rámci této práce. Při nižších teplotách (pod  $200^\circ\text{C}$ ) se oxidy dusíku vážou chemisorpcí na aktivní  $\text{Pd}^{2+}$  centra a uvolňují se až během vyšších teplot, kdy už je funkční SCR systém pro redukci  $\text{NO}_x$ . Vlivem redukčních složek v plynu (např. CO) však za nižších teplot dochází k přeměně  $\text{Pd}^{2+}$  na  $\text{Pd}^0$ , migraci atomů Pd ze struktury katalyzátoru a shlukování do větších nanočástic. Tento jev způsobuje snížení počtu aktivních center pro adsorpci  $\text{NO}_x$ . Tuto deaktivaci lze částečně zvrátit za vyšších teplot, kdy dochází k oxidaci a rozkladu nanočástic a ukotvení  $\text{Pd}^{2+}$  zpět do struktury katalyzátoru. V rámci této práce byl vytvořen reakčně-kinetický model, který umožňuje předpovídat průběh adsorpce a desorpce oxidů dusíku a zároveň i proces deaktivace a reaktivace katalyzátoru v závislosti na provozních podmínkách.



# Optimization of a Zinc–Iodine Hybrid Flow Battery: Influence of Current Density and Membrane Characteristics

Martin Drnec (B3)

Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

As the demand for carbon-free energy generation grows, a stable energy storage system is required to compensate for the intermittent nature of renewable energy sources. In recent years, flow battery technology has emerged as a promising solution to this challenge. The zinc–iodine hybrid flow battery (ZIHFB) is a variant of flow batteries with strong potential due to its high theoretical capacity and good stability when operated within suitable conditions. This work builds on and expands previous ZIHFB optimizations, specifically by investigating the effect of different charging/discharging current densities and their influence on the distribution of zinc electrodeposition on the negative electrode. Additionally, the behavior of cation exchange membranes was examined, focusing on the permeation of zinc, iodide, and polyiodide ions. Understanding the permeation processes may be the key to overcoming current technological limitations.

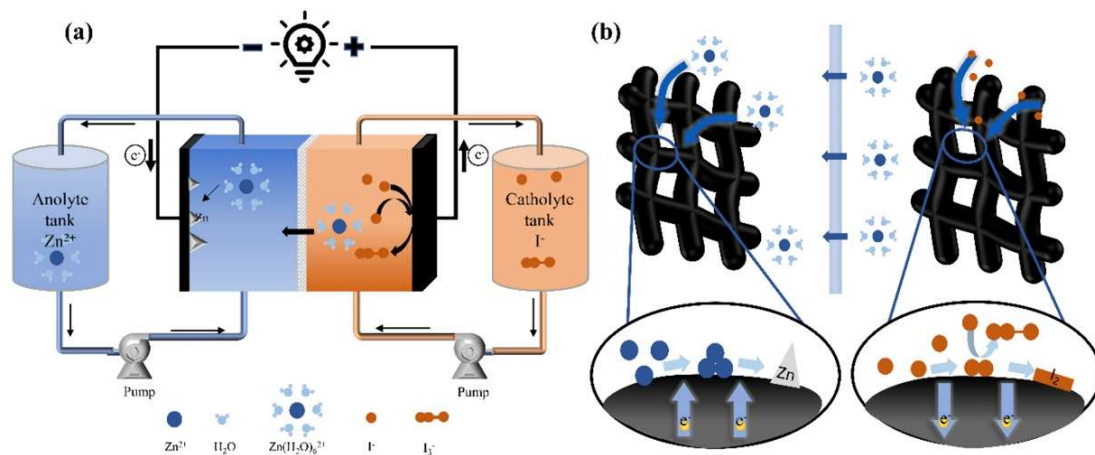


Figure adapted from: Fan, D., et al., *Progress and challenges of zinc-iodine flow batteries: From energy storage mechanism to key components*. Journal of Energy Storage, 2024. **92**: p. 112215.

# *Population balance modelling of wet grinding processes for the production of pharmaceutical nanocrystals*

Mathis Dupire (M2)

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

Nanocrystals offer new perspective for API formulation thanks to their sub-micron size and permit to decrease waste of API, which is due to a poor dissolution of it. The goal of this study is to model the particle size distribution of nanocrystals which are being milled through a wet milling process. To model this distribution, the breakage function  $B$  and the breakage rate function  $S$  are modelled with generic equation and adapted with experimental data. An ideal mixing in both the milling chamber and the tank, no particle agglomeration and size independent particle residence time are assumed for the model. Furthermore, the breakage function rate  $S$  is also calculated with the data to be compared with the generic equation and determined the relative error between those different methods. In order to calculate  $S$ , it is firstly determined for the biggest size class which dies into smaller size class. Then, this process is repeated until the size class studied is not entirely dead through a certain amount of time.

# *Enkapsulace allicinu pomocí inkluzní komplexace a rozprašovacího sušení*

Bc. Vojtěch Dvořák (M1)

Školitel: doc. Ing. Ondřej Kašpar Ph.D.

V posledních letech si bakterie stále častěji vytvářejí rezistenci vůči běžně používaným antibiotikům. Mezi hlavní příčiny patří například nízká adherence pacientů k předepsané léčbě či akumulace antibiotik v životním prostředí. Bakterie jsou tak vystavovány těmto látkám v nízkých koncentracích, což jim umožňuje vybudování rezistence. Proto je potřeba obrátit pozornost na alternativní formy antibiotik. Jednou takovou je například použití chemicky nestálých látek, protože bakterie nedostanou dostatečný čas k vybudování rezistence. S použitím nestálých látek ale přichází problém v dlouhodobé stabilitě léčiv a v jejich efektivním dopravování na cílová místa v těle. Jednou z takových látek je thiosulfínát allicin, přirozeně se vyskytující v česneku, kterým se zabývá tato práce. Allicin vykazuje výrazné antimikrobiální účinky a slouží jako obranný mechanismus česneku proti škůdcům. Problém s allicinem spočívá v jeho extrémní reaktivitě, v krevním oběhu by rychle zreagoval a ztratil své antibiotické vlastnosti během několika minut. Proto se tento výzkum zabýval lékovou formou, která by se dala lokálně doručit, a to přesněji do plic. Cílem bylo vytvořit antibiotické částice ve kterých je pomocí inkluzní komplexace a rozprašovacího sušení enkapsulován.

# *Design and Fabrication of a Microfluidic Flow Cell with Passive Mixers*

Bc. Monika Felcmanová (M1)

Školitel: Ing. Anna Vanluchene, Ph.D.

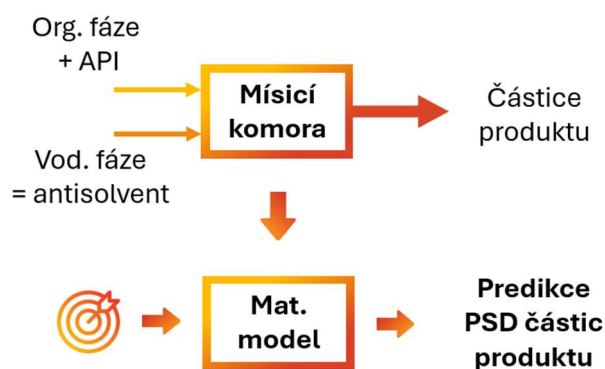
Microfluidic reactors allow precise control of reactions at the microscale. Their high surface-to-volume ratio enhances heat and mass transfer, reducing reaction times and reagent use. They also align with green chemistry principles by supporting safer, more efficient continuous processes with lower environmental impact. In this work, a PDMS microreactor with integrated passive herringbone mixers was developed. In small channels, flow is laminar and mixing occurs only by diffusion. Herringbone grooves create chaotic advection, overcoming laminar flow limitations at low Reynolds numbers. The chip was fabricated via soft maskless lithography using SU-8 negative photoresist and direct laser patterning, allowing fast design iteration without traditional photomasks. A two-layer process was used to precisely reproduce the channel geometry, creating a platform suitable for photochemical applications requiring uniform light exposure. Such systems can support more sustainable synthesis in green chemistry and pharmaceutical production.

# Modelování nukleace a růstu nanočástic v mísicí komoře

Bc. Jakub Fišner (B1)

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

Až 40% potenciálně aplikovatelných léčiv se špatně rozpouští ve fyziologickém roztoku, což představuje komplikaci pro současný farmaceutický výzkum. V rámci výzkumu reformulace aktivních farmaceutických látek do výhodné formy nanočástic je kontrola jejich distribuce velikostí jedním z klíčových kroků. Tento krok může být realizován pomocí kontinuální kapalně antisolventní krystalizace v mikrofluidním mísiči. Tato krystalizace je výrazně ovlivněna dynamikou mísení, lokálním stupněm přesycení i kinetickými a materiálovými vlastnostmi léčiva. Takto rozsáhlý parametrický prostor činí experimentální optimalizaci náročnou a nákladnou. Cílem práce je vytvořit a validovat model kontinuálního mikrofluidního mísiče, který umožní předpovědět distribuci velikostí nanočástic léčiva. Model kombinuje populační bilanční rovnice a mocninnou kinetiku nukleace a růstu. Pomocí numerických simulací a porovnáním s experimentálními daty budou zkoumány vlivy geometrie mísiče, poměru průtoků a koncentrace složek na výslednou velikostní distribuci nanočástic. Prvotní výsledky obsahují parametrickou studii mikrofluidního mísiče a představují krok směrem k návrhu prediktivního modelu kontinuálních zařízení, který umožní vývoj špatně rozpustných léčiv bez nutnosti rozsáhlého experimentálního testování.





# *Návrh a optimalizácia reaktívnej absorpčnej kolóny na zachytávanie oxidu uhličitého*

Bc. Lukáš Halabuk (M2, Slovenská technická univerzita v Bratislave)

Školiteľ: prof. Ing. Ľudovít Jelemenský, DrSc.

Absorpcia oxidu uhličitého ( $\text{CO}_2$ ) z plyných prúdov do kvapalných rozpúšťadiel je široko skúmaným procesom prestupu látky medzi plynom a kvapalinou. Jednou z bežne používaných metód je použitie alkalických roztokov ako je hydroxid sodný ( $\text{NaOH}$ ), ktorý reaguje s  $\text{CO}_2$  za vzniku uhličitanu sodného ( $\text{Na}_2\text{CO}_3$ ) a hydrogén uhličitanu sodného ( $\text{NaHCO}_3$ ). Prítomnosť chemickej reakcie v systéme výrazne zvyšuje rýchlosť prestupu látky. V sprejových kolónach sa kvapalina privádza vo forme kvapiek, čím sa vytvára veľký medzifázový povrch. Kvapky pôsobením gravitácie padajú, zatiaľ čo plyn prúdi z dna kolóny smerom nahor, čím vzniká protiprúdny kontakt. Kvapalina bola dispergovaná z hornej časti kolóny vo forme kvapiek, ktoré reagovali so stúpajúcim plynom bohatým na  $\text{CO}_2$ . Bol zostavený matematický model v prostredí MATLAB, ktorý zahŕňa dynamiku kvapiek, transportné javy, kinetiku chemických reakcií a energetickú bilanciu systému. Reakcia  $\text{CO}_2$  s  $\text{NaOH}$  bola modelovaná ako rýchla, difúziou obmedzená reakcia vedúca k tvorbe uhličitanu a hydrogénuhličitanu sodného. Model umožnil simuláciu zmien veľkosti kvapiek, odparovania a teplotných efektov počas pádu kvapiek kolónou. Na základe numerických výsledkov bola realizovaná optimalizácia prevádzkových a konštrukčných parametrov s cieľom maximalizovať účinnosť absorpcie  $\text{CO}_2$  a premeny  $\text{NaOH}$ . Vyvinutý model poskytuje spoľahlivý nástroj pre návrh, optimalizáciu a scale-up sprejových kolón určených na procesy zachytávania  $\text{CO}_2$ .

# *Příprava pevné amorfnní disperze pomocí sprejového sušení*

Bc. Vojtěch Hampl (M2)

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

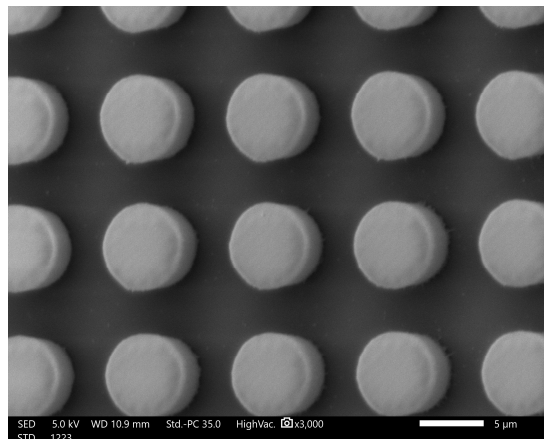
Hlavním neduhem perorálně podávaných léčiv je jejich nízká biologická dostupnost, způsobená nízkou rozpustností a permeabilitou. Ty jsou pro většinu nových látek a látek s potenciálním léčivým účinkem velmi nízké, což má za následek komplikace s jejich vývojem a testováním, nebo jejich úplné zavrnutí. Tento problém se často řeší syntézou proléčiv, nebo zvýšením množství léčiva a excipientů, což vede ke zvýšení nákladů, nebo u konkrétní látky není tento postup vůbec možný. Možným řešením, kterým se ve své práci zabývám, je příprava léčiva ve formě pevné amorfnní disperze. Amorfnní stav je charakterizovaný absencí zřetelného intermolekulárního uspořádání s nízkou termodynamickou stabilitou, což snižuje energii spojenou s rozpouštěním, jelikož nemusí docházet k rozkladu krystalické struktury. V pevné amorfnní disperzi navíc dochází k společnému rozpouštění léčiva a polymerního nosiče, což vede k zvýšení smáčivosti a dispergovatelnosti výsledné směsi oproti krystalickému stavu. Cílem práce je příprava pevné amorfnní disperze pomocí sprejového sušení a následná studie vlastností připravené směsi a parametrů, které celý proces ovlivňují.

# *Příprava a charakterizace strukturovaných povrchů pomocí laserové litografie*

Bc. Tomáš Hanžl (M1)

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

V přírodě se nachází řada povrchů, které díky své mikro- až nanostruktuře vykazují unikátní fyzikální a biologické vlastnosti. Některé z těchto povrchů jsou schopny ovlivňovat adhezi a morfologii bakterií, což se stává inspirací pro vývoj funkčních biomimetických materiálů. V této práci se zaměřuji na přípravu mikrostrukturovaných povrchů, které napodobují vybrané přírodní struktury, a to pomocí bezmaskové laserové litografie. Prvním krokem je optimalizace parametrů procesu, zejména intenzity osvětlení fotorezistu a geometrie vznikajících struktur, s cílem dosáhnout co nejjemnějšího a reprodukovatelného povrchového reliéfu. Pro tento účel byly připraveny struktury ve tvaru kruhových pilířků, u nichž byly systematicky měněny rozměry i expoziční parametry. Kvalita připravených struktur byla vyhodnocována pomocí rastrovací elektronové mikroskopie (SEM). V následujících krocích bude cílem rozšířit přípravu o složitější typy struktur inspirované přírodními povrchy a studovat chování bakterií na těchto površích.



Snímek ze SEM: struktura 5 μm pilířků

# *Elektrochemický model a numerická implementace digitálního dvojčete Li-ion baterie*

Bc. Ivana Havlenová (M1)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Pro spolehlivou predikci životnosti a optimalizaci provozu Li-ion baterií je nezbytné detailní porozumění transportním a reakčním dějům v elektrolytu. Zatímco zjednodušené modely typu ekvivalentních obvodů mohou selhávat při popisu lokálních jevů, modely založené na fyzikálně-chemickém popisu umožňují zachycení interní dynamiky článku v širokém rozmezí podmínek provozu. Tato práce prezentuje numerickou implementaci jednorozměrného elektrochemického modelu Li-ion baterie založeného na systému rovnic Poisson–Nernst–Planck (PNP), které popisují elektrodifuzi iontů v elektrolytu. Model je implementován v MATLABu a využívá metodu konečných objemů (FVM). Mimo jiné model popisuje časový vývoj koncentrací iontů  $\text{Li}^+$  a  $\text{PF}_6^-$  vlivem difuze a migrace v elektrickém poli, přičemž potenciál je určen řešením Poissonovy rovnice. Prezentované výsledky ukazují časový vývoj koncentračních a potenciálových profilů. Vyvinutý model představuje základ pro budoucí digitální dvojče článku, které bude dále rozšířeno o děje v porézních elektrodách, degradační děje, utváření SEI (solid-electrolyte interface) vrstvy na anodě a limitovanou interkalaci lithia za nízkých teplot.

# *Preparation and Testing of Graphitic Carbon Nitride Thin Films for Microfluidic Photocatalytic Reactors*

Tomáš Heimerle (B3)

Školitel: Ing. Anna Vanluchene, Ph.D.

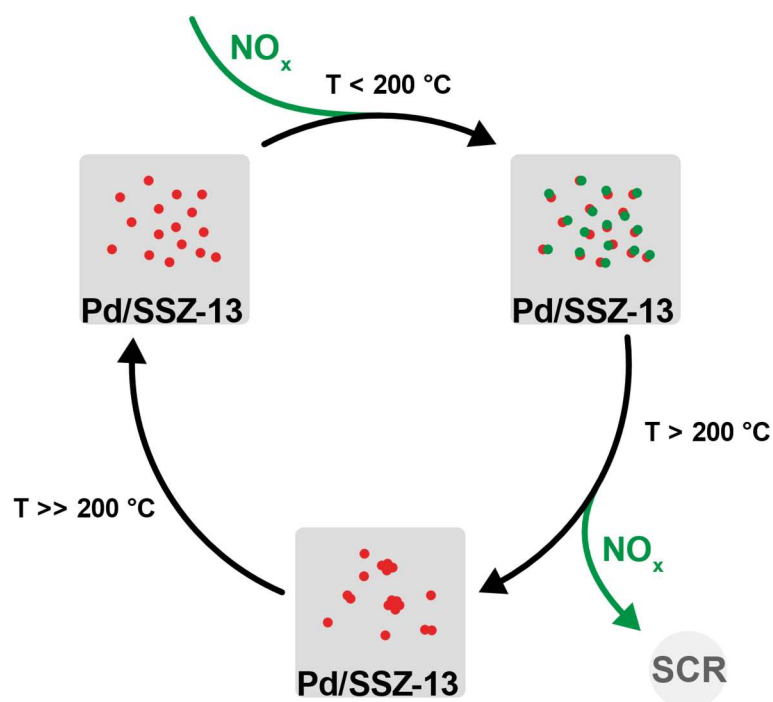
Graphitic carbon nitride (g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>) has emerged as a widely studied photocatalyst due to its low cost, stability, and visible-light activity. It is easily synthesized via simple thermal condensation of nitrogen-rich precursors like urea or melamine. However, this produces a photocatalyst as a fine powder, which presents two major limitations. First, in slurry-type photoreactor the suspended particles scatter and absorb light inefficiently, leading to poor light utilisation and reduced photocatalytic performance. Second, the resulting fine powder is difficult to recover from water, making large-scale or continuous operations impractical. To solve this, significant research is focused on immobilization, where g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> is anchored onto stable, macroscopic supports like polymer foams, ceramic membranes, or glass. This creates a fixed, reusable catalyst system capable of continuously treating flowing water without requiring post-treatment filtration. This technology is increasingly important to address the rising complex problem of organic pollutants in wastewater. In this work, we focus on the synthesis of g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> and compare several immobilization strategies, evaluating their efficiency and stability.

# Deactivation and reactivation of Pd centers in SSZ-13 zeolite for NO<sub>x</sub> adsorption

Bc. Anežka Hendrychová (M1)

Supervisor: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Reducing emissions from combustion engines is essential for protecting air quality and human health. Modern engines therefore employ catalytic systems that convert toxic gases such as CO, hydrocarbons, and NO<sub>x</sub> into harmless products (CO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, and H<sub>2</sub>O). In diesel engines, NO<sub>x</sub> removal via the selective catalytic reduction (SCR) process is particularly challenging at low exhaust temperatures. SCR systems are highly effective only above 200 °C and remain inactive during cold starts. To reduce NO<sub>x</sub> emissions during this period, a passive NO<sub>x</sub> adsorber (PNA) can be installed upstream of the SCR catalyst. The PNA captures NO<sub>x</sub> at low temperatures and subsequently releases it as the SCR system warms up, enabling efficient conversion. This study investigates Pd/SSZ-13 zeolites as PNA materials. Different deactivation and reactivation conditions are tested to evaluate their effect on the NO<sub>x</sub> storage capacity. Particular attention is paid to CO-induced migration of Pd atoms from the zeolite structure into larger nanoparticles, and their redispersion at higher operating temperatures. Adsorption performance is assessed by measuring NO<sub>x</sub> concentration profiles during isothermal adsorption and temperature-programmed desorption, providing insights into how operating parameters influence the PNA performance.



# *Příprava a testování katalyzátoru pro rozklad $\text{NH}_3$ a jeho využití v palivových článcích*

Bc. Matěj Honzík (M2)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí Ph.D.

Rozklad amoniaku je zásadním krokem při cyklu, jenž slouží k akumulaci přebytečné elektrické energie během špičkových výkonů obnovitelných zdrojů a její zpětné přeměně na elektřinu v případě převisu poptávky. Přebytečná energie může být použita k syntéze amoniaku, který se dá na rozdíl od vodíku dobře dlouhodobě skladovat i transportovat v kapalném stavu. Tato práce se zaměřuje na přípravu a testování katalyzátoru pro rozklad amoniaku, přičemž vzniklý vodík lze využít v palivových článcích.

Katalyzátor byl připraven kapilární impregnací roztoku  $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$  do porézního nosiče  $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ . Po usušení byl katalyzátor kalcinován, slisován, rozmělněn a byla vybrána frakce 400–600  $\mu\text{m}$ , která zajišťuje přijatelnou tlakovou ztrátu v trubkovém průtočném laboratorním reaktoru. Měření rozkladu amoniaku probíhalo formou teplotních ramp 100–500  $^\circ\text{C}$ , kdy byl katalyzátor testován čerstvě připravený, aktivovaný i deaktivovaný, a to při různých složeních vstupní směsi. Nad 400  $^\circ\text{C}$  byla dosažena vysoká konverze, která zůstávala stabilní i po delší době provozu. Následně byl katalyzátor nanesen do tenké vrstvy ve strukturovaném monolitickém reaktoru, který je vhodný pro vyšší průtoky reakční směsi. Struktura a rovnoměrnost nanesené vrstvy byla ověřena pomocí snímků z elektronové mikroskopie (SEM).

# *Modelovanie destilačného procesu C<sub>3</sub> frakcie s dôrazom na limitné parametre*

Bc. Dušan Hríbik (M2, Slovenská technická univerzita v Bratislave)

Školiteľ: doc. Ing. Miroslav Variny, PhD.

Propylén je kľúčovou surovinou petrochemického priemyslu pre výrobu polypropylénu, ktorého rastúca produkcia spôsobuje preťaženie jednotiek na separáciu C<sub>3</sub> frakcie. Tieto kolóny patria medzi energeticky najnáročnejšie procesy, keďže blízkosť teplôt varu propánu a propylénu vyžaduje vysoký reflux a veľký počet etáží. Využívajú sa dve konfigurácie. Vysokotlaková kolóna s kondenzáciou chladiacej vody a nízkotlaková s tepelným čerpadlom. Energetická náročnosť však zostáva vysoká, preto sa skúmajú hybridné systémy spájajúce destiláciu a membránovú separáciu. Štúdia analyzuje integráciu membránovej jednotky a konfigurácie s dvoma nástrekmi do existujúcej C<sub>3</sub> kolóny s cieľom zvýšiť kapacitu a znížiť spotrebu energie bez veľkých investícií. Modelovanie v Aspen Plus a MATLAB ukázalo, že membránová jednotka znižuje refluxný pomer, zlepšuje energetickú bilanciu a odstraňuje prevádzkové obmedzenia. Hybridný prístup tak predstavuje perspektívne riešenie modernizácie separácie propánu a propylénu.

Táto práca bola vypracovaná s podporou grantu Agentúry na podporu výskumu a vývoja č. VV-MVP 24-0365.



# *Design and development of microfluidic devices for tuberculosis research*

Bc. Romana Hupková (M2)

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

Tuberculosis (TB) remains one of the world's most serious infectious diseases, with millions of new infections each year and increasing resistance to available antibiotics. The emergence of antibiotic-resistant strains underscores the need for new research tools that allow detailed observation of mycobacterial behaviour under controlled conditions.

This work focuses on the design and testing of microfluidic chips intended for single-cell monitoring of *Mycobacterium smegmatis* (MSMG), a non-pathogenic model organism physiologically similar to *M. tuberculosis*. Several geometric layouts were fabricated, including straight microchannels and rectifier structures designed to improve bacterial trapping efficiency. MSMG cultures were successfully introduced into the devices, and initial tests showed that larger channel dimensions captured single cells only sporadically, confirming the necessity of design optimization.

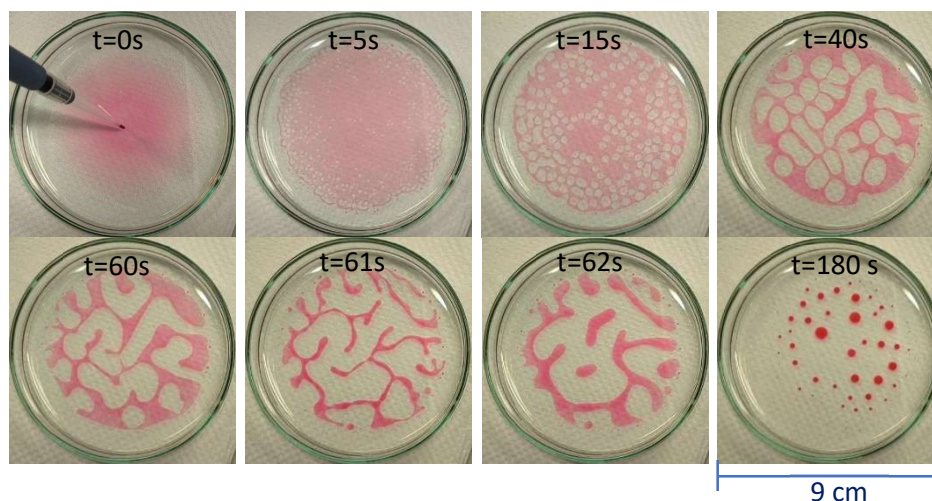
In future work, chip geometries will be refined to enable reliable single-cell isolation and long-term observation. Integration with a pump-controlled flow system will allow precise control of medium flow, reagent delivery, and creation of a stable microenvironment for extended live-cell studies, supporting more effective TB-related research.

# Studium tvorby vzorů kapek ethylsalicylátu v systémech se surfaktanty

Radim Ivanovič (B3)

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

Tato práce se zabývá studiem chování kapek ethylsalicylátu (s barvivem či bez) na hladině vodného roztoku dekanoátu sodného v Petriho misce. Nejprve kapka ethylsalicylátu tvoří tenkou vrstvu, ve které postupně vznikají kruhové mezery. Po určité době přechází systém do fáze pulzování. Jednotlivé mezery se spojí ve větší oválné. Ethylsalicylát tvoří chapadlovité útvary. Tyto útvary se poté kaskádovitě deformují. Po těchto deformacích se útvary postupně transformují do stabilních kapek. a systém vchází do fáze klidové. Prvotní experimenty ukazují, že rychlost, jakou ethylsalicylát dopadá na hladinu dekanoátu, průměr Petriho misky, výška vrstvy dekanoátu, použité barvivo a pH roztoku ovlivňují chování systému. Jedná se o základní výzkum dosud nepopsaného excitabilního systému. Nejprve je potřeba navrhnout experimentální uspořádání a postup provádění experimentu tak, aby výsledky byly reprodukovatelné a minimalizovaly vliv lidské chyby. Součástí práce je vývoj automatizovaného systému pro dávkování kapek, přičemž některé jeho komponenty byly připraveny pomocí 3D tisku. Zásadní je i snímání a vyhodnocování experimentů. V rámci této práce je využívána stínografie (schlieren metoda) zprostředkovaná optickou aparaturou vlastní výroby, též obrazová analýza pomocí knihovny openCV v Pythonu a měření lokálního povrchového napětí kapilárami. Cílem práce je identifikovat klíčové faktory a mechanismy vedoucí k pozorovanému dynamickému chování systému.



# *Extension of Flory's crystallization theory for polymer-diluent systems*

Bc. Vilém Jančík (M1)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

The pursuit of predictive models for polymer-diluent equilibrium estimation inevitably leads to a theoretical description of various effects in these systems. In the case of polymer crystallinity, a correction parameter fitted to experimental data is commonly used. In this work, a more rigorous approach based on Flory's crystallization theory was applied. This theory originally described only the temperature dependency of crystallinity; thus, we expanded it to account for diluent effects. These effects eventually result in a decrease in polymer crystallinity induced by the diluent. Particular attention was given to ensuring the universal applicability of the proposed model by formulating it in terms of activity coefficients, which can be utilized by various thermodynamic models. The validity of our model was assessed by comparison with experimental data, namely TD-NMR measurements obtained within our research group.

# *Studium vlivu elektrického pole na separaci enantiomerů pomocí iontovýměnné chirální membrány*

Bc. Jan Pavel Jíša (M2)

Školitel: doc. Ing. Pavel Izák, Ph.D., DSc.

V moderním světě, kde celosvětová populace roste každým dnem a spotřeba farmaceutik neustále stoupá, je důležitější než kdy dříve vyvíjet účinné metody pro výrobu enantiomerně čistých látek. Enantiomery jsou molekuly, které jsou navzájem zrcadlovými obrazy. Jejich separace je velmi obtížná, protože mají téměř shodné fyzikální i chemické vlastnosti. K jejich oddělení je nutné vytvořit chirální prostředí, které umožní různé stereoselektivní interakce s chirálními selektory. Příkladem může být chirální chromatografie nebo nově vznikající enantioselektivní membránové procesy. V obou případech mají enantiomery odlišnou afinitu k chirálním rozpoznávacím místům na chromatografické koloně nebo v membráně, což vede k jejich separaci v důsledku rozdílných retenčních časů v koloně nebo rozdílných rychlostí transportu přes membránu. Naše studie zkoumá vliv elektrického pole na transport enantiomerů přes chirální iontovýměnnou membránu. Transport enantiomerů řízený koncentračním gradientem přes membránu je popsán modelem zpomaleného transportu, který vede k nasycení chirálních vazebných míst a tím k poklesu selektivity v čase. Proto je elektrické pole nastavováno tak, aby buď podporovalo, nebo naopak brzdilo difuzi enantiomerů přes membránu. Náš cíl je prodloužit separační schopnost membrány a sledovat vliv faktorů, jako velikost aplikovaného napětí nebo složení média na nasycení chirálních vazebných míst.

# *Neural network as a metamodel for bioplastic production optimization*

Bc. Kevin Klee (M2)

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

Being both bio-sourced and biodegradable, polylactic acid (PLA) has become the most popular bioplastic used in the world today. A multiscale mathematical model has been built to determine rheological properties of PLA melt during production with the potential to become a soft sensor in on-line optimization and control of the polymerization reactor. Unfortunately, prediction of detailed polymer molecular architecture using the Monte Carlo method (which is incorporated in the developed model) is computationally demanding, thereby limiting use of the model in real time during production. Therefore, the goal of this work is to develop an artificial neural network (ANN) as a metamodel to be used in real-time PLA production. The structure of the employed ANN is presented along with results concerning the prediction of molecular weight distribution and complex viscosity by the metamodel.

# *Cesta k bezzbytkové recyklaci lithium-iontových baterií – kvantitativní zhodnocení 1. cyklu recyklace*

Bc. Jan Korbel (M1)

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

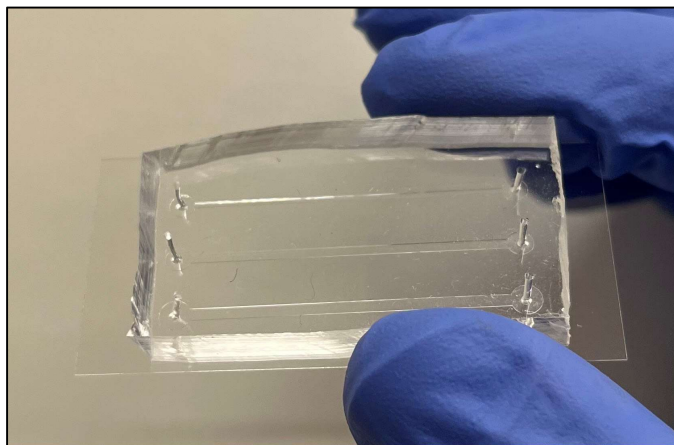
Recyklace lithiových akumulátorů představuje jednu z klíčových výzev při likvidaci spotřebičů, automobilů a technologií. Cílem je nalézt ekonomicky srovnatelnou alternativu k výrobě nových akumulátorů z primárních surovin. V laboratoři Sdílení hmoty testujeme metodiku hydrometalurgické recyklace materiálu kladné elektrody lithiových akumulátorů – směsného oxidu niklu, manganu a kobaltu (NMC). K jeho rozpuštění je využit naředěný roztok kyseliny sírové, po němž následuje vysrážení regenerovaného NMC vodným roztokem hydroxidu lithného. Klíčovou operací je zpracování filtrátu – vodného roztoku síranu sodného – elektrodialýzou s bipolárními membránami (EDBM), čímž je znovu získán roztok kyseliny sírové a hydroxidu lithného. Cílem mé práce je ověřit funkčnost recyklačního postupu při zpracování analyticky čistého NMC, vyhodnotit spotřebu energie a určit potřebné množství doplňovaných surovin nutné k udržení koncentrací vstupujících roztoků.

# Vývoj mikrofluidní platformy pro studium bakteriálního biofilmu

Bc. Filip Kříž (M1)

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

Cystická fibróza je autosomálně recesivně dědičné onemocnění, projevující se defekcí genu CFTR, který kóduje chloridové kanály. Postižená je především dýchací soustava, ale může být ohrožena i soustava trávicí či reprodukční systém. Díky defekci chloridových kanálů dochází k nadměrné tvorbě hlenu, což vede například ke zhoršenému dýchání. Toto onemocnění nelze zcela vyléčit a vede ke zkrácené délce života. V roce 1980 byly předpoklady, že polovina pacientů se nedožije 12 let, v dnešní době se průměrná životní délka zvýšila na 38 let. S rostoucím trendem životní délky je vidět posun v léčbě tohoto onemocnění, ale i tak je velmi malá škála komerčně dostupných léčiv. V této studii se zaměřujeme na účinky přírodního antibiotika allicinu na bakterii *Pseudomonas aeruginosa*, jejíž výskyt se spojuje s onemocněním cystické fibrózy právě díky produkovanému hlenu. Častokrát tato bakterie vytváří velice rezistentní biofilm. Pro simulaci prostředí plic jsme navrhli mikrofluidní čip, ve kterém bude možné testovat efekt allicinu na bakteriální biofilm v průtočném režimu. Práce v mikrofluidním zařízení nám přináší možnost časové závislosti vlivu allicinu na bakteriální kmen a umožňuje vytvořit i koncentrační gradient studované látky. Touto dynamickou metodou tak můžeme efektivně nahradit standardní metody v multi-jamkových destičkách, které fungují ve stacionárním režimu.



Připravený mikrofluidní čip

# *Microemulsion Electrolytes for Redox Flow Batteries: Membrane selection and symmetric-cell testing*

Bc. Jan Kršek (M2)

Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Energy from renewable sources fluctuates daily and seasonally, requiring efficient storage to balance its excess and shortage. Redox flow batteries (RFBs) offer a scalable and safe solution, typically using electrolytes based on metallic active species. Their scarcity and high price motivate use of organic active species, which, however, often show low aqueous solubility. Microemulsion (mE) electrolytes, composed of a polar (water) and a non-polar solvent together with surfactant and cosurfactant, enable use of cheap non-polar organic active species while maintaining high ionic conductivity and safety of the aqueous phase. Organic components of mEs may interact with polymeric ion-exchange membranes, enhancing swelling or electrolyte cross-over, while some chemically stable membranes exhibit high areal resistance reducing voltage efficiency. In this work, several promising commercially available membranes were pre-selected based on chemical stability, conductivity (EIS) and permeation tests. Subsequently, these membranes were further tested under operational conditions by: i) permeation test with charged mE electrolyte and ii) symmetric-cell cycling, to further assess membrane suitability and the electrochemical stability of the ferrocene-based mE system during cycling.

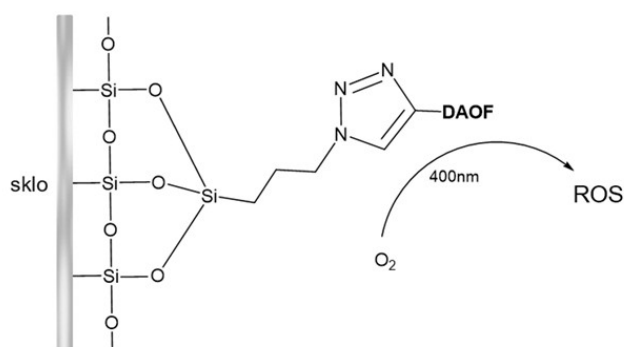


# Imobilizace fotokatalytických deazaoflavinů pro aplikaci v mikroreaktorech

Bc. Vladimír Krucký (M1)

Školitel: Ing. Anna Vanluchene, Ph.D.

Fotokatalýza představuje moderní přístup k organické syntéze, umožňující provádět reakce za mírných podmínek s využitím světla jako zdroje energie. Tradiční kovové fotokatalyzátory nabízejí vysokou účinnost, avšak jejich toxicita, cena a obtížná recyklace omezují praktické využití, zejména ve farmaceutické výrobě. Rostoucí důraz na udržitelnost proto směřuje k vývoji čistě organických systémů, které jsou ekologičtější a bez rizika kontaminace těžkými kovy. Mezi nejvýznamnější organické fotokatalyzátory patří flaviny, jejichž strukturální analogy – deazaoflaviny (DAOFy) – si zachovávají obdobné fotofyzikální a redoxní vlastnosti, ale nabízejí vyšší stabilitu a jednodušší syntézu. Tato práce se zaměřuje na přenos DAOF z homogenních do heterogenních podmínek prostřednictvím jejich imobilizace na skleněné stěny mikroreaktoru. Mikroreaktory umožňují efektivnější využití světla vysoký poměr specifického povrchu k objemu reaktoru. Integrace DAOF do mikroreaktoru tak otevírá cestu k nepřetržitě fotokatalýze s recyklovatelným, environmentálně udržitelným, levným a stabilním katalyzátorem.



# *Měření tepelného toku deskovými termočláanky v prostředí požáru*

Bc. Dalibor Krunt (M2)

Školitel: doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

Požáry představují jedny z nejhorších typů havárií nejen v chemickém průmyslu, neboť často způsobují velké materiální škody, ztráty na životech a ohrožení zasahujících hasičů. Tomu se snaží předcházet požární inženýrství. Pro validaci matematických modelů požárů a následný návrh bezpečnosti budov atp. se provádí požární zkoušky, při kterých je zkoumáno jak vybraný objekt hoří. Při těchto měřeních se pozoruje mnoho veličin z důvodu finanční náročnosti experimentu. Ve svém výzkumu ve spolupráci s Technickým ústavem požární ochrany HZS ČR se zabývám měřením tepelného toku. K tomu se dnes používají nákladné a křehké senzory, což však komplikuje jejich využití v terénních podmínkách. Hledá se proto alternativa, kterou by mohl být deskový termočlánek, jenž je jednodušší, odolnější a levnější. Jedná se o zařízení skládající se z kovové destičky, opláštěvaného termočláanky a izolace. Pro spolehlivé měření je potřeba optimalizovat provedení termočláanky pro náročné podmínky. To musí být takové, aby odolalo vysokým teplotám, vykazovalo mechanickou odolnost a umožnilo co nejpřesnější měření. Z výsledků proběhlé požární zkoušky vychází, že data z deskového termočláanky jsou srovnatelná s daty z komerčního senzoru. K úspěšnému zavedení je potřeba lépe vyřešit spojení destičky s izolací.

# *Optimization of current methodology for measuring physical parameters during the bread baking process*

BSc. Iris Leitmannová (M1)

Supervisor: prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha

Bread baking is a traditional process that has evolved over generations to achieve the most desirable product. While the qualitative knowledge is extensive, its mathematical representation remains unexplored. Developing a well-designed model based on accurate experimental data would not only explain the scientific understanding of baking but could potentially reduce electricity consumption in industrial production. This research primarily focuses on designing and optimizing a measurement methodology for analyzing heat and mass transfer, heating conditions, and humidity. Since the temperature control plays a crucial role in the experiment, a suitable measuring device, equipped to withstand high temperatures, was selected. Given that the temperature stability has a great influence on the response speed, the instrument had to be calibrated to account for measurement delays. To quantify these delays, a simple experiment was performed that simulated a step function at a temperature change on the surface of the instrument. The measuring curves outputted by the sensor were benchmarked against a certified PT100 thermometer. The mathematical model was then enriched with these results, leading to more representative data collection. Additionally, to avoid production lags, the procedure duration was decreased to a minimum. The proposed methodology was tested at a partner facility.

# *Stanovení hodnot $k_Ga$ na sypané výplni NeXRing 1.2 systémem $\text{NH}_3/\text{H}_2\text{SO}_4$*

Bc. Filip Lipowski (M1)

Školitel: Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.

Separční procesy, zvláště absorpce, jsou ve velké míře používány při snaze odstranit nebo minimalizovat emise škodlivých látek vytvořené z průmyslových procesů. Mezi tuto snahu odstranění nežádoucích složek patří i absorpce  $\text{NH}_3$  z odpadních plynů. V současné době se hojně přistupuje k rate-based modelování výměníků sdílení hmoty. Samotné modelování využívá mnoha charakteristik, mezi které patří i objemový koeficient přestupu hmoty v plynné fázi neboli  $k_Ga$ , které bylo předmětem měření v této práci. Experimentální část zjišťování hodnot  $k_Ga$  bylo prováděno v absorpční koloně o průměru 300 mm za použití výplně NeXRing 1.2 na systému vzduch- $\text{NH}_3$ /voda- $\text{H}_2\text{SO}_4$ . Vyhodnocené hodnoty byly porovnány s již dříve naměřenými daty na stejné měřící aparatuře na totožném systému  $\text{NH}_3/\text{H}_2\text{SO}_4$  a následně s daty naměřenými na systému  $\text{SO}_2/\text{NaOH}$ . Z tohoto porovnání byl poté vypočten exponent  $m$ , vyjadřující závislost  $k_Ga$  na difuzním koeficientu. Cílem této práce je získání nových dat, které budou použity ve vývoji nového modelu pro predikci objemových koeficientů přestupu hmoty v plynné fázi, který by přesněji predikoval hodnoty  $k_Ga$  pro různé systémy.

# *Study of partition coefficient in the liposomal membrane*

Bc. Kryštof Luhan (M1)

Školitel: Ing. Martin Roudný

Liposomes are vesicles composed of phospholipids that closely resemble human cellular membranes. They self-assemble spontaneously in an aqueous environment, encapsulating a portion of the surrounding medium during the formation. This phenomenon is used in the pharmaceutical industry to enable targeted delivery of active pharmaceutical ingredients (API), which would in standard administration form exhibit unwanted side effects. Notable APIs delivered with liposomes are used in chemotherapy and are approved for use for almost 30 years, and other applications are still in development. Despite this success, there are many APIs unsuitable for such means of delivery. This leads to a question; how do we know which APIs can be used in liposomes? The answer is hidden in two variables – the permeability and the partition coefficient. Whilst permeability can be studied rather easily, via either thermal or temporal release measurements; there are just a few methods for reliable study of the partition coefficient. This work focuses on devising a method for measuring the partition coefficient of fluorescent dye, and how it is influenced by the presence of common APIs in the measured samples. The results can lead to development of systems for effective simultaneous delivery of different APIs.

# *Návrh a modelování expoziční komory pro testování inhalačních nanokrystalických lékových forem*

Bc. Filip Machač (M1)

Školitel: Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.

Práce se zaměřuje na návrh a modelování expoziční komory určené pro *in vitro* testování inhalačních lékových forem. Podstatou této komory je zprostředkovat expozici plicních buněk aerosolu tvořenému nanokrystalu léčiv v kapalném médiu a tím umožnit experimentální hodnocení depozice a biologické dostupnosti inhalačních forem. Výhodou nanokrystalů je zvýšená rychlost rozpouštění léčiv a tím i jejich biologická dostupnost, což je zvláště přínosné u látek se špatnou rozpustností ve vodě, typické pro většinu současně používaných léčiv.

Aerosol je generován nebulizérem s technologií vibrating mesh, přičemž expoziční komora je navržena tak, aby zajistila homogenní depozici mikročástic na plicní buňky kultivované na rozhraní vzduch–kapalina pomocí technologie Transwell. Práce se zaměřuje na parametry, jako je doba expozice, rovnoměrnost doručené dávky a minimalizace ztrát mimo cílenou oblast. Součástí projektu je CFD modelování proudění a distribuce mikročástic v prostředí komory pomocí softwaru COMSOL Multiphysics. Výsledky mohou přispět k vývoji nových metod pro hodnocení biologické dostupnosti inhalačních forem a k návrhu efektivnějších systémů pro plicní podání léčiv.

# *Testování pasivního adsorbéru NO<sub>x</sub> pro redukci emisí během studeného startu*

Petr Mádlík (B2)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Snížení emisí znečišťujících látek je nezbytné pro ochranu životního prostředí a lidského zdraví. Moderní spalovací motory proto využívají katalytické systémy, které přeměňují toxické plyny, jako jsou CO, uhlovodíky a NO<sub>x</sub>, na zdravotně neškodné produkty (CO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O). Mezi těmito znečišťujícími látkami jsou obzvláště škodlivé oxidy dusíku (NO<sub>x</sub>), protože přispívají k tvorbě smogu a respiračních onemocnění. Během studeného startu spalovacího motoru nejsou výfukové plyny dostatečně zahřáté, a katalytické systémy tak zůstávají neaktivní, a to zpravidla až do teploty 200 °C. Cílem vyvíjeného pasivního adsorbéru NO<sub>x</sub> (PNA) je zachytit při nízkých teplotách oxidy dusíku pomocí chemisorpce a následně je uvolnit, jakmile katalytický systém pro jejich redukci dosáhne požadované provozní teploty. Tato práce se soustředí na experimentální testování PNA katalyzátoru na bázi Pd/SSZ-13 v laboratorním reaktoru za podmínek napodobujících cyklus studeného startu a následného ohřevu. Pomocí měření výstupních koncentrací plynů jsou stanoveny klíčové provozní parametry, celková adsorpční kapacita a teplotní profil desorpce NO<sub>x</sub>. Získané výsledky přispívají k optimalizaci provozních podmínek PNA systémů a k lepšímu pochopení dějů odehrávajících se na povrchu katalyzátoru.

## *Development of an in vitro bronchial cell model for testing respiratory drug delivery*

Bc. Tibor Malinský (M1)

Školitel: Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.

The oral bioavailability of many drugs is limited due to their low aqueous solubility. Furthermore, orally administrated drugs encounter obstacles as the drugs are sensitive to the gastrointestinal environment and are significantly metabolized in liver. A promising solution to these challenges is respiratory drug delivery. The advantages of this pathway are quicker onset of action, low biological barrier, large surface area, and possibility of both local and systematic drug delivery. Nanocrystals are an attractive drug formulation for inhalation delivery. Most of the inhaled particles deposit in tracheobronchial and alveolar regions. Some of these particles dissolve and are absorbed, however, a portion is removed by immune system (macrophages) and ciliary clearance. The objective of this project is to determine what quantity of the drug enters the bloodstream and optimize a method for determination. An *in vitro* cellular model is being developed using bronchial cell line BEAS-2B and curcumin nanocrystals as a model drug.



# *Singlet Oxygen Oxidations in the Microflow Cell Photocatalyzed by g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>*

Bc. Andreas Maton (M2)

Školitel: Ing. Anna Vanluchene, Ph.D.

Reactive oxygen species (ROS) are highly important in synthetic chemistry because they can serve as powerful and green oxidants, enabling atom-efficient introduction of oxygen-containing functional groups, which is especially relevant for the synthesis of active pharmaceutical ingredients (APIs). These can be generated photochemically, where a photocatalyst activates molecular oxygen under light irradiation. In this context, carbon nitride materials are promising metal-free photocatalysts for singlet oxygen ( $^1\text{O}_2$ ) formation. Within this group, graphitic carbonitride (g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>) and polyheptazine imides (NK-PHI) represent two different subclasses that differ in structure and surface properties. Both catalysts were synthesized and evaluated in this work. However, singlet oxygen ( $^1\text{O}_2$ ) is difficult to produce in the traditional batch setup using photochemistry, due to the poor penetration of light through the reactor. In addition, they have a short lifespan, which further complicates their use. Photochemistry in microfluidic chips offers a promising solution, because the small channels dimensions provide a much larger surface-to-volume ratio, allowing more efficient illumination. This work aims to design a microflow cell, immobilize the catalysts on glass and evaluate their efficiency in generating singlet oxygen, with the goal of improving sustainable and scalable ROS production.

# *Dělení benzínu procesem rektifikace ve společnosti ORLEN Unipetrol*

Bc. Jan Mazák (M1)

Školitel: Ing. Lukáš Valenz Ph.D.

V rafinerii ORLEN Unipetrol dochází k dělení surového benzínu na tři frakce, a to na jedné z tamních rektifikačních kolon. Z horní části kolony je odebírán lehký řez benzínu, v dolní části destilační zbytek neboli těžký řez. Ze střední části kolony je pak odebírán střední řez, který je veden do stripovací kolony, ve které dochází k vystripování zbylých lehkých podílů. Před nástřikem surového benzínu do kolony je nejprve předehříván proudem středního řezu, poté proudem těžkého řezu, a nakonec prochází tepelným výměníkem, kde je dohříván parou. Samotná rektifikační kolona je vytápěna reboilovací pecí, kde se jako palivo využívá topný plyn. Cílem mojí práce je sestavit hmotnostní a entalpickou bilanci bilanci. Ty budou výchozím bodem pro sestavení modelů, pomocí nichž budou porovnány různé varianty provozování zařízení a posouzení vlivu vytápění kolony topným plynem a předehřevu nástřiku parou. Hlavním cílem práce je zjistit, zda-li je efektivnější a ekonomicky výhodnější topit více v koloně a spotřebovávat topný plyn, nebo naopak více předehřívat nástřik parou za předpokládané úspory topného plynu a pomoci firmě k lepšímu hospodaření.

# *Bioanalytické hodnocení nanokrystalů nintedanibu v in vitro modelu plicní fibrózy*

Bc. Hana Moravčíková, M2

Školitel: Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.

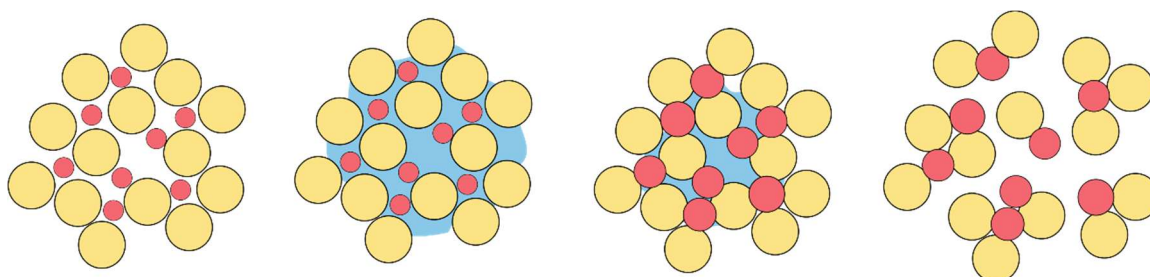
Idiopatická plicní fibróza je onemocnění charakteristické zjizvením plicní tkáně bez zjevné příčiny. Projevuje se dušností, kašlem a zvýšenou únavou při námaze v důsledku snížené kapacity plic. Ačkoli je incidence této choroby relativně nízká, její výzkum je zásadní, neboť bez medikace je předpokládaná doba dožití po diagnóze jen tři až pět let. Pro léčbu idiopatické plicní fibrózy jsou v současnosti schváleny pouze dva léky – pirfenidon a nintedanib, které však průběh onemocnění pouze zpomalují. V této práci byly připraveny nanokrystaly nintedanibu pomocí metody mokrého mletí, které byly stabilizovány fosfolipidy. Důvodem pro tvorbu nanokrystalů je nízká perorální biologická dostupnost nintedanibu a časté nežádoucí účinky současné perorální formy. Nintedanib ve formě nanokrystalů má také potenciál pro inhalační podání, což by mohlo zvýšit koncentraci léčiva přímo v cílové tkáni, snížit potřebnou dávku a nežádoucí účinky. Současně byly provedeny prvotní experimenty na buňkách plicního epitelu a fibroblastech za účelem tvorby trojrozměrného modelu plicního sklípku pomocí metody Transwell, kdy buňky epitelu budou kultivovány na horním povrchu a fibroblasty na dolním povrchu porézní membrány. Tento model bude dále vystaven profibrotickému činiteli bleomycinu.

# Počítačová simulace dezintegrace a disoluce tablety

Bc. Adam Opravil (M1)

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

Tablety jsou nejvíce používanou lékovou formou. Připravují se lisováním tabletovací směsi složené z částic účinné látky a pomocných látek jako plniv a dezintegrantů. Pro následné dostatečně rychlé uvolnění účinné látky z tablety je nutná dezintegrace tablety na menší fragmenty, a to přetrháním interpartikulárních vazeb vzniklých při lisování. Mechanismus dezintegrace značně závisí na formulaci tablety a procesních parametrech jako například lisovací síle. Tyto aspekty ovlivňují rychlost vzniku a velikost fragmentů tablety, ze kterých se posléze uvolňuje účinná látka. Cílem této práce je popsat dezintegraci a disoluci tablety matematickým modelem zahrnujícím celý proces od zformování práškového kompaktu až po sestrojení disoluční křivky ze vzniklých fragmentů. Vlastní dezintegrace je popsána metodou diskrétních elementů (DEM), kdy je tabletovací směs tvořena populací primárních částic, ze kterých je posléze zformován kompaktní. Mezi částicemi v kontaktu jsou vytvořeny vazby. V průběhu následného bobtnání dezintegrantu dochází k mechanickému namáhání a případně i k porušení vazeb, což vede k fragmentaci tablety. Simulace rozpouštění vybraných fragmentů poskytne disoluční křivku pro každou velikostní třídu fragmentů, superpozicí těchto křivek poté vychází celková disoluční křivka.



# *Automatizace screeningu lipidických formulací léčiv a vliv míchání na jejich samoemulsifikaci*

Bc. Jan Pchálek (M1)

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

Nízká rozpustnost mnoha účinných farmaceutických látek ve vodném prostředí představuje zásadní výzvu pro dosažení dostatečné biologické dostupnosti (podílu podané dávky, který se dostane do systémového oběhu). Mezi slibná řešení patří samoemulgující lipidové systémy (SMEDDS), které jsou schopné spontánně tvořit emulze olej-voda při kontaktu s gastrointestinálními tekutinami. Klíčovým problémem řešeným v této práci je proces screeningu SMEDDS, který se tradičně provádí manuálně pomocí časově náročných kombinatorických metod. Navíc vliv kvality promíchání na účinnost emulsifikace nebyl dosud dostatečně prozkoumán. Dalším cílem práce je zjednodušení analýzy velikostí částic emulzí. V rámci této práce byl navržen a zkonstruován statický mísič s variabilním počtem mísicích elementů, který umožnil řízené studium vlivu homogenity na emulsifikaci. Kvalita emulsifikace byla určena rychlostí nárůstu turbidity a velikostí vznikajících kapek. Nižší homogenita vedla k nechtěné separaci fází, zatímco vyšší homogenita zrychlila žádanou tvorbu kapek. Pro překonání časové náročnosti manuálního screeningu bylo vyvinuto automatizované zařízení, které integruje senzory turbidity a robotické rameno pro manipulaci se vzorky. Automatizovaný proces byl přibližně 2,5x rychlejší než současný postup a jeho funkčnost byla ověřena na modelové formulaci.

# *Desalination of seawater for oyster farming using electrodialysis*

Bc. Helena Petráňová (M1, Technická univerzita v Liberci)

Supervisor: Ing. Lukáš Václavík

Seawater desalination is essential for providing water resources suitable for human consumption, agriculture and aquaculture. This study focuses on the application of electrodialysis to prepare water for oyster farming. The objective of the laboratory-scale experiments was to achieve on P EDR-Y elektrodialysis unit conductivity of  $100 \text{ mS}\cdot\text{cm}^{-1}$  in the concentrate and  $15 \text{ mS}\cdot\text{cm}^{-1}$  in the diluate, while maintaining a pH range of 7.8–8.4. The target conductivities were reached; however, several operational challenges occurred. Gas bubbles accumulated in the electrode solution, reducing liquid flow, and membranes were fouled with magnesium oxide originating from seawater. Analyses further revealed high chlorine content in the concentrate and yellow discoloration of the solutions. These issues were mitigated by treatment with activated carbon, which significantly improved the diluate quality – its pH reached nearly optimal 7.9 and the yellow haze was removed. The results confirm that electrodialysis is a promising method for seawater treatment in aquaculture and can deliver conditions close to those required for oyster farming. Nevertheless, additional pH control and removal of by-products remain necessary to ensure optimal water quality for long-term application.



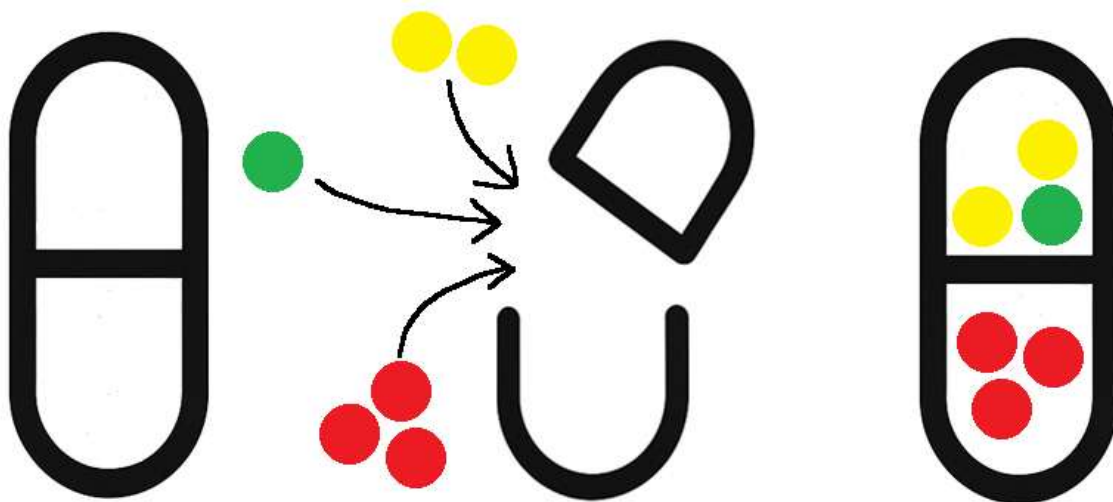
Figure 1 Left: P EDR-Y elektrodialysis unit (a) with membrane (b) and temperature control (c), Right: membrane module

## Lineární kapslovačka pro flexibilní kombinace léčiv

Daniel Petrok (B3)

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

Personalizovaná výroba léčiv a kombinovaná terapie jsou aktuální směry, které formují vývoj farmaceutické výroby. Současná technologie výroby je zaměřená na hromadnou výrobu jednotlivých šarží léčiv, proto není pro výše uvedené směry ideální. Cílem mého výzkumu je navrhnout a otestovat laboratorní prototyp lineárního stroje na plnění želatinových kapslí, který by dovolil kombinovat více různých léčiv, a byl díky tomu vhodný pro výrobu flexibilních kombinací léčiv. Oproti běžnému rotačnímu uspořádání, lineární uspořádání umožňuje zvyšovat, jak počet kombinovatelných léčiv, tak i propustnost výroby, jednoduchým přidáváním modulů. Další výhodou této modularity je možnost operativně měnit poměr léčiv v různých šaržích podle potřeby, bez nutnosti odstavení kapslovačky. V první fázi se zaměřuji plnění kapslí, kvůli jeho technologické náročnosti. Současný prototyp je sestaven z komponent vytištěných na 3D tiskárně a pro simulaci léčiva jsou použity mikrotablety.

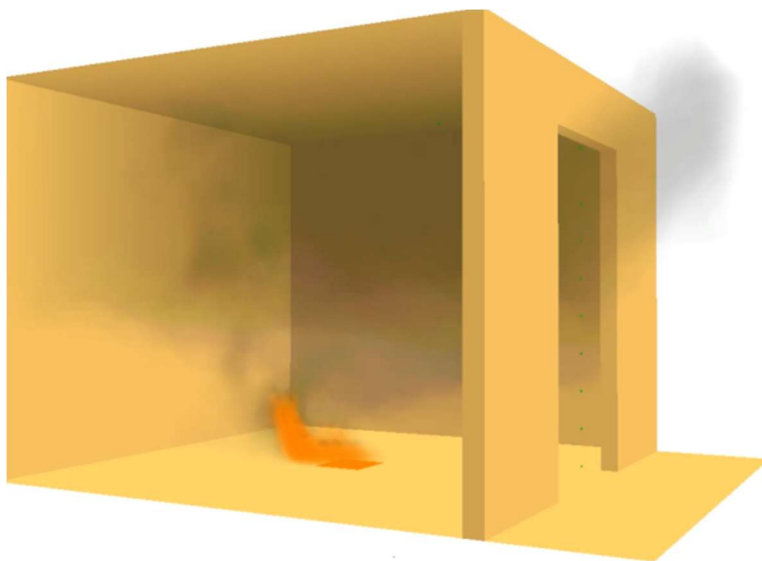


## Vliv sazí na CFD modely požárů

Bc. Bára Pinčáková (M2)

Školitel: Ing. Vojtěch Šálek, Ph.D.

Saze jsou jemné pevné částice uhlíku, které vznikají při nedokonalém spalování organických látek. Při požáru mají saze zásadní vliv na okolní prostředí – ovlivňují například teplotní pole, přenos tepla sáláním a viditelnost. Zhoršená viditelnost výrazně komplikuje orientaci v prostoru i samotný průběh evakuace osob. Zároveň se kouř a toxické saze šíří po celém objektu, což vede k rozsáhlému znečištění i mimo přímé ohnisko požáru. Odstranění těchto usazenin bývá technicky složité a finančně náročné. Aby bylo možné lépe porozumět chování sazí a jejich vlivu na průběh a důsledky požáru, využívají se pokročilé simulační nástroje, jako je program Fire Dynamics Simulator (FDS). Tento program umožňuje modelovat šíření požárů, včetně kouře, sazí, tepla a dalších parametrů, což je klíčové pro predikci chování požárů a návrh účinných protipožárních opatření. V této práci se zaměřuji na modelování chování sazí v programu FDS, s důrazem na jejich vliv na viditelnost, teplotu, radiaci a další klíčové parametry. Cílem je lépe porozumět roli sazí při numerickém modelování požárů a podpořit tak efektivní prevenci a analýzu požárních rizik.



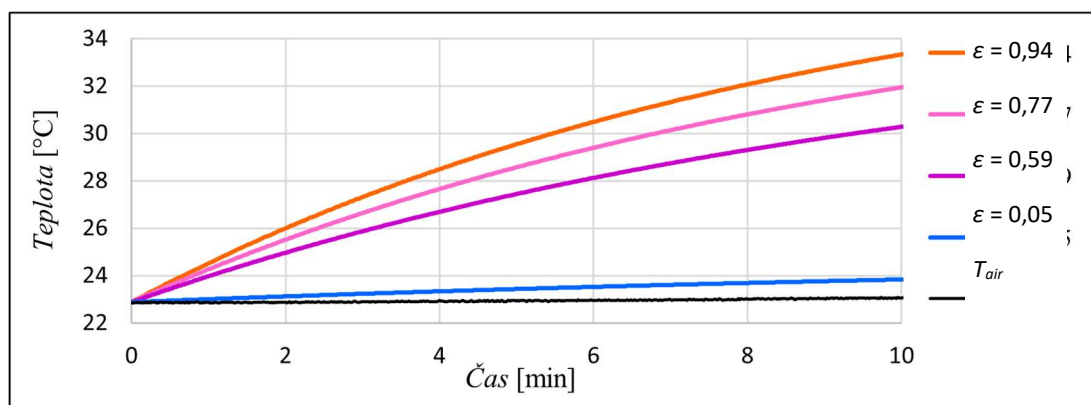


# Vývoj meracieho zariadenia na určovanie sálavého a konvekčného prenosu tepla v priemyselných objektoch

Bc. Adam Pipíška (M2)

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

Sálavé vykurovacie systémy sa v priemyselných objektoch využívajú na efektívny prenos tepla bez potreby ohrievania celého objemu vzduchu. Riadenie týchto systémov býva založené na meraní teploty vzduchu, hoci pre kvalitu výroby je často rozhodujúca teplota materiálu. Vzduch sa ohrieva až sekundárne od povrchov a jeho teplota je ovplyvnená prúdením. Teplota povrchu poskytuje presnejšiu informáciu o stave materiálu, avšak pri jeho väčších rozmeroch nemusí zodpovedať teplote v celom objeme. Tú možno určiť nepriamo, ak sú známe intenzita sálavého toku a koeficient prestupu tepla. Hoci tieto veličiny je možné merať, zariadenia na ich stanovenie sú príliš nákladné pre použitie ako duplicitný merací prvok. Preto bolo navrhnuté cenovo dostupné meracie zariadenie, vhodné pre trvalú inštaláciu v priemyselných podmienkach. Princíp merania spočíva v sledovaní teplotnej odozvy referenčného materiálu s rôznou emisivitou povrchu. Hodnoty získané týmto zariadením môžu slúžiť ako vstup pre prediktívne riadenie, ktoré znižuje spotrebu energie pri dodržaní teplotných požiadaviek. Zariadenie zároveň umožňuje vyhodnotenie účinnosti a technického stavu sálavých systémov.



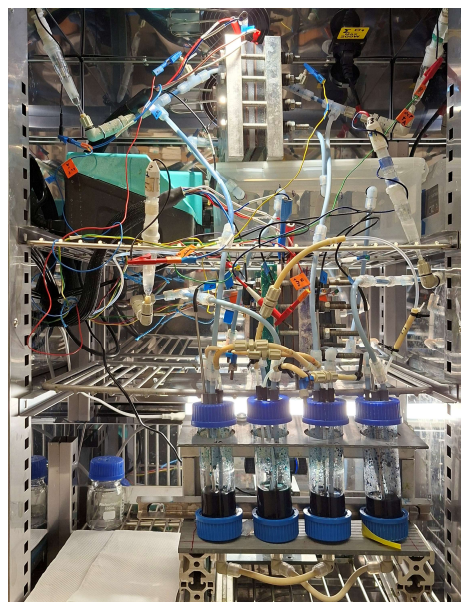
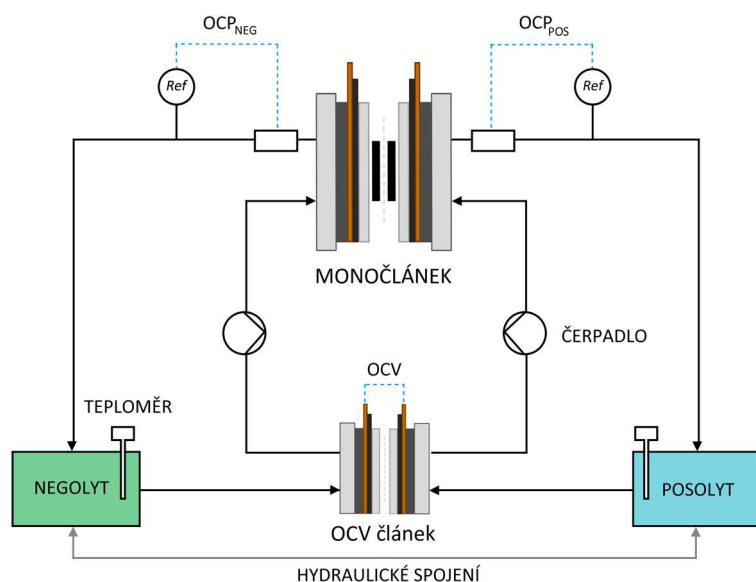
Obr 1: Časový priebeh teploty referenčného materiálu s emisivitou povrchu  $\epsilon$

# Vliv provozní teploty na účinnost a střednědobou stabilitu vanadových redoxních průtočných baterií

Žofie Plchutová (B3)

Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Redoxní průtočné baterie (RPB) nabízí vysoce škalogatelné a nehořlavé řešení problému akumulace energie z obnovitelných zdrojů, jejichž proměnlivost ohrožuje stabilitu elektrické rozvodné sítě. Nejrozšířenějším a v průmyslu již využívaným typem těchto baterií jsou vanadové RPB, které vynikají zejména dlouhodobou životností. Nevýhodou je však nízká hustota energie a výkonu způsobena nízkou rozpustností a nestálostí kladného elektrolytu při teplotách nad 40 °C v důsledku nevratné precipitace pětimocného vanadu. Cílem této práce je posouzení střednědobé stability kladného elektrolytu vanadové RPB za zvýšené teploty a pro různá složení elektrolytu. Za tímto účelem byla vyvinuta testovací aparatura, umožňující komplexní charakterizaci laboratorních monočlánků v širokém rozsahu teplot s možností průběžného monitorování relevantních parametrů, jakými jsou teplota elektrolytu, napětí a potenciály baterie i referenčního článku a objem elektrolytu v zásobnících s hydraulickým spojením sloužícím k průběžnému vyrovnávání hladin. Získaná data budou základem rozšířeného procesního modelu, jenž umožní racionálně posoudit možnosti vysokoteplotního provozu baterie a využitelnosti pro ko-akumulaci tepla.



# *Development of a microfluidic chip for studying oxidative photocatalytic reactions in two-phase flow*

Adam Plšek (B3)

Školitel: Ing. Anna Vanluchene Ph.D.

Traditional oxidation reactions often require stoichiometric oxidants that are consumed during the process and are not environmentally friendly. Photocatalytic oxidation reactions offer an alternative approach, in which a photosensitizer enables the conversion of molecular oxygen into singlet oxygen, a highly effective oxidant. In this way, it is possible to sustainably obtain an effective oxidant directly from air. However, performing such reactions in large volumes is problematic due to poor mass transfer and ineffective use of light. The solution is to use microfluidics with Taylor flow, which enables better mass transfer and uniform illumination of the reaction mixture. The aim of this work is to develop a microfluidic chip for photocatalytic oxidation reactions using stable gas-liquid Taylor flow, and to investigate how parameters such as slug length influence reaction conversion and efficiency. A silicon wafer with a microstructured design was prepared by laser photolithography, which serves as a mold for the subsequent production of PDMS chips by soft lithography. So far, Taylor flow has been generated in the microfluidic chips, although it is not yet optimally controlled. This will be optimized next and subsequently applied in a model photocatalytic reaction.

# *Controlled degradation of hyaluronic acid via thermal hydrolysis: Kinetic and thermodynamic aspects*

Bc. Monika Poláčková (M2)

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

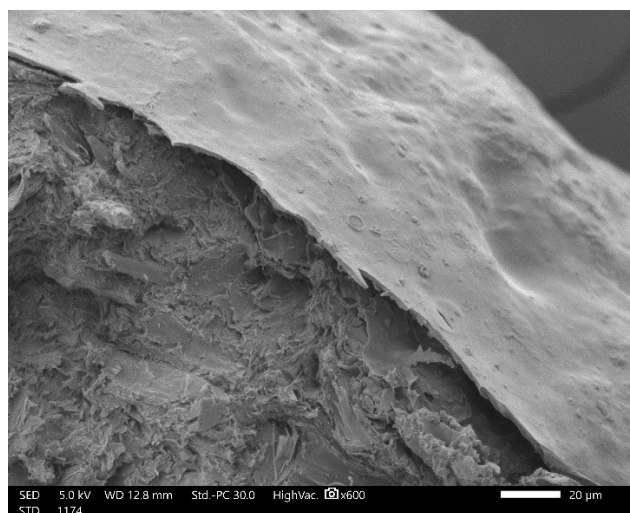
Hyaluronic acid, a naturally occurring polysaccharide present in the human body, plays a vital role in biomedical, pharmaceutical and cosmetic applications owing to its excellent biocompatibility. A key challenge in tailoring the functionality of hyaluronic acid-based products lies in controlling its molecular weight, as the physicochemical properties are highly dependent on it. Among the possible approaches to control its molecular weight, controlled depolymerisation through thermal hydrolysis under subcritical water conditions may represent a new and mostly unexplored method without need of using additional substances. In this work, a mathematical model was developed to describe this process and to investigate underlying kinetic behaviour. The developed model enables to study the influence of unexpectedly produced by-products and systematically analyse possible kinetic mechanisms of the reactions accompanying the depolymerization reaction. The model further incorporates the thermodynamic aspects through viscosity-dependent adjustment of the kinetic constants, replying to the observed decrease in reaction rate with increasing polymer concentration and chain entanglement.

# *Kontrola uvolňování léčiva pomocí potahu částic ve fluidním loži*

Matěj Řeháček (B3)

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

Tato práce pojednává o řízeném uvolňování léčiva z jeho lékové formy. Cílem je navrhnout systém, u něhož nedochází k okamžitému uvolnění léčivé látky, ale k uvolnění oddálenému v definovaném čase. Tohoto jevu lze docílit pomocí funkční vrstvy polymerního potahu nanesené na kulových částicích. Potah se nanáší na částice ve fluidním loži, které umožňuje rovnoměrné potažení vrstvy s homogenním obsahem. Funkční vrstva je tvořena kombinací ve vodě rozpustného a nerozpustného polymeru o známém složení a tloušťce. Volbou jejich vzájemného poměru by mělo být možné dosáhnout libovolné doby, po jejímž uplynutí začne docházet k uvolnění léčiva. Po rozpuštění rozpustné složky vznikne z nerozpustného polymeru porézní matrice, skrz kterou může účinná látka difundovat do okolního prostředí. Průběh je možné sledovat pomocí disolučních testů zobrazujících závislost koncentrace uvolněné látky na čase. Různým složením funkční vrstvy potahu lze řídit časový profil uvolňování tak, aby in vitro napodoboval podmínky průchodu lékové formy gastrointestinálním traktem. Proces umožňuje cílené nastavení disolučního profilu bez zásahu do původního chemického složení částice. Tento technologický postup může být dále aplikován pro různé částice s různou velikostí a morfologií.



Obrázek 2 SEM snímek funkčního potahu částic

# *In vitro analýza inhalačních přípravků pro in situ výrobu antibiotik*

Bc. Anna Reiserová (M2)

Školitel: Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.

Inhalační podávání antibiotik představuje moderní a mimořádně perspektivní přístup v léčbě infekcí dýchacích cest. Umožňuje cílený zásah přímo v místě infekce a zároveň minimalizuje vznik antimikrobiální rezistence. Tato práce přináší inovativní pohled na využití allicinu, přírodního antibiotika nacházejícího se v česneku (*Allium sativum*), jehož unikátní nespecifický mechanismus účinku a velmi krátký poločas rozpadu (řádově několik minut) přispívají k potlačení rozvoje bakteriální rezistence. Díky své těkavé povaze může být allicin podáván jak v plynné, tak v kapalně formě, což otevírá cestu k vývoji nových inhalačních léčiv. Práce se zároveň zaměřuje na ochranu buněk plicního epitelu před případnými nežádoucími účinky allicinu prostřednictvím antioxidantu glutathionu, který je přirozenou součástí obranného systému lidského těla. Glutathion reaguje s allicinem za vzniku méně reaktivních produktů, čímž efektivně snižuje cytotoxicitu a chrání buňky před oxidačním stresem. Pro experimenty byl použit Transwell model plicního epitelu, který napodobuje reálné prostředí lidských plic. Tento model umožňuje sledovat interakce mezi linií plicních buněk (A549), allicinem, glutathionem, v podmínkách blízkých in vivo systému. Cílem práce bylo určit terapeuticky bezpečné a účinné koncentrace allicinu jako čisté látky a ve formě inhalačních mikročástic připravených sprejovým sušením.

# Stanovení hodnot $k_{Ga}$ na sypané výplni NeXRing # 0.7 v absorpční koloně

Bc. Veronika Rychlá (M1)

Školitel: Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.

Hodnoty  $k_{Ga}$  z různých literárních modelů se liší až násobně. Jedna z možných příčin je závislost  $k_{Ga}$  na difúzním koeficientu, která je v mocninném tvaru. Literární modely jsou obvykle postaveny na teorii mezní vrstvy, ze které vyplývá hodnota exponentu  $m = 0,67$ . Na našem pracovišti se dlouhodobě věnujeme vyhodnocení  $m$  zejména na strukturovaných výplních pro nízké průtoky kapalně fáze. Ukazuje se, že s rostoucím průtokem kapalně fáze (rostoucím  $k_{Ga}$ ) se hodnota  $m$  zvyšuje. Tento trend je žádoucí potvrdit na vyšších průtocích kapalně fáze. Za tímto účelem byla upravena pata kolony a odtok kapaliny do nádrže. Cílem této práce je poskytnout data k vyhodnocení hodnoty  $m$  na sypané výplni NeXRing # 0.7 na systému  $\text{SO}_2/\text{NaOH}$  v koloně DN 300. Hodnoty  $k_{Ga}$  byly stanoveny pro průtoky kapalně fáze 5 – 60 m/h a rychlosti plynu 0,5 – 2,5 m/s. I přes opakovaná měření vyšly hodnoty  $k_{Ga}$  pro 3 nejvyšší průtoky kapalně fáze stejné (v rámci chyby měření). Je známo, že  $k_G$  nezávisí na průtoku kapalně fáze, zatímco efektivní mezifázová plocha s rostoucím průtokem kapaliny roste. Hodnoty efektivní mezifázové plochy byly na našem pracovišti již změřeny (Svoboda, 2021) a vykazují podobný trend jako  $k_{Ga}$ , kdy hodnoty efektivní mezifázové plochy pro 3 nevyšší průtoky kapaliny se neliší o více než 2 %.

# *Elektrochemické generování $H_2O_2$ pro využití při úpravě vody*

Bc. Antonín Saifrt (M1)

Školitel: Ing. Jan Haidl, Ph.D.

Peroxid vodíku je hojně využívanou chemikálií v chemickém průmyslu, hlavně jako oxidační a dezinfekční činidlo. Jeho velkou výhodou je, že se samovolně rozkládá a vzniklé produkty jsou, na rozdíl od jiných oxidovadel, netoxické. Díky tomu se hodí k využití například při úpravě vody nebo v potravinářském a farmaceutickém průmyslu. Jedná se, zejména v koncentrované formě, o silně korozivní a nebezpečné činidlo, s čímž jsou spojeny vysoké náklady na skladování, nakládání a přepravu. V procesech používajících zředěný roztok (do 1 %) lze tyto náklady omezit elektrochemickým generováním  $H_2O_2$  přímo v místě spotřeby. To by eliminovalo většinu nákladů potřebných na přepravu a skladování koncentrovaného roztoku, protože by bylo možné lokálně vygenerovaný peroxid na místě okamžitě využít pro daný účel. Cena spojená s použitím  $H_2O_2$  by se pak sestávala hlavně z ceny elektrické energie potřebné na elektrochemickou reakci a počátečních nákladů na zařízení. Tato práce se věnuje prověření možností průmyslové výroby zředěných roztoků  $H_2O_2$  elektrochemickou cestou, a to dvěma způsoby: redukcí kyslíku na katodě a oxidací vody na anodě. Zamýšleným využitím technologie je kvarterní čištění odpadních vod, nově vyžadované dle legislativy EU.



# Glukanové částice coby nosič nukleových kyselin

Bc. Barbora Šašková (M1)

Školitel: Mgr. Jaroslav Hanuš Ph.D.

Tato práce se zaměřuje na vývoj nosiče pro vakcínu proti viru deformovaných křídel (DWV), který patří mezi nejrozšířenější a vysoce infekční viry včely medonosné (*Apis mellifera*). Infekce tímto virem způsobuje deformace křídel u dospělých jedinců nakažených v larválním stádiu, čímž ohrožuje životaschopnost celých včelstev. Jako nosič vakcíny, resp. nukleových kyselin, jsou v případě této práce využívány glukanové částice (GPs) připravené z kvasinek *Saccharomyces cerevisiae* pomocí alkalické a acidické extrakce. Díky své  $\beta$ -glukanové struktuře jsou tyto částice rozpoznávány a fagocytovány buňkami imunitního systému. Jejich porézní struktura i hydrofilní vlastnosti umožňují zachycení a transport účinných látek, avšak u dobře rozpustných látek, jako jsou nukleové kyseliny, dochází ve vodním prostředí k jejich rychlému úniku ze struktury GPs. Hlavním cílem práce proto bylo zajistit zadržení nukleových kyselin pomocí látek, které mohou s nukleovými kyselinami tvořit komplexy a tím tak zlepšit jejich retenci ve struktuře GPs. V rámci práce byla nalezena jednoduchá metoda umožňující přípravu LGPs, otestováno několik složení látek vhodných pro zachycení nukleových kyselin a optimalizovány podmínky pro skladování vzniklých kompozitů.

# Stanovení hodnot $k_Ga$ na sypané výplni NeXRing # 0.7 v absorpční koloně ID 150

Bc. Nastassia Shautsova (M1)

Školitel: Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.

V chemickém průmyslu má absorpce nezastupitelné místo jako jedna z nejdůležitějších separačních operací. V posledních desetiletích se při návrhu absorpčních zařízení stále častěji uplatňuje tzv. *rate-based* přístup, který pro stanovení průměru a výšky kolony využívá znalostí transportních a hydraulických charakteristik. Vzhledem k velkému počtu existujících systémů kapalina–plyn však není možné u všech experimentálně určit potřebné parametry. Z tohoto důvodu se často využívají modely, které tyto parametry předpovídají za jiných podmínek. Při aplikaci na systémy odlišné od těch, na nichž byly původně ověřeny, ale tyto modely často selhávají. Pro jejich zpřesnění je proto nezbytné vyhodnotit  $k_Ga$  pomocí více různých systémů. Tato práce se zaměřuje na studium vztahu mezi objemovým koeficientem přestupu hmoty v plynné fázi  $k_Ga$  a difúzním koeficientem. Měření probíhalo pro systém  $\text{NH}_3\text{--H}_2\text{SO}_4$  v koloně o průměru 150 mm s výplní NeXRing 0.7. Získané hodnoty  $k_Ga$  byly následně porovnány jak s výsledky dřívějších měření stejného systému na koloně o průměru 300 mm, tak i s daty pro systém  $\text{SO}_2\text{--NaOH}$ . Cílem této práce bylo zjistit, jestli má průměr kolony vliv na hodnoty  $k_Ga$  stanovené na sypané výplni.

# *Kontinuálna mikrofluidická syntéza lipozómov: štúdium vplyvu hydrodynamických parametrov*

Bc. Simona Staňová (M2)

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

Mikrofluidická technológia predstavuje moderný prístup k príprave lipidových nanočastíc, ktorý umožňuje ich kontinuálnu tvorbu s vysokou presnosťou, reprodukovateľnosťou a možnosťou škálovania. Cieľom tejto práce je preskúmať vplyv procesných parametrov mikrofluidickej syntézy, najmä celkového prietoku a pomeru fáz, na vznik, veľkosť a morfológiu lipozómov pripravených z rôznych fosfolipidových zmesí. Lipozómy boli pripravované pomocou mikrofluidického miešacieho systému s T-geometriou, pričom podmienky miešania boli systematicky menené s cieľom optimalizovať štruktúrne a fyzikálne vlastnosti častíc. Charakterizácia prebiehala metódami dynamického rozptylu svetla (DLS) a transmisnej elektrónovej mikroskopie (TEM), ktoré umožnili detailné hodnotenie veľkosti, homogenity a morfologických charakteristík pripravených častíc. Získané výsledky potvrdzujú výrazný vplyv hydrodynamických parametrov a zloženia lipidovej fázy na samousporiadavanie lipidov počas kontinuálnej mikrofluidickej syntézy. Práca prispieva k lepšiemu pochopeniu vzťahu medzi podmienkami prípravy a štruktúrnymi vlastnosťami lipidových nanočastíc a poskytuje základ pre ich racionálnu optimalizáciu pre špecifické aplikačné oblasti.

# *Aplikace akustických vln v mikrofluidních reaktorech*

Bc. Ondřej Stejskal (M1)

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

Tento výzkum se zaměřuje na studium akustických vln generovaných piezoelektrickým jevem pro intenzifikaci transportu hmoty v průtočných mikrofluidních zařízeních. Využití akustických vln představuje slibnou alternativu pro intenzifikaci chemických procesů oproti konvenčním metodám, jako je mechanické míchání. Použití akustických vln je šetrné k biologickému materiálu a energeticky úsporné, umožňuje kontinuální manipulaci, separaci, fokusování částic i míchání. Byla studována aplikace akustického vlnění pro zintenzivnění extrakce. Mikrofluidní čipy pro generování kapek a extrakci byly připojeny k různým druhům piezoelektrických generátorů. Jako akustické generátory byly vyzkoušeny piezokeramická tyčinka, piezokeramický disk a nebulizér, přičemž nejvhodnější se ukázal být nebulizér pro použití s extrakčním mikročipem. Pro experimenty byla jako extrahovaná látka zvolena methylčerven z důvodu snadné vizuální indikace, kdy tato látka byla extrahovaná z vody do oleje. Studoval se vliv vstupního proudu do aktuátoru na extrakční účinnost. Během experimentu bylo dosaženo pozorovatelného účinku akustických vln na zefektivnění extrakčního procesu. Dále se pracuje na generování akustických vln z piezokeramické tyčinky pomocí silnějšího generátoru RITEC RAM-10000 a integrace tyčinky přímo do mikrofluidního čipu pro dosažení lepších výsledků.

*Preparation and characterization of oral dispersible films (ODFs) prepared by continuous melt procedure*

Marek Štěpánek (B3)

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

Oral dispersible films (ODFs) represent a promising yet still underutilized dosage form for pharmaceutical administration. Their main advantage lies in their quick disintegration upon contact with saliva, making them suitable for patients who experience difficulties with common orally administered dosage forms. There are several different methods of producing ODFs, including solvent casting, compression, and continuous melting processing. Unlike batch-based procedures, continuous melt production offers a more scalable and cost-effective manufacturing alternative. The objective of this study is to find an optimal polymer combination that, when mixed with copovidone forms a functional carrier matrix for cannabidiol (CBD). The development process focused on three key aspects: the ability to form stable films determined by melting and degradation temperatures, the mechanical robustness required for handling and processing, and the disintegration performance critical to rapid dissolution after ingestion. By systematically examining these properties, this work aims to establish an optimal polymer composition that balances processability, mechanical integrity, and rapid disintegration, paving the way for efficient large-scale production of CBD-loaded ODFs.

# *Štúdium redoxne mediovej reakcie vývoja kyslíka pre zinkovo-kyslíkovú prietokovú batériu*

Bc. Michal Števuliak (M1)

Školiteľ: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

S narastajúcim podielom produkcie elektrickej energie z obnoviteľných zdrojov, ktorých dodávky sú premenlivé, sa zvyšuje dopyt po vysokokapacitných úložiskách energie. Redoxné prietokové batérie (RPB) predstavujú potenciálne riešenie tohto problému vďaka ich jednoduchej škálovateľnosti a potenciálne dlhej životnosti oproti súčasne využívaným vysokokapacitným akumulátorom. Na trhu overenú vanádiovú RPB limituje vyššia cena a toxicita elektrolytu. Preto sa hľadajú lacnejšie a bezpečnejšie alternatívy. V mojom príspevku je navrhnutý a testovaný koncept hybridnej prietokovej batérie (HPB) na báze zinok-vzduch s dvojzložkovým kladným elektrolytom, vďaka ktorému prebiehajú redoxne mediovane reakcie vývoja a redukcie kyslíka. Tento prístup by mohol znížiť energetickú náročnosť a tým zvýšiť účinnosť technológie oproti štandardnej batérii s priamym vývojom a redukciou kyslíka na kladnej elektróde. V tejto práci boli študované možnosti vývoja kyslíka pomocou mediátora na báze hexakynožeľezitanového komplexu na katalytickom materiáli. Bol testovaný vplyv vlastností katalyzátorov na báze uhlíku a niklu a prevádzkových podmienok na časovo priestorovú intenzitu reakcie. S optimalizovaným systémom bol overený inovovaný koncept s využitím symetrického laboratórneho článku RPB.

# *Příprava strukturovaných Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> katalyzátorů*

Ondřej Štoček (B2)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí Ph.D.

Strukturované katalyzátory představují moderní řešení pro řadu průmyslových procesů, kde je požadován vysoký průtok reakční směsi a zároveň nízká tlaková ztráta. Oproti klasickým sypaným katalyzátorům vykazují výrazně nižší tlakovou ztrátu a nižší omezení vnitřní difuzí. Tato práce se zaměřuje na přípravu a charakterizaci strukturovaného katalyzátoru, jehož aktivní vrstvu tvoří Ni/ $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Katalyzátory tohoto typu nacházejí uplatnění například při výrobě vodíku reformingem zemního plynu či rozkladem amoniaku. Katalyzátor byl připraven metodou kapilární impregnace porézního nosiče  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> roztokem Ni(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>. Po kalcinaci práškového katalyzátoru byla následně vytvořena vodná suspenze určená k nanesení na kordieritový monolitický substrát s kanálky o hustotě 300 cpsi. Cílem bylo dosáhnout rovnoměrné a mechanicky stabilní katalytické vrstvy po celé délce kanálků. Charakterizace nanesené vrstvy byla provedena pomocí skenovací elektronové mikroskopie (SEM), která umožnila detailní pozorování morfologie povrchu a porézní struktury nanesené vrstvy. Na základě získaných výsledků a dílčích úprav postupu bude možné optimalizovat proces nanášení tak, aby se zlepšila účinnost katalyzátoru a současně minimalizovaly materiálové ztráty během přípravy.

## *Kontinuální odsolování roztoků chloridu zinečnatého pomocí modelového elektrodialyzního systému.*

Bc. Matěj Valta (M1)

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

Tento semestrální projekt navazuje na bakalářskou práci zaměřenou na elektrodialýzu (ED) roztoků  $\text{ZnCl}_2$  s novou, optimalizovanou konfigurací diluátního kanálu využívající gravitační konvekci. Cílem tohoto projektu je hloubková voltampérová charakteristika a optimalizace provozních podmínek. Měřením voltampérových charakteristik při proměnných parametrech (průtok, proud nebo míra odběru horní vrstvy). Snahou bylo identifikovat limitní proud, stanovit oblast stabilního provozu. Projekt tak poskytuje klíčová data pro ověření stability a efektivního využití navržené technologie v průmyslovém měřítku.



# Simulace hoření elektromobilu v uzavřeném prostoru

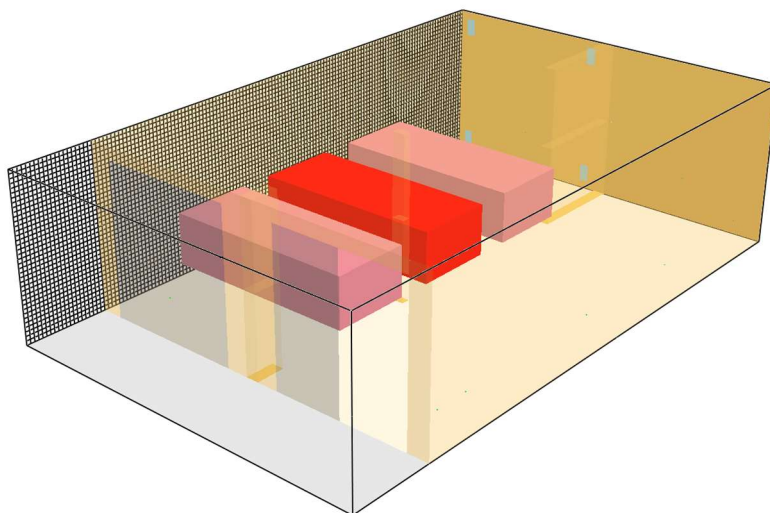
Bc. Ondřej Vaněček (M1)

Školitel: Ing. Vojtěch Šálek Ph.D.

Elektromobily (EV) se v posledních letech staly běžnou součástí silničního provozu a jejich dostupnost neustále roste. S jejich rozšířením však přicházejí i specifická rizika, zejména v případě požáru. Hoření trakčních baterií, provázené jevem thermal runaway, může probíhat i bez přístupu kyslíku a je doprovázeno uvolňováním značného množství tepla a toxických látek. Tato rizika jsou obzvláště závažná v uzavřených prostorech, jako jsou podzemní garáže, kde dosud chybí jasné stanovené požadavky na zajištění požární bezpečnosti.

Práce se zabývá modelováním požáru elektromobilu (EV) v garážovém prostoru pomocí softwaru Fire Dynamics Simulator (FDS). Cílem bylo vytvořit a systematicky kalibrovat numerický model na základě dat z reálného experimentu požáru EV v garážovém prostoru. Během kalibrace modelu byly testovány různé úrovně komplexity definování tepla uvolňovaného při hoření.

Výstupem práce je prvotní model, který vykazuje dobrou shodu s experimentálně změřenými teplotami a tepelnými toky. Tento model představuje výchozí bod pro budoucí parametrické studie, umožňující bezpečně a efektivně testovat vliv různých protipožárních opatření (např. sprinklerů, nucené ventilace) nebo scénářů šíření požáru.

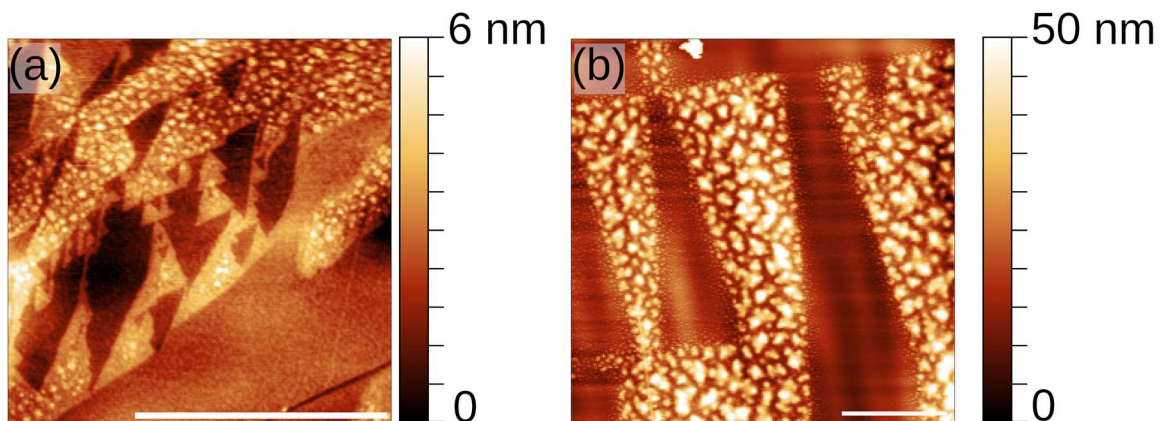


## *Sliding ferroelectric catalyst for carbon nanoparticle generation*

Johana Vaníčková (B2)

Školitel: Dr. Timotheus Verhagen (FZÚ AV ČR v.v.i.)

Two-dimensional (2D) van der Waals materials, when assembled with a deliberate interlayer twist, can manifest emergent sliding ferroelectricity. Using micrometre-scale ferroelectric domains as spatially resolved reaction templates, we demonstrated that such ferroelectric interfaces exhibit intrinsic catalytic activity under ambient, room temperature conditions. Spatially extensive ferroelectric domains, extending over tens of micrometres, facilitate the direct observation of hydrocarbon-to-carbon nanoparticle transformation within moiré-patterned regions exhibiting favourable polarization orientations. Notably, the reaction kinetics are markedly enhanced upon exposure to broadband white-light irradiation. These findings underscore the significant promise of moiré-engineered 2D heterostructures for applications in heterogeneous catalysis and precision surface chemistry modulation.

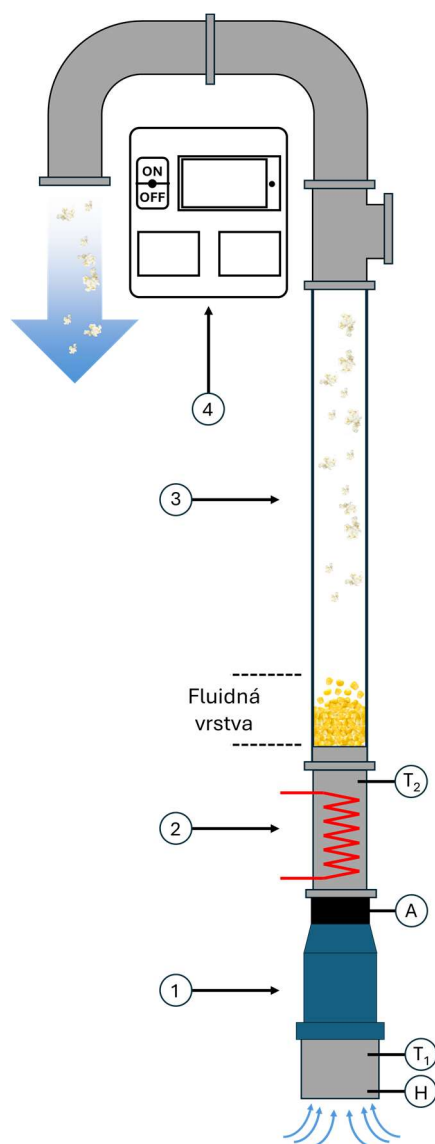


# Reaktor na výrobu pukancov ako vzdelávací nástroj na výučbu chemického inžinierstva.

Mark Vashchenchuk (B3, Slovenská technická univerzita v Bratislave)

Školiteľ: Ing. Tomáš Kurák, PhD.

Mnoho záujemcov o štúdium chemického inžinierstva nemá jasnú predstavu, čím sa tento odbor zaoberá. Cieľom projektu je priblížiť podstatu chemického inžinierstva na príklade návrhu zariadenia na výrobu pukancov. Na tento účel bol zvolený reaktor s fluidným lôžkom, ktorý umožňuje produkciu a separáciu pukancov v jednom procese. Sériou experimentov boli získané potrebné údaje na vytvorenie matematického modelu zariadenia. Výsledkom práce bude fyzické zariadenie spolu s jeho matematickým dvojčatom, ktoré poslúži na propagačné a popularizačné účely chemického inžinierstva.



# *Development of Stable Emulsions for Sustainable Hair Dyes from Peruvian Plants*

Bc. Sebastián Guillermo Vásquez Lecaros (M1)

Supervisor: Ing. Anna Vanluchene, Ph.D.

The aim of this research is to enhance and upgrade the formulation of the permanent hair dyes made out from peruvian plants and its impact in the manufacturing process of this product. It is the continuation of the bachelor thesis with the title of *Process design of permanent hair dyes made from plants*. This project started in March 2022 in Lima, Peru with Universidad de Ingeniería y Tecnología – UTEC alongside the supervision of PhD Patricia Araujo Pantoja from the department of Chemical Engineering from UTEC. To reduce the damage caused to the hair by ammonia and hydrogen peroxide, the use of monoethanolamine and peracetic acid respectively was chosen. It was also decided to use alternative oxidation coupling compounds to para phenyldiamine (PPD) to reduce the risk of poisoning. The coupling compounds chosen were 4-aminophenol and resorcinol. The afore mention upgrade includes the increase of emulsion stability by the addition of peruvian-plant based components and test out dyeing efficiency and time. Density and viscosity will be measured in order to optimize raw material costs. The emulsion stability will be measured as well in order to increase the final product shelf time and make sure that the product will have good quality.

# Model protiproudého praní buničiny na varně Kamyr v papírně Mondi Štětí a.s.

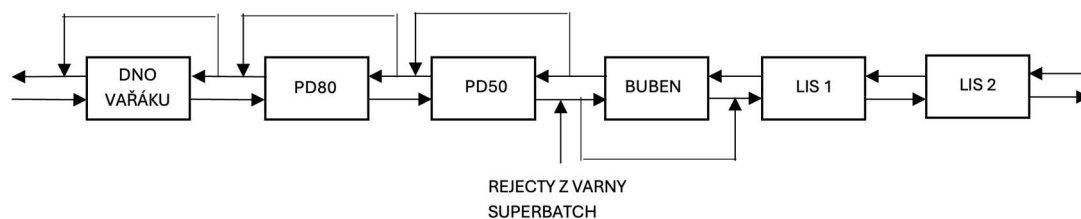
Bc. Mikuláš Vaszi (M2)

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

Na začátku roku 2025 byl v papírně ve Štětí otevřen nový papírenský stroj PM10. Tato inovace vyžadovala úpravu technologie a navýšení kapacity všech provozů předcházejících papírenským strojům. Konkrétně kontinuální varna Kamyr, odkud je buničina posílána mimo jiné právě na PM10, byla celá přestavěna. Na prací lince byla přidána nová zařízení a existující aparáty byly rozšířeny o možnost obtoků, aby kapacitně stačily i při provozu za vyššího výkonu kvůli novému stroji. Model pro původní prací linku vytvořil v programu MS Excel profesor Potůček z pardubické univerzity a nyní bylo potřeba tento model aktualizovat podle současného uspořádání provozu.

Praní buničiny je z technologického hlediska protiproudá extrakce/vyluhování. Účelem je vyčistit čerstvě uvařenou buničinu od černého výluhu (nezreagované chemikálie a produkty vaření) pro další zpracování. Na prací lince varny Kamyr se vyskytují různá prací zařízení, jako tlakové difuzory (PD), zahušťovací buben a prací lisy. Za prací zařízení se rovněž považuje spodní část vařáku, kam se přivádí špinavý filtrát z prací linky za účelem ochlazení reakční směsi a zastavení varné reakce. Praní je vedlejší účinek, ke kterému při tomto kroku dochází.

Za účelem detailní simulace a následné optimalizace varny Kamyr byl proto vytvořen matematický model procesu v jazyce Python, který poslouží technologům k simulaci prací linky při různých scénářích zapojení pracích aparátů.



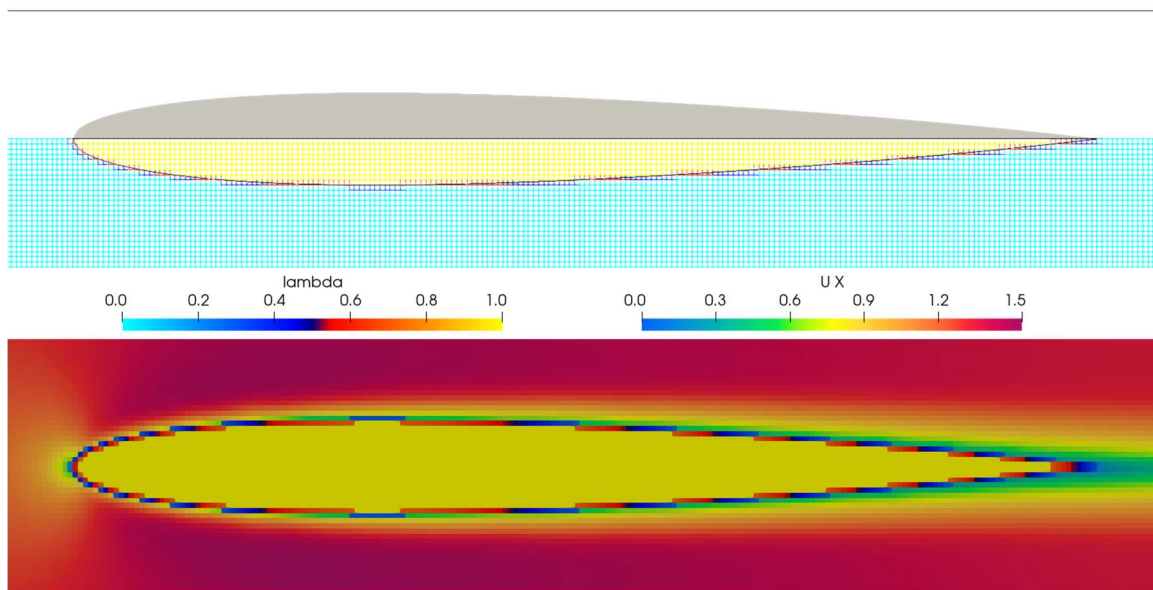
Obrázek 3: Schéma prací linky

# *Vývoj automatizovaného prostředí pro testování řešiče s vnořenou hranicí a Reynoldsovým středováním: Vyhodnocení vlivu struktury výpočetní sítě*

Vít Večerník (B3)

Školitel: Ing. Martin Isoz, Ph.D.

V naší laboratoři vyvíjíme řešič pro proudění tekutin kombinující metodu vnořené hranice s Reynoldsovým středováním. Náš řešič umožňuje pomocí vnořené hranice promítat komplexní geometrie do výpočetní sítě, aniž by muselo dojít k její deformaci, a to prostřednictvím skalárního pole  $\lambda$  a úpravy řídicích rovnic. V rámci vývoje byl dosud řešič testován pouze na jednoduchých ortogonálních sítích. Cílem mé práce je rozšířit testování na složitější typy sítí a pro usnadnění testování vytvořit automatizované testovací prostředí v jazyce Python, které celý proces urychlí. Pomocí tohoto prostředí je testován vliv trojúhelníkové sítě a sítě s náhodným posunutím uzlů na různé simulace, např. proudění kolem profilu NACA nebo zpětné proudění za schodem, s využitím modelů turbulence  $k-\epsilon$ , realizable  $k-\epsilon$ ,  $k-\omega$  a  $k-\omega$  SST. Hodnocen je zejména vliv sítě na stabilitu výpočtu, konvergenci a přesnost výsledků v porovnání se standardním řešičem bez vnořené hranice.



# *Stanovení hodnot $k_{Ga}$ na sypané výplni NeXRing 1.2 v absorpční koloně*

Bc. Yuliia Viktosenko (M1)

Školitel: Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.

Absorpce patří mezi klíčové separační procesy chemického inženýrství a hraje zásadní roli při snižování emisí škodlivin z průmyslových zdrojů. Návrh absorpčních kolon podle rate – based přístupu vyžaduje znalost transportních a hydraulických charakteristik výplní, mezi něž patří objemový koeficient přestupu hmoty v plynné fázi  $k_{Ga}$ . Vzhledem k rozmanitosti používaných systémů a výplní není možné u všech experimentálně stanovit potřebné charakteristiky, a proto se k predikci často využívají literární modely. Jejich přesnost však bývá omezena při přenosu na jiné systémy, což může vést k chybnému návrhu kolonových aparátů. Cílem této práce bylo měření  $k_{Ga}$  na systému vzduch – SO<sub>2</sub>/voda – NaOH na výplni NeXRing 1.2 v koloně o průměru 300 mm při hustotách zkrápění  $B = 5, 10, 20$  a  $40 \text{ m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$ . Naměřené hodnoty byly porovnány s daty pro systém NH<sub>3</sub>/H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> a na jejich základě byl stanoven exponent  $m$ , který vyjadřuje závislost  $k_{Ga}$  na difuzním koeficientu. Získaná data byla dále využita k ověření platnosti vybraných modelů na moderní sypané výplni čtvrté generace. Výsledky přispívají k zpřesnění návrhových výpočtů absorpčních kolon a k rozšíření databáze experimentálních dat potřebných pro vývoj přesnějšího modelu.

# *Tracking the invisible: Gas Diffusion in Polymer melts through Optimized Simulation and Experiment*

Bc. Vanesa Virsiková (M1)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Tracking the invisible movement of gases within molten polymers reveals a hidden world of molecular motion that influences the quality and sustainability of modern plastics. This work investigates the diffusion of volatile organic compounds (VOCs) in polymer melts, including HDPE, LLDPE, and recycled polypropylene, under processing-relevant conditions. The principal motivation of this work is polymer recycling. Experiments using a custom high-temperature setup confirmed that diffusion depends on temperature. Measurements for diffusing compounds with higher molar mass proved to be inconsistent, likely due to condensation effects. To overcome this, the apparatus has been upgraded to allow for more stable measurements. In parallel, the Python-based diffusion model is being developed and refined to improve data processing and to support an open-science approach for better understanding of gas transport in polymer processing.



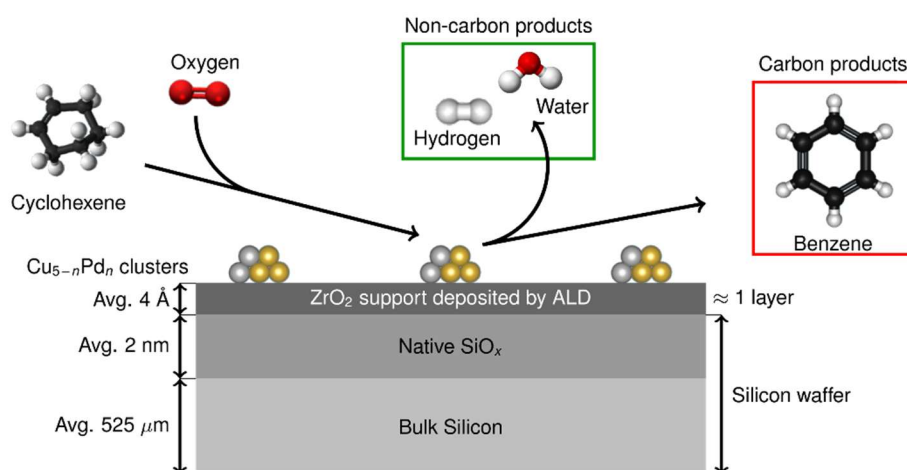
# Atomically Precise CuPd Pentamer Clusters for Catalytic Dehydrogenation of Cyclohexene

Petr Víték (B3)

Supervisor: RNDr. Štefan Vajda CSc., Dr.habil.

The subnanometer size of the clusters grants them different properties compared to bulk materials, owing to quantum effects, which become pronounced at this scale. The atoms of most metal clusters are undercoordinated, making even minor changes in their composition or size more pronounced than in the bulk material. In addition, support influences the clusters through the cluster-support interaction by altering the electronic structure of the clusters. This provides us with an additional parameter with which the catalytic properties can be fine-tuned.

In this study, atomically precise  $\text{Cu}_{5-n}\text{Pd}_n$  ( $0 \leq n \leq 5$ ) clusters were deposited on ultra-thin zirconia ( $\text{ZrO}_2$ ) support and tested during cyclohexene dehydrogenation. To investigate the sole effect of composition on the activity and selectivity of the nanocatalyst, the cluster size and metal loading were kept constant for each sample. It was shown that replacing even one atom of Cu with atom of Pd had a significant effect on the catalytic properties, altering the activity while maintaining 100% selectivity toward benzene. The results revealed that under given reaction conditions, which were set for oxidative dehydrogenation (ODH), the reaction produced not only  $\text{H}_2\text{O}$ , but also  $\text{H}_2$ . It was found that oxygen is crucial for the reaction and by adjusting the oxygen concentration the selectivity toward  $\text{H}_2$  can be modified. This system can be used as a liquid organic hydrogen carrier (LOHC), as LOHCs represent a potentially energy-efficient solution for hydrogen storage.



**Figure 1: Schematic representation of the dehydrogenation of cyclohexene on the surface of the nanocatalyst. Cyclohexene is converted to benzene during which water and hydrogen are formed.**



# *Příprava a charakterizace teplotně-responsivních mikrorobotů pro studium mechanostimulace*

Alex Vrabec (B3)

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

Za účelem studia vlivu cyklického mechanického namáhání na buňky vazivové tkáně mohou být tyto buňky enkapsulovány v hydrogelu, který lze následně opakovaně roztahovat hydrogelovým mikroaktuátorem, obsahujícím ve své teplotně responsivní části pNIPAM, jehož ohřev způsobí reverzibilní tvarovou změnu a následné roztažení úchytných konců mikroaktuátoru. Příprava mikroaktuátorů probíhá metodou stop-flow litografie v mikrofluidním čipu, užívající k polymerizaci osvit UV světlem přes fotomasku požadovaného tvaru. Díky přítomnosti nanočástic koloidního zlata v termoresponsivní části aktuátoru lze její ohřev a následné smrštění vyvolat rovněž jejím osvětlením laserem, přičemž je teplo generováno pomocí plasmonové rezonance. Tato práce se zabývá optimalizací složení mikroaktuátorů s cílem dosáhnout požadované míry jejich roztažení při biologicky relevantních teplotách a umožnit tak cyklickou mechanostimulaci buněk co nejbližší se podobající jejich namáhání přirozeně se vyskytujícímu v tkáních šlach a vazů.

## Vývoj a optimalizace produktu Oil Marbles

Tri Minh Vu (B2)

Školitel: Ing. Ondřej Rycheký, Ph.D.

Tato práce se zaměřuje na vývoj produktů na bázi Oil Marbles, což jsou pevné lipidické částice. Zmíněné částice jsou složeny z lipidického jádra, které obsahuje účinnou látku, emulsifikační činidlo, ztužovadlo a ethanol, a dále ze slupky z pevných částic na bázi hydroxypropylmethylcelulózy (HPMC), které chrání jádro od koalescence. Samotná vybraná účinná látka je při pokojové teplotě voskovitá a lepivá, což není ideální pro její průmyslové zpracování. Současné dostupné formulace na trhu vyžadují od uživatele alespoň 8 kapslí pro splnění denní dávky. Proto za účelem zvyšování komfortu pro uživatele a optimalizace výrobního procesu došlo k reformulaci produktu na Oil Marbles.

Na konci výrobního procesu je třeba odstranit ethanol sušením, které je energeticky a časově náročné. Proto je cílem práce optimalizovat sušicí proces. V rámci této práce byly porovnány 3 metody sušení, konkrétně volné sušení, konvekční sušení a sušení pod sníženým tlakem. Experimentálně byl naměřen úbytek hmotnosti vzorku v čase a podle naměřených dat byl sestaven jeho vývoj pomocí exponenciální regrese.

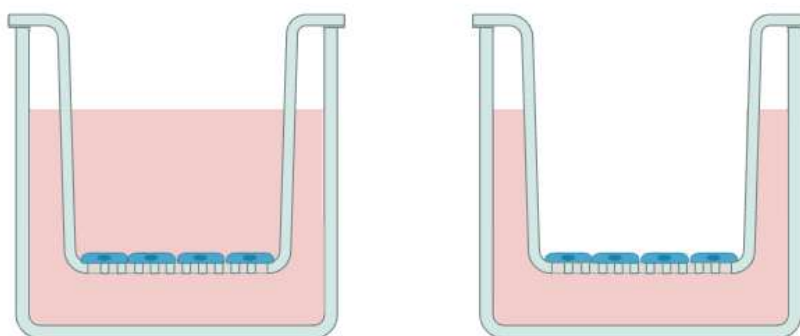


# Studium nanokrystalických formulací léčiv v pokročilém *in vitro* modelu plic

Lenka Vyhlídalová (B3)

Školitel: Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.

Orálně podávaná léčiva často narážejí na problémy s nízkou biologickou dostupností. To je způsobeno především jejich slabou rozpustností ve vodě, citlivostí na prostředí trávicího traktu a výrazným metabolickým zpracováním při prvním průchodu játry (tzv. „*first pass effect*“). Vhodnou alternativou může být inhalační podání nanokrystalů léčiva ve formě aerosolu přímo do plic. Tento způsob podání může zlepšit biologickou dostupnost léčiva, snížit množství nevyužité dávky a zvýšit celkovou účinnost léčiva pro pacienta. Metoda je vhodná jak pro léčiva určená k léčbě onemocnění plic, tak i pro léčiva působící systémově. Tato práce se zaměřuje na vytvoření fyziologicky relevantního *in vitro* modelu plicní bariéry, na kterém lze testovat vstřebávání vybraných formulací. Nanokrystaly připravené metodou mokrého mletí byly otestovány na dvou typech buněčných kultur – v ponořeném systému a na rozhraní kapalina-vzduch (Obr. 1). U modelu na rozhraní kapalina-vzduch byla pozorována nižší propustnost než u ponořeného modelu.



**Obr. 1** Dva typy buněčných kultur – systém ponořený a na rozhraní kapalina-vzduch

## *Development of an in vitro method for measuring substance release from liposomes*

Hubert Waněk (B3)

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

For a drug to work in the body, it must first reach its target site. This often means it must pass through one or more biological membranes, for example, from the intestine into the blood or from the blood into a cell. The ability of a substance to cross these barriers is called permeability and it is therefore a key factor in drug development. It directly influences how a drug is absorbed, distributed throughout the body, and how effective it will be. This work is focused on developing a method and finding optimal conditions for measuring the leakage of substance that is not influenced by the presence of liposomes that are used to simulate biological membrane. This method uses 1,10-phenanthroline as the permeating probe encapsulated inside liposomes. As the substance crosses the phospholipid membrane, it reacts with  $\text{Fe}^{2+}$  ions present in the outside solution and forms a stable, orange-colored complex. The permeation is further measured using UV-Vis spectrometer by tracking the absorbance increase. The work also evaluates the method's sensitivity and the stability of the complex.

# *Převedení vsádkové centrifugace na polovsádkovou při přípravě glukanových částic*

Bc. Martin Weisl (M2)

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

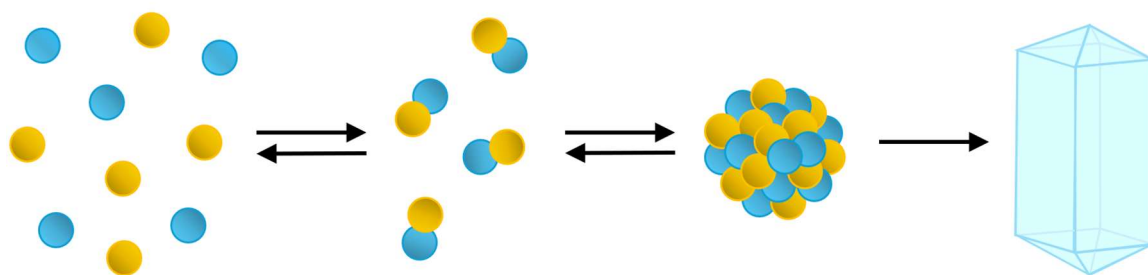
Glukanové částice jsou mikroskopické struktury získávané separací z kvasinek *Saccharomyces cerevisiae*. Příprava částic se skládá ze třinácti po sobě jdoucích kroků zahrnujících kyselou a alkalickou hydrolýzu za zvýšených teplot a řadu promývacích kroků vodou a organickými rozpouštědly. Po dokončení každého kroku je suspenze před zavedením nového činidla centrifugována. V současnosti je centrifugace prováděna vsádkově, proces je však velice časově náročný a vyžaduje mnoho lidského úsilí. V rámci tohoto projektu byla zavedena průtočná centrifugace s výtěžkem srovnatelným vůči výtěžku z původního procesu a zároveň s výraznou časovou úsporou. Podmínky jejího provozu byly úspěšně odhadnuty na základě orientačního výpočtu, předpokládá se však možnost další optimalizace. Do nového modelu jsou dále zaváděny automatizační prvky a celý systém je doplněn o díly vlastního návrhu a konstrukce. Tento polovsádkový režim také nabízí možnost scale-upu, ve smyslu zpracování většího množství materiálu, bez navýšení celkové velikosti zařízení, což by pro vsádkovou variantu nebylo možné. Jedním z cílů tohoto projektu je navýšení celkového množství produktu na desetinásobek původní hmotnosti dosahované vsádkovým procesem.

# Matematický model nukleace šťavelanu vápenatého v elektrickém poli

Bc. Kateřina Zedníčková (M1)

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

Elektrické pole umožňuje řízenou interakci elektricky opačně nabitých reaktantů a jejich následnou reakci za vzniku definovaných produktů, čehož lze využít při výrobě krystalických či amorfních nano- a mikročástic nebo při reakcích komplementárních biologických molekul, například antigenů a protilátek. Jako modelová reakce byla zvolena tvorba a následná precipitace šťavelanu vápenatého, při níž se v nosném elektrolytu setkávají šťavelanové a vápenaté ionty, dochází k přesycení a vznikají krystalky či amorfni částice této soli, jež je základní složkou ledvinových kamenů. Proces precipitace a krystalizace probíhá ve dvou krocích. Prvním je nukleace, kdy vzniká nová pevná fáze v podobě zárodečných jader, po níž následuje růst těchto jader postupným zabudováváním částic z přesyceného roztoku. Byl vytvořen jednorozměrný model nukleace šťavelanu vápenatého ve vnějším elektrickém poli, v němž se nejprve v roztoku tvoří iontové páry a při dostatečném přesycení dochází k nukleaci, pro jejíž popis byla použita klasická nukleační teorie. Vyvinutý matematický model umožňuje vypočítat rozložení koncentrací jednotlivých složek (iontů, iontových párů a jader) a elektrického pole podél zvoleného směru. V další fázi výzkumu bude do modelu zahrnut růst krystalů s využitím modelu populační bilance.



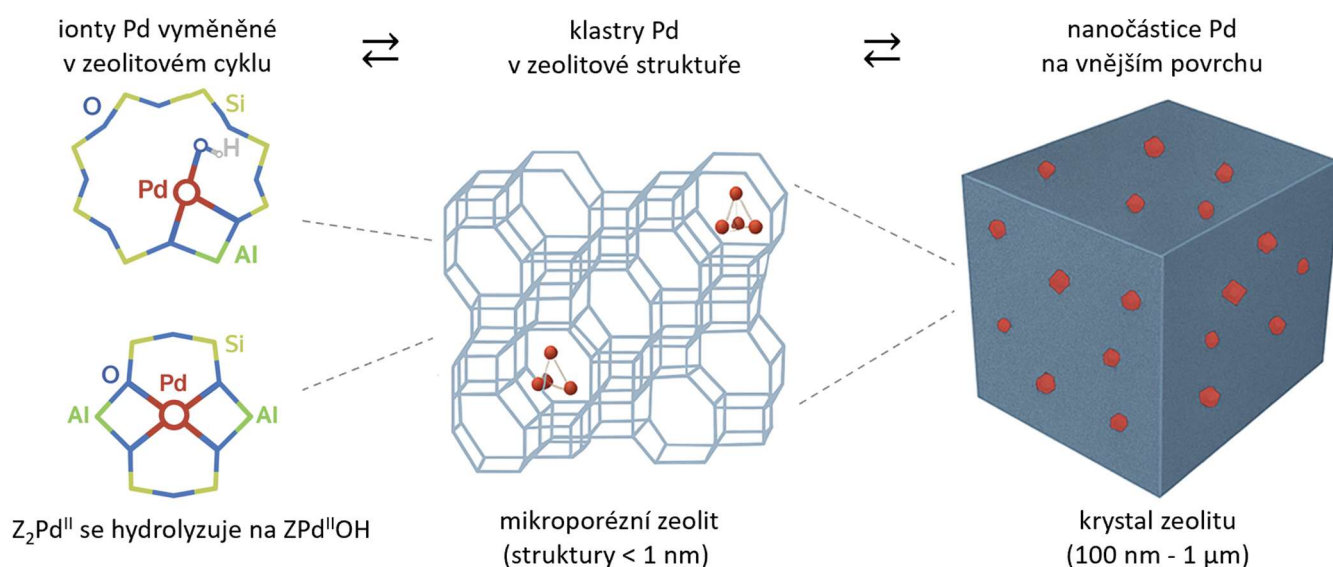


# Vliv provozních podmínek na funkci pasivního adsorbéru $\text{NO}_x$

Bc. Lukáš Ziebiker (M2)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

V současnosti je kladen stále větší důraz na snižování emisí, proto je každý spalovací motor vybaven katalytickou soustavou, přeměňující plynné škodliviny ( $\text{CO}$ ,  $\text{NO}_x$ ,  $\text{C}_x\text{H}_y$ ) na zdravotně nezávadné produkty. U vznětových motorů jsou oxidy dusíku odstraňovány systémem selektivní katalytické redukce (SCR). Ten je však účinný až při teplotách nad  $200^\circ\text{C}$ , jichž motor při studeném startu nedosahuje. Před SCR lze zařadit pasivní adsorbér  $\text{NO}_x$  (PNA), který při nízkých teplotách oxidy dusíku zachytává a po dosažení provozní teploty je uvolňuje. V této práci jsou studovány vzorky zeolitu SSZ-13 impregnovaného Pd. Katalyzátor je po kalcinaci aktivován při  $750^\circ\text{C}$ , kdy se Pd iontově vyměňuje do zeolitové struktury. Během opakovaného provozu za nízkých teplot se katalyzátor částečně deaktivuje – vlivem přítomného  $\text{CO}$  se  $\text{Pd}^{\text{II}}$  redukuje na  $\text{Pd}^0$  a shlukuje do větších nanočástic. Provedené experimenty v laboratorním reaktoru simulují reálné podmínky ve výfukovém systému, kdy se PNA opakovaně deaktivuje během studených startů a následně reaktivuje při zvýšené provozní teplotě. Adsorpční kapacita jednotlivých vzorků je vyhodnocována z integrálu koncentračních profilů  $\text{NO}_x$ . Získaná data přispívají k hlubšímu pochopení kinetiky jednotlivých dějů a vlivu provozních podmínek na aktivitu PNA katalyzátorů.



# Ústav fyziky a měřicí techniky (444)

## ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

RNDr. Pavel Galář, Ph.D.

## SEZNAM SEKČÍ

- Fyzika a měřicí technika I
- Fyzika a měřicí technika II

SPONZOŘI ÚSTAVU FYZIKY A MĚŘICÍ TECHNIKY



**LABORATORY IMAGING s.r.o.**  
Image Analysis Systems



# Fyzika a měřicí technika I

MÍSTO: B220

## KOMISE

- prof. Dr. Ing. Vrnata Martin (předseda)
- Ing. Novotná Michal, Ph.D.
- Ing. Karolína Křížová
- Ing. Laura Thonová
- Mgr. Marta Chanová, Ph.D. (1. LF UK)

## SOUTĚŽÍCÍ

- Alexandra Angelovičová – Vplyv netermálnej plazmy na priebeh klíčenia semien (B3, Dr. Mgr. Jana Jirešová)
- Bc. Lucie Dorazilová – Bakteriální rezistence na plazmatem aktivovanou vodu (M2, Dr. Mgr. Jana Jirešová)
- Bc. Christopher William Heinz – Vliv netermálního plazmatu na povrchové vlastnosti semen (M1, Dr. Mgr. Jana Jirešová)
- Romana Remeňová – Zmeny chemických a mechanických vlastností polymérnych materiálov po expozícii netermálnou plazmou (B3, Ing. Ladislav Fišer, Ph.D.)
- Bc. Adriana Šedová – Charakterizace plazmatem aktivované vody (M1, Dr. Mgr. Jana Jirešová)
- Bc. Hana Šikolová – Vliv netermálního plazmatu na elektronické součástky (M1, Ing. Ladislav Fišer, Ph.D.)
- Barbora Spodniaková – Návrh metodiky pro ověření možnosti vzniku rezistence na netermální plasma (B3, Dr. Mgr. Jana Jirešová)

# Fyzika a měřicí technika II

MÍSTO: B212

## KOMISE

- doc. Ing. Jaroslav Hofmann, CSc. (předseda)
- Ing. Ladislav Fišer, Ph.D.
- Ing. Jitka Kopecká, Ph.D.
- Ing. Anna Machková
- RNDr. Martin Ledinský, Ph.D. (FZÚ AVČR)
- Ing. Vlastislav Kašpar, Ph.D. (ÚJV Řež)

## SOUTĚŽÍCÍ

- Bc. Lucie Kasýková – Syntéza křemíkových nanostruktur atypických rozměrů pomocí inovativní geometrie plazmatických reaktorů (M1, RNDr. Pavel Galář, Ph.D.)
- Miriam Melišová-Čugová – Optimization of Light Emission from Silicon Optical Centers in Diamond for Advanced Security Applications (B3, RNDr. Pavel Galář, Ph.D.)
- Daniela Mlynárová – Interakce nanodiamantů s proteiny na úrovni jednotlivých částic: studie pomocí AFM (B3, RNDr. Pavel Galář, Ph.D.)
- Bc. Denis Najman – Tepelně stimulované jevy jako nástroj pro charakterizaci materiálů (M2, Ing. Bc. Michal Novotný, Ph.D. )
- Bc. Cyril Popek – Termodiagnostika mikrosenzorů pro detekci plynů (M2, Ing. Přemysl Fitl, Ph.D.)
- Jakub Šulc – Vliv velikosti křemíkových nanočástic na tvorbu proteinové korony (B3, Ing. Filip Matějka)
- Bc. Michal Vašíček – Od plazmatu k funkčnímu povrchu: úpravy SiQDs a jejich vliv na strukturu a reaktivitu (M1, RNDr. Pavel Galář, Ph.D.)

# *Vplyv netermálnej plazmy na priebeh klíčenia semien*

Alexandra Angelovičová (B3)

Školiteľ: Dr. Mgr. Jana Jirešová

Plazma sa považuje za štvrté skupenstvo hmoty. Bežne sa s ňou stretávame v prírode v podobe bleskov, polárnej žiary či hviezd. Plazma má pre nás aj široké a veľmi užitočné využitie. Jednou z oblastí využitia plazmy je aj poľnohospodárstvo. Ukazuje sa totiž, že plazma má potenciál pri zlepšení rastu rastlín, zvyšuje ich odolnosť a zlepšuje ich klíčivosť. Mnohé druhy rastlín klíčia veľmi pomaly za bežných podmienok a potrebujú napríklad silno kyslé prostredie, čo je však celkom nepraktické pre bežných poľnohospodárov. Tento problém môžeme riešiť využitím netermálnej plazmy, ktorá nevyužíva vysoké teploty, a preto je vhodná na ošetrovanie biologických materiálov, ako sú semená. V tejto práci sa budeme zaoberať vplyvom netermálnej plazmy na klíčivosť semien. Pozornosť budeme tiež venovať zmenám pH a mernej vodivosti vodného roztoku semien kontrolnej skupiny a skupiny ošetrenej netermálnou plazmou pomocou pH elektródy a vodivostnej sondy. Tieto parametre nám pomôžu lepšie porozumieť tomu, ako plazma ovplyvňuje chemické prostredie potrebné pre rast. Ďalšou časťou tejto práce bude porovnávanie obsahu chlorofylu a karotenoidov kontrolnej skupiny a skúmanej skupiny.



Obr.1 – kontrolná skupina



Obr.2 – skupina ošetrená plazmou

# Bakteriální rezistence na plazmatem aktivovanou vodu

Bc. Lucie Dorazilová (M2)

Školitel: Dr. Mgr. Jana Jirešová

Bakteriální rezistence na antibiotika představuje v současné době velkou výzvu pro zdravotnictví. Plazmatem aktivovaná voda (PAW) se jeví jako perspektivní dezinfekční metoda využívající reaktivní kyslíkové a dusíkové částice generované netermálním plazmatem. PAW používaná v této práci vzniká působením koronového výboje v konfiguraci hrot-hladina v režimu přechodové jiskry na destilovanou vodu. Cílem této práce je ověření možnosti vzniku rezistence na PAW u bakterie *Escherichia coli* 4517. Celkem bylo provedeno 37 pasáží s PAW a s antibiotikem chloramfenikol. Toto antibiotikum bylo zvoleno jako referenční látka – podle literatury u bakterie *Escherichia coli* na chloramfenikol rezistence vzniká. Vznik rezistence byl u bakterií ověřován stanovením minimální inhibiční koncentrace na PAW a chloramfenikol.



Obr. 2: 37. pasáže bakterie *E. coli* 4517 na chromogenním TBX agaru (V37 – voda, P37 – PAW, A37 – aPAW, F37 – chloramfenikol)

# Vliv netermálního plazmatu na povrchové vlastnosti semen

Bc. Christopher William Heinz (M2)

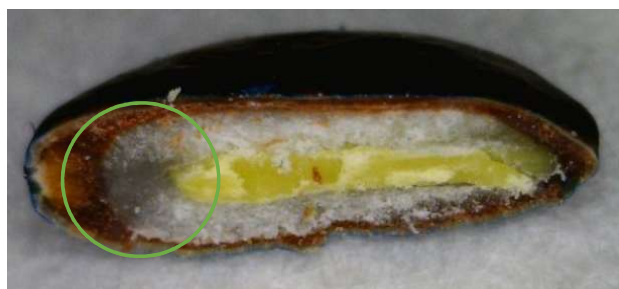
Školitel: Dr. Mgr. Jana Jirešová

Většina semen rostlin prochází obdobím dormance. U jistých semen je dormance slabá, kdy u semínka započne klíčení téměř okamžitě po zasetí. Avšak u některých semen je klidové stádium těžce přerušitelné, což může být způsobeno hormonální nerovnováhou (endogenní dormance) nebo tvrdým ochranným obalem (exogenní dormance). U bobovitých dřevin převládá exogenní dormance, kterou je semínko schopno překonat jen při extrémních podmínkách (např. velmi kyselé prostředí) za stále nízké úspěšnosti. Ošetřením semen netermálním plazmatem a plazmatem aktivovanou vodou je možné v některých případech problém exogenní dormance vyřešit.

Netermální plazma je ionizovaný plyn vznikající za působení zdroje velkého množství energie, kdy jsou elektrony molekul plynu uvolňovány z jejich atomů a stávají se volnými. Plazmatem aktivovaná voda je voda, na kterou netermální plazma působí a mění její vlastnosti. Obal semene je působením plazmatu narušen a tím je dormance prolomena. Avšak každá metoda generace netermálního plazmatu působí jiným způsobem na různé druhy rostlin. Dříve se pro nalezení vhodného ošetření pouze zvolil jeden ze způsobů expozice a po několika dnech se zjistilo, jestli semínko pozitivně reaguje. Kontrolní experimenty byly časově náročné a spotřebovalo se velké množství semínek. Tato práce se zaměřila na zjištění spojitosti mezi příjmem vody do semínka, klíčivostí a metodou expozice semene netermálnímu plazmatu. Podle množství nasáknuté vody přes obal semene lze určit, které ošetření je vhodné.



Obr. 4: Neovlivněné semínko



Obr. 4: Nasáknuté barvivo semínkem



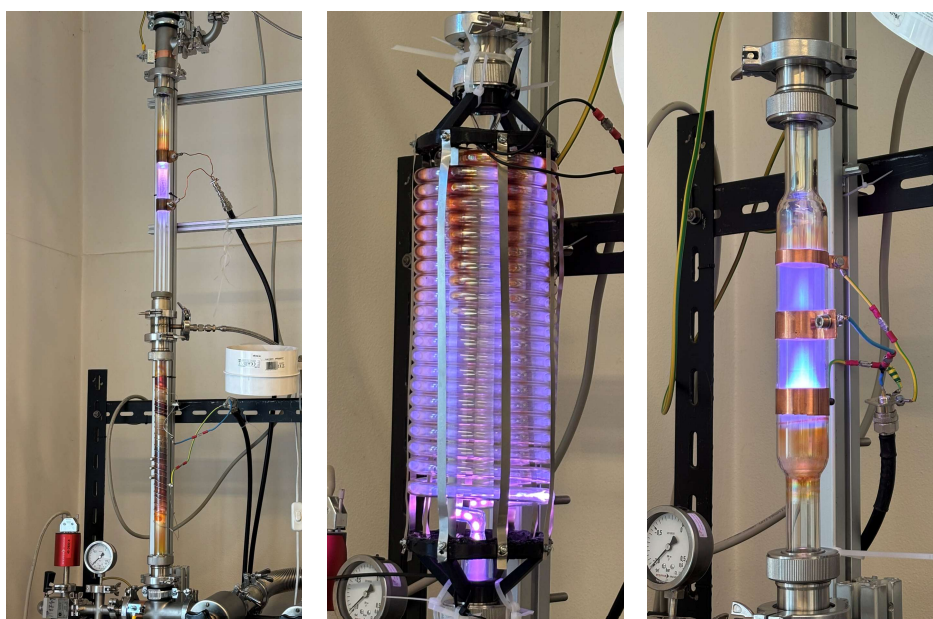
# *Syntéza křemíkových nanostruktur atypických rozměrů pomocí inovativní geometrie plazmatických reaktorů*

Bc. Lucie Kasýková (M1)

Školitel: RNDr. Pavel Galář, Ph.D.

S rozvojem moderních technologií roste význam polovodičových nanomateriálů, mezi nimiž zaujímají křemíkové nanočástice (SiNPs) významné postavení. SiNPs představují perspektivní materiál díky své netoxicitě, optickým vlastnostem a možnosti cílené povrchové úpravy. Tyto vlastnosti umožňují uplatnění SiNPs v celé řadě aplikací, například v lithiových bateriích, kde vynikají vysokou elektrickou kapacitou. Pro jejich efektivní fungování v bateriových systémech je však nutné zajistit stabilitu při opakovaných cyklech lithiace a delithiace, které způsobují výraznou objemovou expanzi materiálu. Tento problém lze minimalizovat využitím amorfních SiNPs nebo optimalizací jejich velikosti.

Cílem této práce je syntéza SiNPs o velikosti větších desítek nanometrů pro jejich potenciální využití v lithiových bateriích, které nelze přímo připravit jinou současnou technologií. K syntéze těchto částic byly použity tři inovativní geometrie plazmatických reaktorů. Tyto typy reaktorů se od sebe liší především způsobem řízení doby zdržení, což je parametr hrající klíčovou roli při růstu částic do větších rozměrů. Vlastnosti SiNPs byly analyzovány pomocí SEM a Ramanovy spektroskopie.



Obr. 1 Dvoustupňový plazmatický reaktor (vlevo), reaktor ve tvaru spirály (uprostřed) a reaktor ve tvaru baňky (vpravo).

# Optimalizácia svetelnej emisie SiV optických centier v diamante pre pokročilé bezpečnostné aplikácie

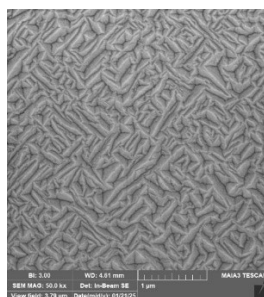
Miriám Melišová-Čugová (B3)

Školiteľ: RNDr. Pavel Galář, Ph.D.

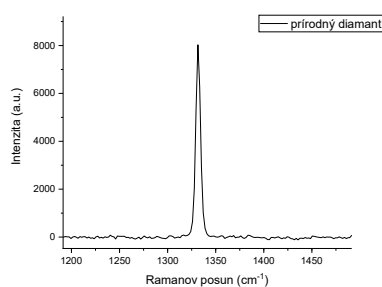
Forenzná analýza sa zameriava na identifikáciu predmetov za účelom určenia pravosti, v prípade falzifikátov ich pôvodu. Techniky falšovania sa stále zlepšujú, preto je vývoj metód pre odhaľovanie hlavným predmetom forenzných vied. V súčasnosti sa používa identifikácia fyzikálnymi značkami ako sú fluorescenčné vlákna, farbivá a hologramy aplikované na povrch materiálu. Ich nevýhodou je možnosť poškodenia či napodobenia vzhľadom na kvalitu výroby. Jedným z potenciálnych riešení sú svetlo-emitujúce nanomateriály pre vytvorenie špecifickej a trvalej značky. Kandidátom sú diamantové optické centrá na báze kremíku, SiV centrá, ktorých svetelná emisia je v blízkej infračervenej oblasti, takže sú nepozorovateľné voľným okom. Výhoda SiV centier spočíva v ich extrémnej robustnosti, nakoľko sú značky odolné voči vysokým teplotám, chemikáliám a UV žiareniu, čím prekonávajú stabilitu bežných farbív. Priestorové rozloženie SiV centier vytvára unikátnu optickú mapu, ktorá slúži ako fyzicky neklonovateľná funkcia, čím by takéto značkovanie predchádzalo vzniku falzifikátov. Táto práca sa zameriava na vytvorenie diamantových vrstiev s SiV centrami s rôznou hustotou pomocou CVD techniky, a na analýzu závislosti ich optických vlastností. Na charakterizáciu emisných vlastností bola použitá fotoluminiscenčná spektrometria. Kvalita materiálu deponovaných vrstiev bola kontrolovaná Ramanovou spektroskopiou, a pre sledovanie morfológie povrchu bola využitá skenovacia elektrónová mikroskopia.



Obr.1: Brúsený diamant



Obr.2: SEM snímka deponovanej vrstvy



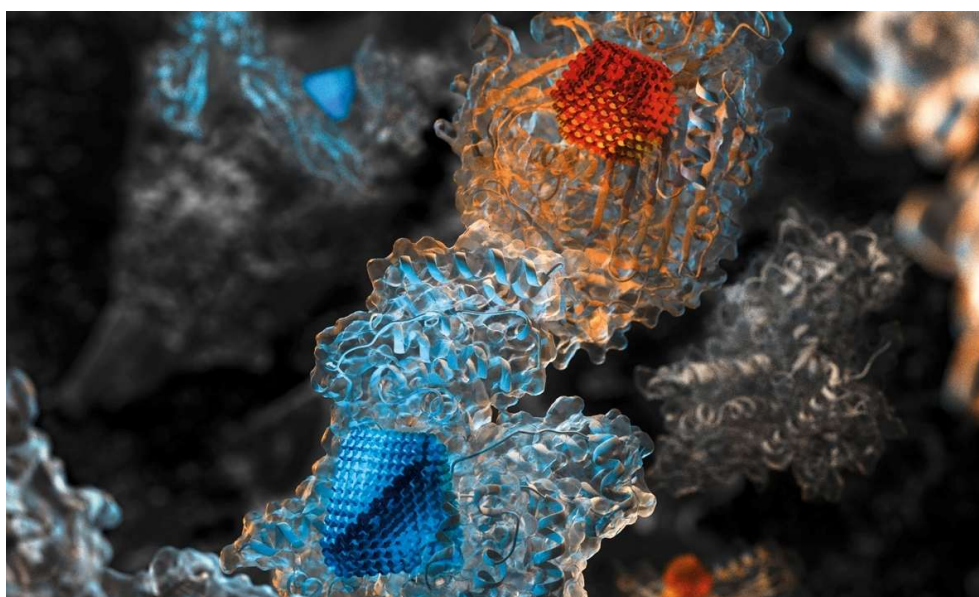
Obr.3: Ramanovo spektrum diamantu

# *Interakce nanodiamantů s proteiny na úrovni jednotlivých částic: studie pomocí AFM*

Daniela Mlynářová (B3)

Školitel: RNDr. Pavel Galář, Ph.D.

Nanodiamanty představují slibné nanočástice pro medicínské a biologické aplikace díky své biokompatibilitě, chemické stabilitě a nízké cytotoxicitě. Při kontaktu s biologickým prostředím se však jejich povrch spontánně pokrývá vrstvou proteinů – tzv. proteinovou korunou, která zásadně ovlivňuje chování nanočástic v organismu. Cílem práce je studovat vznik této korony na úrovni jednotlivých částic pomocí mikroskopie atomárních sil (AFM) v závislosti na povrchové chemii a zeta potenciálu nanodiamantů. Připravila jsem koloidní roztoky oxidovaných a hydrogenovaných detonačních nanodiamantů (DND), u nichž jsem provedla základní charakterizaci metodami dynamického světelného rozptylu (DLS) a zeta potenciálu. Poté jsem je nanasla na Si substrát a sledovala jejich morfologii a velikost pomocí mikroskopie atomárních sil (AFM) a skenovací elektronové mikroskopie (SEM). V další fázi budu sledovat interakci těchto částic s modelovými proteiny v biologicky-relevantním prostředí a jejich morfologické změny po adsorpci biomateriálu. Výsledky umožní lépe porozumět chování nanodiamantů v biologických systémech a přispějí k jejich budoucímu využití v bioinženýrství.



Obr. 1: Vizualizace interakce hydrogenovaných a oxidovaných nanodiamantů s proteiny.

# Tepelně stimulované jevy jako nástroj pro charakterizaci materiálů

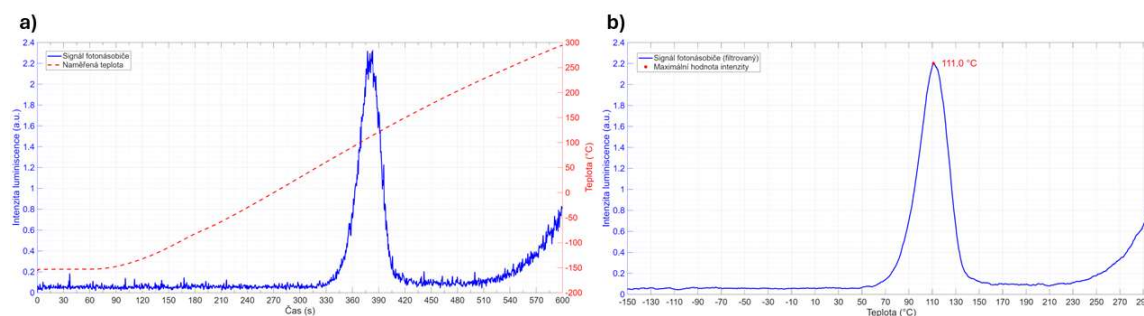
Bc. Denis Najman (M2)

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

Již od pradávna lidé pozorovali, jak se látky mění vlivem tepla, například jak kámen pohltí žár a kov se rozžhaví do ruda. Když materiál zahřejeme, začne „mluvit“. Svým světlem, uvolněnými elektrony či změnou vodivosti nám prozrazuje, co se děje v jeho nitru či na povrchu. Tepelně stimulované jevy využívají právě tuto schopnost – přeměňují prostou reakci materiálu na teplo v cenný zdroj informací o struktuře a vlastnostech tohoto materiálu.

Tato práce se zaměřuje na studium a využití tepelně stimulovaných jevů jako prostředku pro charakterizaci fyzikálních a chemických vlastností materiálů, zejména tenkých vrstev s potenciálním využitím v sensorice. Mezi sledované jevy patří tepelně stimulovaná luminiscence, desorpce a exoelektronová emise v závislosti na teplotě. Tyto procesy umožňují citlivě zkoumat defekty, nosiče nábojů, povrchové stavy a interakce na rozhraní materiálu a okolního prostředí.

Měření jsou prováděna v podmínkách ultravysokého vakua, které minimalizují vnější interference a umožňují přesnější sledování reakcí na povrchu materiálu během jeho zahřívání. Součástí práce je rovněž optimalizace experimentální aparatury pro měření tepelně stimulovaných jevů a návrh postupů, které umožní zlepšit přesnost a reprodukovatelnost výsledků. Získaná data přispívají k hlubšímu pochopení vztahů mezi mikrostrukturou, defekty a funkcionalitou materiálů, což je klíčové pro jejich další využití v sensorových, detekčních a fotonických technologiích.



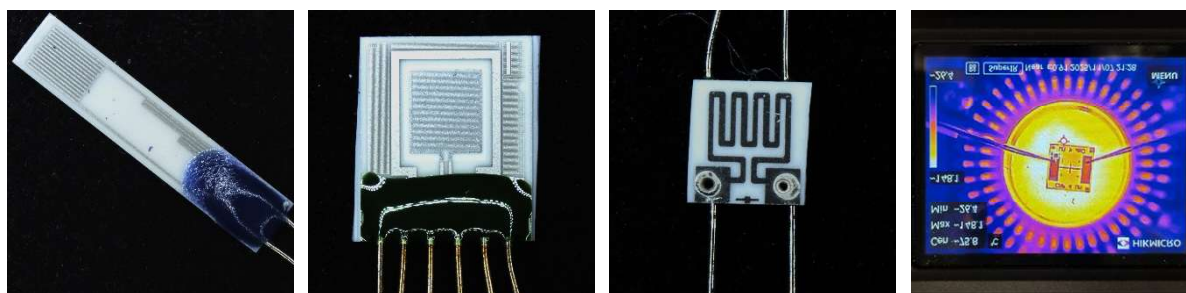
Obrázek: a) Hrubá naměřená data b) upravená a zvýrazněný termoluminiscenční pík

# Termodiagnostika mikrosenzorů pro detekci plynů

Bc. Cyril Popek (M2)

Školitel: Ing. Přemysl Fitl, Ph.D.

Tato práce se zabývá využitím termografických kamer vybavených mikroskopickými objektivy pro zobrazování a měření teplot mikro objektů. Zaměřuje se na porovnání dostupných komerčních přístrojů z hlediska technologie použitých detektorů, spektrálního rozsahu, teplotní citlivosti (NETD), rozlišení detektoru a dosažitelného prostorového rozlišení. Použity jsou vybrané kamery jako Micro-Epsilon TIM640, Infratec Variocam HD, HikMicro Pocket 2 a Infratec IMAGE IR9450, včetně jejich softwarových nástrojů. V experimentech jsou měřena teplotní pole modelových mikroobjektů, jako jsou struktury na křemíkových a keramických čípech, mikrotopné spirály, kovové kontakty a tenké vrstvy používané v senzorice plynů. Pro každou kameru jsou hodnoceny limity prostorového a teplotního rozlišení, reprodukovatelnost a citlivost měření. Dále je diskutován vliv emisivity, numerické apertury a hloubky ostrosti na přesnost detekce teploty mikroskopických struktur. Cílem práce je posoudit vhodnost jednotlivých termografických systémů pro přesné měření teploty v mikroměřítku a vymezit jejich limity pro aplikace v mikroelektronice, senzorice a při charakterizaci tenkých vrstev.



Obrázek 5: Ilustrativní obrázek senzorů pro měření jejich termografických vlastností

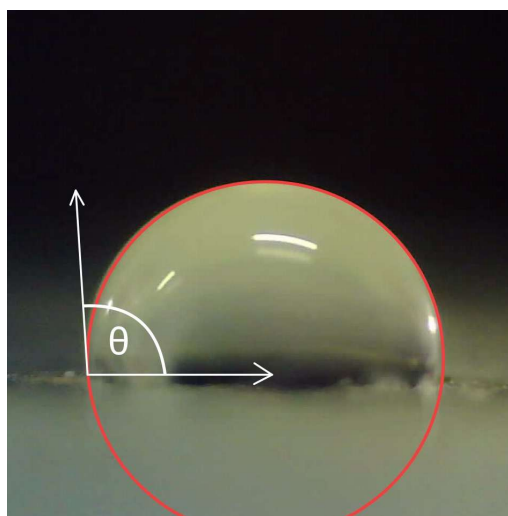
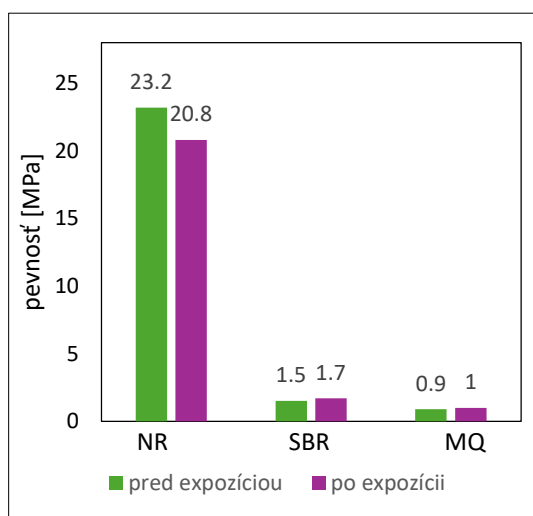


# Zmeny chemických a mechanických vlastností polymérnych materiálov po expozícii netermálnou plazmou

Romana Remeňová (B3)

Školiteľ: Ing. Ladislav Fišer, Ph.D.

Jedným z moderných spôsobov dezinfekcie povrchov je využitie netermálnej plazmy. Výhodou netermálnej plazmy je jej účinná inaktivácia mikroorganizmov za nízkych teplôt. Teplotná degradácia materiálu nie je rizikom, avšak pri pôsobení plazmy vznikajú reaktívne častice, ktoré môžu spôsobiť nežiaducu oxidáciu polymérnych reťazcov a ovplyvniť tým ich štruktúru a vlastnosti. Táto práca sa zameriava na sledovanie zmien chemických a mechanických vlastností polymérnych materiálov po dlhodobej expozícii netermálnou plazmou. Skúmané boli vlastnosti ako pevnosť, ťažnosť, vrubová húževnatosť, zmáčavosť povrchov a elektrická vodivosť. Pozorovaný bol aj nárast hmotnosti, čo vysvetľuje „zachytený“ kyslík v dôsledku oxidácie povrchu. Sledované materiály zahŕňajú prírodný kaučuk (NR), butadienstyrenový kaučuk (SBR), silikónový kaučuk (MQ) a polypropylén (PP), ktoré sú často využívané v medicínskych, priemyselných a spotrebiteľských aplikáciách.



Graf 1: Zmeny pevnosti v ťahu polymérnych materiálov po expozícii NTP

Obr. 1: Analýza zmáčavosti povrchu – meranie kontaktného uhlu kvapky na povrchu

# Charakterizace plazmatem aktivované vody

Bc. Adriana Šedová (M1)

Školitel: Dr. Mgr. Jana Jirešová

Pevná dusíkatá hnojiva vyráběná z amoniaku a kyseliny dusičné představují významnou zátěž pro životní prostředí, jelikož jejich výroba je energeticky náročná a závislá na fosilních palivech. Kapalná hnojiva se proto jeví jako efektivnější a udržitelnější alternativa. Jednou z inovativních metod jejich výroby je využití netermálního plazmatu, konkrétně plazmatem aktivované vody (PAW). Tu lze vyrobit například aplikací přechodové jiskry na vodní hladinu, čímž se kapalina obohacuje o reaktivní formy kyslíku a dusíku (RONS). Výsledkem je biologicky aktivní roztok podporující růst rostlin. Prvním krokem k efektivnímu využití PAW je její charakterizace, tedy určení chemického složení a fyzikálně-chemických vlastností, jako jsou koncentrace dusičnanů, peroxidů, pH a vodivost. Tyto parametry se běžně stanovují pomocí sond či indikačních papírků, které však vyžadují náročnou manipulaci a často poskytují jen orientační výsledky. Proto se jako uživatelsky příjemnější a přesnější alternativa nabízí impedanční spektroskopie, jež umožňuje komplexní vyhodnocení elektrochemických vlastností roztoku. Cílem práce je ověřit, zda může tato metoda nahradit tradiční sondy a papírky při charakterizaci PAW. Pro experimentální ověření byla použita koncentrační řada roztoků kyseliny dusičné.



Obr. 7: Sondy



Obr. 7: Rukola

# Vliv netermální plazmy na elektronické součástky

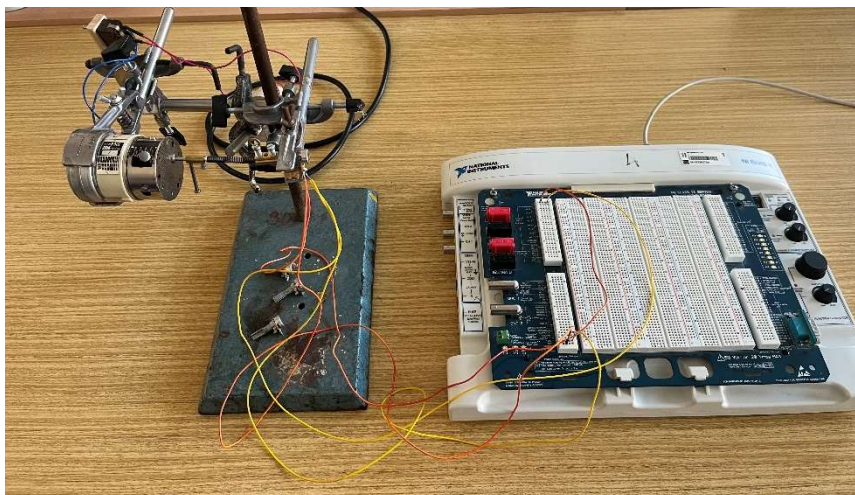
Bc. Hana Šikolová (M1)

Školitel: Ing. Ladislav Fišer, Ph.D.

Netermální plazma (NTP) je hojně využíváno k povrchovým úpravám bez výrazného ohřevu materiálů a také k efektivní dezinfekci povrchů, což přináší řadu výhod, ale také určitá rizika. Při působení NTP dochází ke generování reaktivních částic, jako jsou ionty a radikály, které mohou způsobovat korozi a oxidaci povrchů, což například snižuje vodivost a může zhoršit mechanickou stabilitu spojů. Tyto procesy mění povrchové napětí materiálů, ale mohou i zvyšovat přechodový odpor v kontaktech. Dlouhodobé vystavení NTP navíc může vést k mikroskopickým poškozením v materiálových vrstvách konektorů, což snižuje jejich životnost a spolehlivost v citlivých elektronických obvodech. Z těchto důvodů byly vybrané vzorky exponovány reaktivními částicemi produkovanými netermálním plazmatem bipolárního korónového výboje. Na základě výsledků získaných v rámci mé bakalářské práce byly experimenty rozšířeny na nové součástky, konkrétně potenciometry. Následně bylo zkoumáno, zda opakované zapojování konektorů nějak ovlivní měřený odpor a jestli tímto procesem dojde k setření nevodivé vrstvy vzniklé expozicí netermálním plazmatem.

Tabulka 1: Hodnoty odchylek dat neexponovaných a exponovaných potenciometrů

|        |        |        |        |        |        |        |        |        |        |        | Průměr |
|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| Neexp. | 0,9987 | 0,9989 | 0,999  | 0,9989 | 0,9997 | 0,9996 | 0,9998 | 0,9997 | 0,9997 |        | 0,9993 |
| Exp.   | 0,9961 | 0,9983 | 0,9992 | 0,9975 | 0,9977 | 0,9962 | 0,9969 | 0,9977 | 0,9985 | 0,9993 | 0,9976 |



Obrázek 8: Aparatura pro měření vlastností potenciometrů



# Návrh metodiky pro ověření možnosti vzniku rezistence na netermální plazma

Barbora Spodniaková (B3)

Školitel: Dr. Mgr. Jana Jirešová

Díky produkci reaktivních forem kyslíku a dusíku, které poškozují buněčné struktury mikroorganismů, představuje netermální plazma výhledový nástroj s výrazným antimikrobiálním účinkem. V současné době je jeho využití předmětem mnoha výzkumů s potenciálem aplikace v medicíně a potravinářských či sterilizačních technologiích. Zatím však není dostatečně objasněno, zda opakovaná expozice mikroorganismů netermálnímu plazmatu nemůže vést ke vzniku rezistence, obdobně jako například u antibiotik.

Tato práce se zaměřuje právě na návrh metodiky pro testování možnosti vzniku rezistence mikroorganismů vůči působení netermálního plazmatu. Pozornost je věnována kultivaci kmenů bakterií *Escherichia coli* O157 a *Citrobacter freundii* 3184 a jejich opakovanému vystavení subletálním dávkám plazmatu a následnému porovnání s kontrolními vzorky a se vzorky ošetřenými UV zářením. Postup zahrnuje přípravu suspenzí s bakteriemi, jejich ošetření a vyhodnocení růstu přeživších kolonií po jednotlivých cyklech expozice.

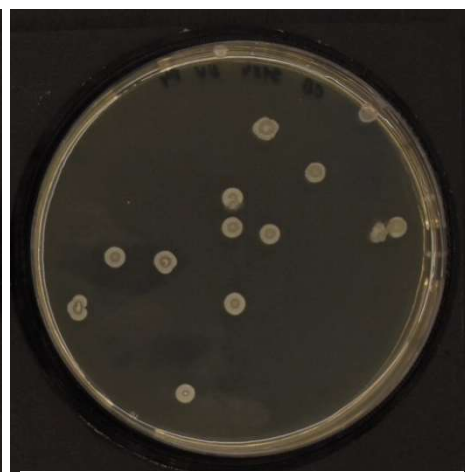
Výsledky experimentu poskytnou podklady pro optimalizaci dezinfekčních postupů a prevenci vzniku rezistence při aplikacích netermálního plazmatu.



**C. freundii** 3184 – kontrolní vzorek bez ošetření



**C. freundii** 3184 – po expozici NTP



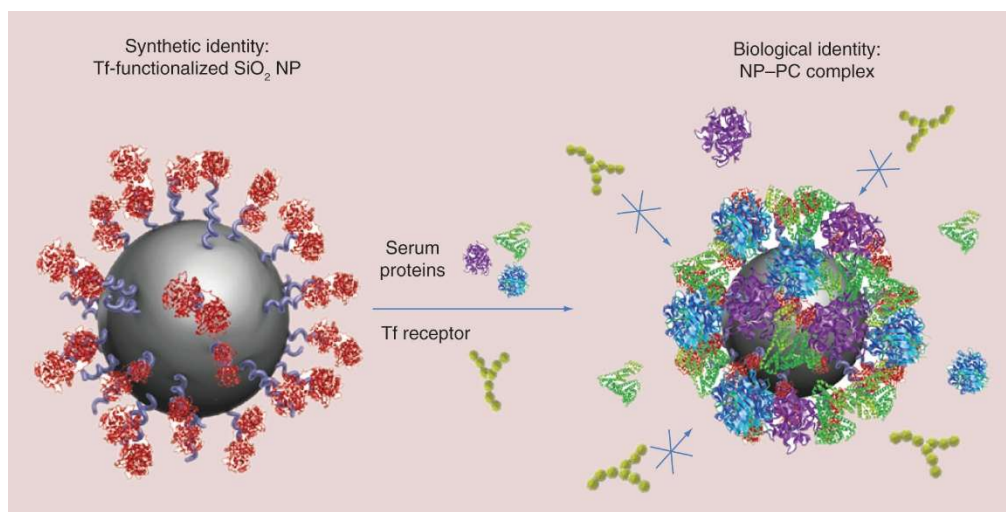
**C. freundii** 3184 – po expozici UV záření

# Vliv velikosti křemíkových nanočástic na tvorbu proteinové korony

Jakub Šulc (B3)

Školitel: Ing. Filip Matějka

Jakmile nanomateriál vstoupí do biologického prostředí, jeho povrch je okamžitě pokryt vrstvou biomolekul, především proteinů, která formuje takzvanou proteinovou koronu. Proteinová korona se stává skutečným rozhraním, které interaguje s buněčnými receptory. Stává se novou „biologickou identitou“ částice. Tuto biologickou identitu částice je možné modulovat pomocí základního fyzikálního parametru: zakřivení povrchu. Rozdílné zakřivení povrchu znatelně ovlivňuje reaktivitu nanočástic, což z nich dělá chemicky odlišné entity. Cílem této práce je prozkoumat, jak odlišné zakřivení povrchu, dané různými velikostmi křemíkových nanočástic, ovlivňuje formování a výsledné vlastnosti proteinové korony. Nanočástice budou po povrchové terminaci imobilizovány pomocí APTESové vrstvy, kde budou vystaveny fetálnímu bovinnímu séru, po jehož interakci s částicemi dojde ke vzniku proteinové korony. Na těchto proteinových korunách budou pomocí mikroskopie atomárních sil (AFM), pozorovány vlastnosti jako je výška, drsnost a „hustota“. Dále budou částice aplikovány na vzorky živých buněk, kde bude za pomoci AFM pozorován vliv na fyziologii cytoplazmatické membrány.



Obr. 1: Vznik proteinové korony po interakci nanočástice s biologickým materiálem Zdroj: Monopoli et al., *Nanomedicine*, 2015. Dostupné z: <https://www.tandfonline.com/doi/full/10.2217/nnm.15.188>

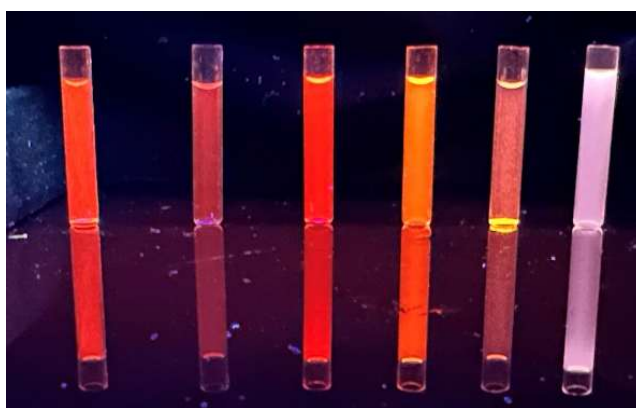
# *Od plazmatu k funkčnímu povrchu: úpravy SiQDs a jejich vliv na strukturu a reaktivitu*

Bc. Michal Vašíček (M1)

Školitel: RNDr. Pavel Galář, Ph.D.

Křemíkové kvantové tečky (SiQDs) vynikají unikátními optickými vlastnostmi, nízkou toxicitou a škálovatelností což z nich činí perspektivní materiál pro aplikace, jako jsou fotovoltaika či cílené doručování léčiv. Cílem našeho výzkumu je zlepšit efektivitu luminiscence a dispersibilitu SiQDs pomocí pokročilých metod povrchových modifikací.

Jednou z hlavních výzev současné technologie SiQDs je přetrvávající neschopnost připravit soubor QDs s kvantovým výtěžkem fotoluminiscence (PLQY) blížící se 100 %. Mezi hlavní příčiny se pravděpodobně řadí přítomnost strukturních defektů daných komplikovanou syntézou nebo přítomnost povrchových stavů. Předkládaná práce se snaží do této záhady nahlédnout. Studium vlivu povrchu bylo provedeno tak, že SiQDs byly žíhány v Ar/H<sub>2</sub> atmosféře v intervalu teplot od 150 do 900 °C. Bylo zjištěno, že žíháním se mění složení povrchu a že povrchy s větším zastoupením SiH<sub>2</sub> vazeb jsou efektivněji modifikovány. Byl také studován vliv sekundárního plazmatu na povrch QDs, kde se také testovala modifikace povrchu za letu parami dodec-1-enu. Tato modifikace zlepšila prvotní dispersi SiQDs a navíc tyto QDs vykazovaly přibližně trojnásobné zvýšení PLQY oproti neošetřeným vzorkům. Detailní studium vlivu původního povrchu SiQDs na výsledek modifikace byly QDs také leptány pomocí HF. Tento přístup vede k odleptání amorfních, oxidovaných či defektních částí povrchu. Touto metodou bylo zjištěno, že dodecylem terminované SiQDs dosáhli PLQY přes 20 %. Povrchová struktura SiQDs je tedy zásadní pro jejich optické vlastnosti, výsledky ale také naznačují značný vliv vnitřní struktury QDs na jejich optické vlastnosti, tudíž potřebu optimalizace samotné struktury SiQDs.



Obrázek 1. Křemíkové kvantové tečky s různými povrchovými modifikacemi pod (366 nm) světlem.

# Ústav matematiky, informatiky a kybernetiky (446)

## ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Iva Nachtigalová, Ph.D.

## SEZNAM SEKCI

- Aplikovaná matematika, informatika a kybernetika I
- Aplikovaná matematika, informatika a kybernetika II
- Aplikovaná matematika, informatika a kybernetika III

SPONZOŘI ÚSTAVU MATEMATIKY, INFORMATIKY A KYBERNETIKY



# Aplikovaná matematika, informatika a kybernetika I

MÍSTO: A335

## KOMISE

- Ing. Jakub Steinbach (předseda)
- Ing. Tomáš Jirsa
- Ing. Jakub Cíler
- Ing. Daniel Ondra

## SOUTĚŽÍCÍ

- Bc. **Vladislav Aulich** – Datová integrace a automatizace v laboratorních systémech (M2, doc. Gonzalo Araya Vargas)
- Bc. **Lukáš Fiala** – Web Application for Collecting and Classifying Voice Recordings of ORL Patients (M2, Ing. Jan Vrba, Ph.D.)
- Bc. **Jana Jarolímková** – Uživatelské rozhraní pro modul impedančního analyzátoru ADMX2001 (M2, doc. Ing. Dušan Kopecký, Ph.D.)
- Bc. **Elmir Mamedov** – Object Detection in Scientific Images Using YOLO Models (M2, Ing. Martin Schätz, Ph.D.)
- Bc. **Sofie Meyer** – Comparison of frameworks for implementation and training of neural networks (M2, RNDr. Mgr. Pavel Cejnar, Ph.D.)
- Bc. **Arian Adam Ott** – Rust in performance-critical applications (M2, RNDr. Mgr. Pavel Cejnar, Ph.D.)
- Bc. **Adam Vaculík** – Robotizace na webu pro vědecké využití (M2, Ing. Jan Kohout, Ph.D.)

# Aplikovaná matematika, informatika a kybernetika II

MÍSTO: A40

## KOMISE

- Ing. Jan Vrba, Ph.D. (předseda)
- Ing. Jakub Seiner
- Ing. Lukáš Mrazík
- doc. Mgr. Fatima Hassouna., Ph.D.

## SOUTĚŽÍCÍ

- Bc. **Šimon Hudínek** – Matematický model pro kontrolu výfukových plynů v systému CVS (M2, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)
- Bc. **Matyáš Khýr** – Sliced and entropy-regularized Wasserstein distances for a machine learning model of soot deposition in catalytic filters (M2, Ing. Martin Isoz, Ph.D. )
- Bc. **Magdaléna Menčíková** – In silico modelování kompatibility erlotinibu–POx pro vývoj systémů podávání léčiv (M2, doc. Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D.)
- Bc. **Elvina Naumova** – Příprava a charakterizace udržitelných uhlíkových kovových kompozitních materiálů pro aplikace v ochraně proti elektromagnetickým rušením (M2, doc. Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D.)
- Bc. **Jarmila Terpáková** – Parameter sensitivity analysis in Laser Peening simulations (M1, Ing. Martin Isoz, Ph.D.)
- Bc. **Tereza Tumová** – Zpracování signálů v predikci degradace bateriových úložišť fotovoltaických systémů (M2, prof. Ing. Aleš Procházka, CSc.)
- Bc. **Michal Zajcev** – Matematické modelování Li-ion akumulátorů pro posouzení různých nabíjecích protokolů (M2, Ing. Petr Mazur, Ph.D.)

# Aplikovaná matematika, informatika a kybernetika III

MÍSTO: A330d

## KOMISE

- RNDr. Mgr. Pavel Cejnar, Ph.D. (předseda)
- Ing. Jan Kohout, Ph.D.
- doc. Mario Vazdar, Ph.D.
- Ing. Daniela Janstová

## SOUTĚŽÍCÍ

- Bc. **Jiří Ingr** – Segmentace hlasivek v laryngoskopických obrazech pomocí neuronových sítí (M1, Ing. Jan Vrba, Ph.D.)
- **David Jandl** – Automatizace osazování desek plošných spojů pomocí robota Pick and Place na platformě LumenPNP (B3, Ing. Daniela Janstová)
- **Karel Mařík** – Využití algoritmu zpětnovazebního učení v oblasti řízení biotechnologických procesů (B3, doc. Ing. Pavel Hrnčířík, Ph.D.)
- **Matěj Ungr** – Vývoj aplikace pro odhad únavy člověka s využitím strojového učení (B3, Ing. Jan Kohout, Ph.D.)
- **Jakub Vencel** – Automatizace vyhodnocování vlastností kolonií E. coli z obrazových dat (B3, Ing. Lukáš Mrazík)
- **Marek Veselý** – Model IoT řešení chytré místnosti (B3, Ing. Lukáš Mrazík)
- **Kamila Yesmurzayeva** – Numerical simulations and experimental design - a story on cell-penetrating peptides and EDTA (B3, doc. Mario Vazdar, Ph.D.)

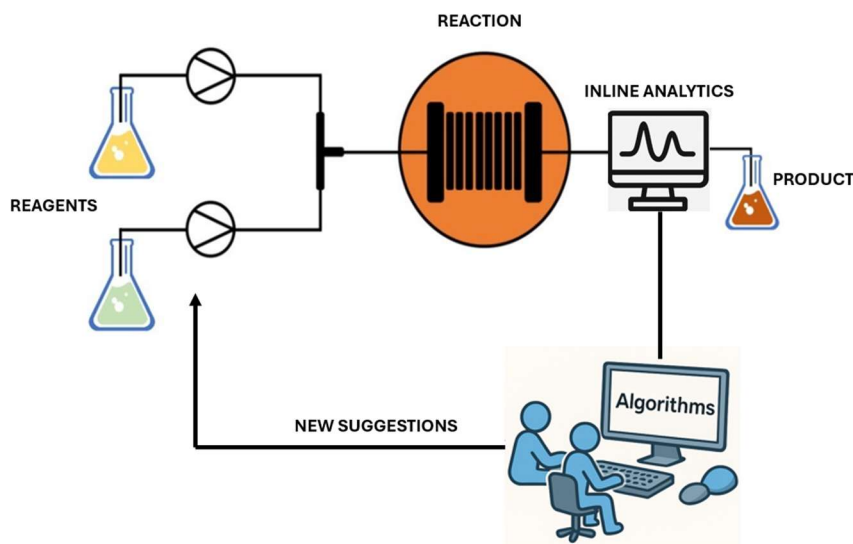


# Datová integrace a automatizace v laboratorních systémech

Bc. Vladislav Aulich (M2)

Školitel: Gonzalo Araya Vargas

Práce se zaměřuje na datově řízenou optimalizaci chemických procesů a integraci laboratorních přístrojů do samooptimalizační platformy určené pro autonomní řízení experimentů. Platformy založené na principech bayesovské optimalizace představují efektivní přístup k řešení úloh typu „černá skříňka“, kdy při vhodně zadané sadě okrajových podmínek dokážou s minimálním počtem experimentů konvergovat k optimálním reakčním parametrům. V případě průtočných (flow) reaktorů se navíc nabízí možnost plné automatizace celého experimentálního procesu, včetně dávkování, měření a vyhodnocování, čímž dochází k významnému snížení podílu rutinní laboratorní práce. Cílem realizované práce bylo prozkoumat možnosti propojení měřicích a řídicích zařízení s nadřazeným systémem a ovládat infrastrukturu pro automatizovaný sběr, přenos a zpracování procesních dat. Důraz byl kladen zejména na komunikaci s laboratorním hardwarem prostřednictvím rozhraní RS232 a OPC serveru. Součástí práce byla zejména integrace autosampleru do systému LabManager a grafická vizualizace v softwaru LabVision pro monitoring a řízení experimentů. Výsledky přispívají k rozvoji samooptimalizačních platform a potvrzují potenciál datově řízeného přístupu v oblasti moderního chemického výzkumu a vývoje.

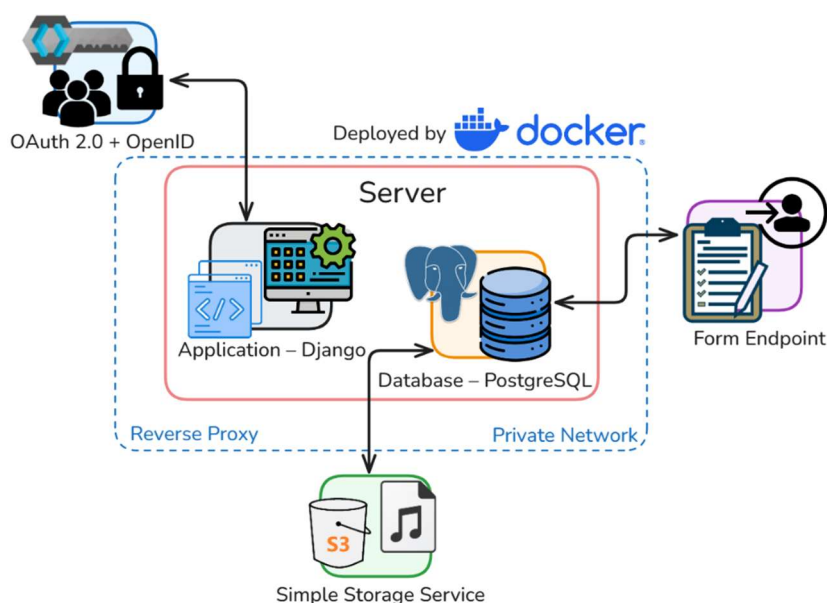


# Web Application for Collecting and Classifying Voice Recordings of ORL Patients

Bc. Lukáš Fiala (M2)

Školitel: Ing. Jan Vrba, Ph.D.

Artificial intelligence is becoming an important part of modern medicine. Our research group, in cooperation with the Department of Otorhinolaryngology at University Hospital Kralovske Vinohrady, focuses on analyzing voice disorders using machine learning methods. One of the successful projects is a voice classification system that evaluates patient voice recordings. My task was to develop a secure web application that allows doctors to use this classifier online and to manage patients, their diagnoses and recordings. The system is built with the open-source Django framework in Python and uses PostgreSQL for database management. Audio files are stored externally on the CESNET Simple Storage Service to improve reliability and reduce server load. Because of the sensitive nature of medical data, security is ensured through OAuth 2.0 and OpenID protocols implemented via Keycloak and a reverse proxy creating a private network. The entire project runs in Docker containers for stable deployment. The long-term goal is to support doctors in making accurate and objective diagnoses of voice disorders and to expand the system to other medical institutions.



# Matematický model pro kontrolu výfukových plynů v systému CVS

Bc. Šimon Hudínek (M2)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Systém CVS (Constant Volume Sampler) zajišťuje pomocí ředění konstantní objemový tok plynů do analyzátorů během emisních testů automobilů. Jakmile relativní vlhkost v tomto systému dosáhne stanovené horní hranice, při které by mohla hrozit kondenzace, otevře se bezpečnostní ventil a test je přerušen jako neúspěšný. Bez predikce nemá operátor včasnou informaci, zda k tomuto stavu během testu dojde. Opakování neúspěšných testů představuje nejen časovou zátěž, ale i ekonomické náklady.

Příspěvek představuje matematický model vývoje vlhkosti v čase a prostoru v systému CVS, validovaný na experimentálních datech. Model umožňuje před zahájením testu zvolit vhodnou konfiguraci, která udrží vlhkost pod hranicí při zachování přesnosti analyzátorů.

V rámci příspěvku bude představena struktura modelu, proces validace a praktická implementace do uživatelsky přívětivého nástroje. Vyvinuté řešení pomáhá optimalizovat proces emisních testů a vyhnout se neúspěšným experimentům.

**Výpočet průtoku plynu**

**SKODA**

**Typ motoru**

☒ TSI ☐ MPI

**Parametry vozidla a odporů**

|                             |         |
|-----------------------------|---------|
| Hmotnost auta (kg):         | 1917    |
| Maximální výkon (kW):       | 140     |
| Maximální průtok (kg/h):    | 700     |
| A (N):                      | 189.4   |
| B (N/(km/h)):               | 0.753   |
| C (N/(km/h) <sup>2</sup> ): | 0.04432 |

**Ředící vzduch**

|               |      |
|---------------|------|
| Teplota (°C): | 23.7 |
| Vlhkost (%):  | 28   |

**Jízdní cyklus**

Soubor:

[Pokročilé nastavení](#)

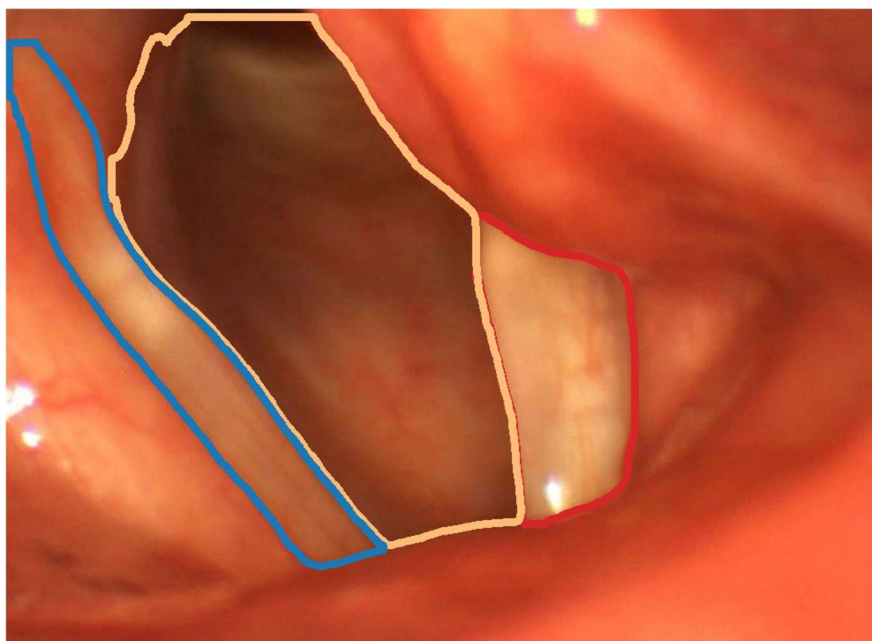
**Spustit výpočet**

# *Segmentace hlasivek v laryngoskopických obrazech pomocí neuronových sítí*

Bc. Jiří Ingr (M1)

Školitel: Ing. Jan Vrba, Ph.D.

Přímá laryngoskopie představuje klíčovou metodu pro vyšetření poruch hlasového ústrojí, jež umožňuje detailní sledování struktury hrtanu a hlasivek. Tato práce se zabývá rozpoznáním částí hlasivek v záznamech získaných z laryngoskopických vyšetření s cílem automaticky detekovat a segmentovat jednotlivé struktury hlasového ústrojí. K tomu jsou využity modely hlubokého učení YOLO, určené pro detekci a segmentaci objektů v obrazech, a MedSAM, varianta segmentačního modelu SAM určená pro medicínské využití. Pro trénink modelů slouží obrazový dataset laryngoskopických záznamů vytvořený ve spolupráci s Fakultní nemocnicí Královské Vinohrady, v němž jsou označeny části hlasivek a glotická štěrbina. Práce se zaměřuje na tvorbu a optimalizaci modelu umělé inteligence schopného segmentovat snímky hlasivek s klinickou spolehlivostí a rychlostí inference vhodnou pro praktické využití. Vytvoření modelu s vysokou přesností segmentace může přispět k rozvoji metod pro objektivní analýzu hlasového ústrojí v reálném čase a zároveň umožní efektivnější a rychlejší vyhodnocení laryngoskopických vyšetření.



# *Automatizace osazování desek plošných spojů pomocí robota Pick and Place na platformě LumenPNP*

David Jandl (B3)

Školitel: Ing. Daniela Janstová

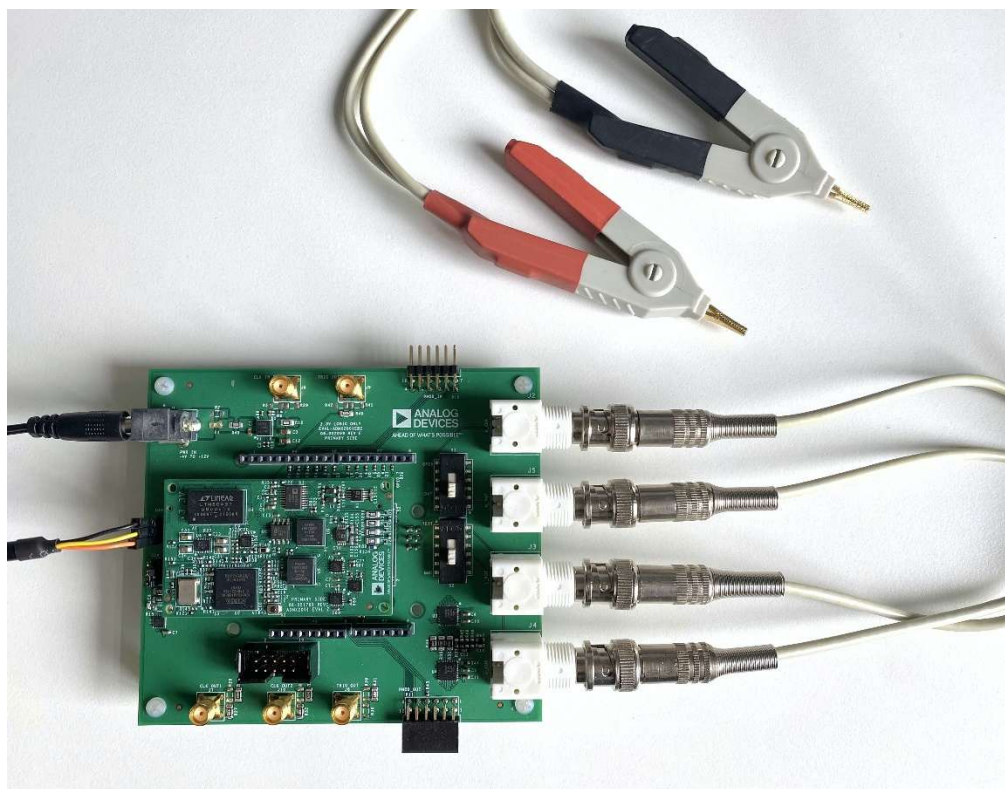
Plošné spoje dnes najdeme téměř v každém odvětví, ať už jako součást velkých průmyslových linek, tak i běžných domácích spotřebičů. Tvoří základ každého elektronického obvodu, avšak jejich výroba není ani zdaleka tak jednoduchá, jak by se mohlo zdát. Osazování plošných spojů (DPS) je možné sice manuálně, avšak v posledních letech roste poptávka po automatizovaném řešení. Jedním z efektivních přístupů je robot typu *pick and place* založený na platformě LumenPNP. Manuální osazování DPS má řadu nevýhod, nejen vyšší náklady a delší doba zpracování, ale především náchylnost k lidským chybám, které mohou vést k vadám a snížené kvalitě výrobku. Robot typu *pick and place* tyto problémy eliminuje zajištěním přesného a konzistentního umístění komponent, což zajišťuje vysokou kvalitu finálních výrobků a opakovatelnost procesu. Tento typ robota se stal klíčovým prvkem moderní výroby elektroniky, zejména pro technologii povrchových montáží, kde umožňuje automatizovat proces umístění elektronických komponent na DPS s vysokou rychlostí a přesností.

# *Uživatelské rozhraní pro modul impedančního analyzátoru ADMX2001*

Bc. Jana Jarolímková (M2)

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

Impedanční spektroskopie představuje klíčovou metodu pro charakterizaci elektronických součástek, elektrolytů a pevnolátkových struktur v širokém frekvenčním rozsahu. Měřicí systém ADMX2001 (Analog Devices), umožňuje přesnou akvizici dat, avšak postrádá uživatelsky přívětivé softwarové rozhraní, jelikož je systém určen zejména pro zabudování do pokročilých testovacích a vědeckých aparatur. V rámci této práce tedy bylo navrženo a implementováno rozhraní umožňující komunikaci s modulem ADMX2001, přenos dat do počítače, jejich vizualizaci a základní analýzu. Byla ověřena správná funkčnost komunikační vrstvy i stabilita přenosu dat v rozsahu 0,2 Hz – 10 MHz. Výsledný systém tvoří základ pro další rozvoj měřicí aplikace určené k testování elektromechanických vlastností tenkých vrstev na bázi organických polovodičů.

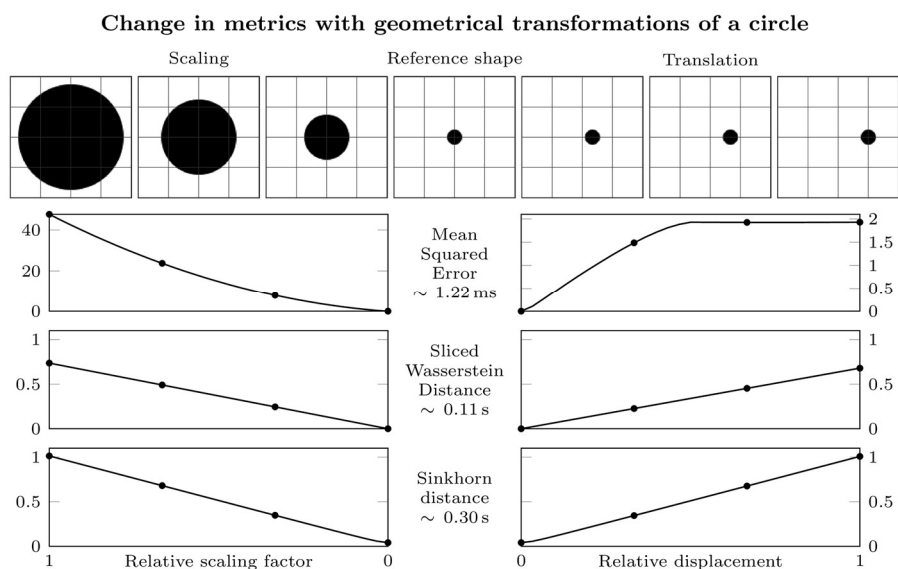


# Sliced and entropy-regularized Wasserstein distances for a machine learning model of soot deposition in catalytic filters

Bc. Matyáš Khýr (M2)

Školitel: Ing. Martin Isoz, Ph.D.

It has been widely recognised in the scientific community that the choice of suitable metrics is crucial in the development, evaluation and prospective applicability of machine learning models. The so-called *pixel-wise losses*, such as *mean squared error*, essentially average local differences across a given sample. However, they are generally incapable of reflecting the underlying geometrical and structural relations. On the other hand, the class of *geometric losses* aspires to address this issue, albeit at a higher computational cost. Since our previously developed neural network surrogate for estimating the distribution of soot deposits inside the walls of catalytic filters trained with pixel-wise losses currently lacks the robustness required for real-world application, we have embarked on a side quest to obtain an improved set of metrics for this specific problem. Herein, we focus on the implementation of selected metrics in the Keras TensorFlow framework and their characterisation and comparison to pixel-wise losses. Specifically, we examine the performance of the *sliced Wasserstein distance* and the *Sinkhorn distance* on both an artificial dataset and data from our machine learning model.



# *Object Detection in Scientific Images Using YOLO Models*

Bc. Elmir Mamedov (M2)

Školitel: Ing. Martin Schätz, Ph.D.

Accurate detection of objects in microscopy images is critical for biological analysis. Manual detection is labor-intensive, error-prone, and slow, especially for small objects in noisy microscopy images. Traditional automatic image analysis detection methods are sensitive to noise and to variable focal planes. This project aims to develop a workflow for automated detection of pollen grains using YOLO deep learning models, with potential for real-time analysis. We plan to preprocess high-resolution images and train multiple YOLO versions and network sizes to evaluate and identify the optimal balance between detection precision and computational efficiency. Transfer learning from related datasets followed by fine-tuning on pollen data is expected to improve model performance. We have set up the computing environment on the Metacentrum cluster, and early tests with different YOLO models demonstrate feasibility of training large models on multi-layer microscopy datasets. The final workflow will support live prediction streaming for detection and multi-class classification, moving toward real-time “smart microscopy” applications.



# *Využití algoritmu zpětnovazebního učení v oblasti řízení biotechnologických procesů*

Karel Mařík (B3)

Školitel: doc. Ing. Pavel Hrnčířík, Ph.D.

Řízení bioprocessů čelí zásadním výzvám v podobě nelineární dynamiky, stochastické povahy a procesních nejistot, které omezují efektivitu tradičních řídicích metod. Jako řešení představuji strategii založenou na zpětnovazebním učení (RL), navrženou s primárním důrazem na bezpečnost a stabilitu. Cílem je nejprve předučit agenta, aby dosahoval obdobných výsledků jako stávající metody, a následně bezpečně nalézt vyšší produkční maximum. Agent optimalizuje klíčové řízené proměnné – rychlost přítoku substrátu, průtok vzduchu a rychlost míchání – s cílem maximalizovat výtěžek a celkovou produktivitu bioprocessu. Pro zajištění výsledné stability byl zvolen algoritmus Quantile Regression Deep Q-Network (QR-DQN). Na rozdíl od klasického DQN, které se učí pouze průměrnou očekávanou odměnou, QR-DQN modeluje celou distribuci možných odměn. To mu umožňuje činit risk-senzitivní rozhodnutí, což vede k bezpečnější konvergenci, potlačuje oscilace řízení a minimalizuje riziko neúspěšných šarží.

## *In silico modelování kompatibility erlotinibu–POx pro vývoj systémů podávání léčiv*

Bc. Magdaléna Menčíková (M2)

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

Nízká rozpustnost mnoha aktivních farmaceutických složek (API), zejména těch ze tříd II a IV podle Biofarmaceutického klasifikačního systému (BCS), vede k omezené biologické dostupnosti a představuje zásadní výzvu při vývoji lékových forem. Přes dlouholetý výzkum zůstává nízká rozpustnost ve vodě významným omezením pro dosažení optimálního farmakokinetického profilu léčiv. Perspektivním řešením je použití polymerů poly(2-oxazolinů) (POx), které díky laditelným vlastnostem a biokompatibilitě nabízejí široké možnosti pro formulaci léčiv, např. v amorfních pevných disperzích či polymerních micelách. Kompatibilita mezi API a POx ovlivňuje klíčové vlastnosti formulace, avšak její predikce se dosud opírá převážně o metodu pokus-omyl. Tato studie proto využívá *in silico* modelování k hodnocení kompatibility API–POx s erlotinibem (ERL) jako modelovým API s cílem identifikovat vhodné struktury POx. Následně budou syntetizovány vybrané struktury POx a budou vytvořeny fázové diagramy ERL-POx pro vyhodnocení prediktivní síly modelovacího přístupu.

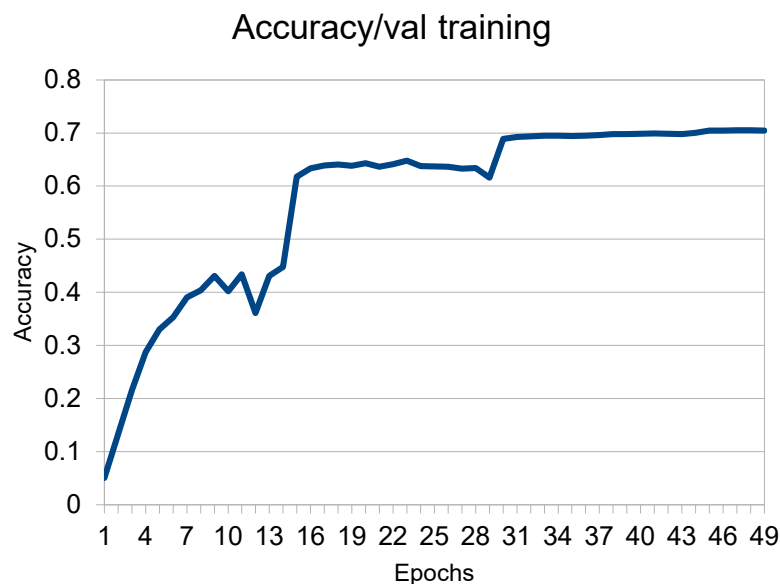
# Comparison of PyTorch and TensorFlow Frameworks for Training Neural Networks

Bc. Sofie Meyer (M2)

Školitel: Cejnar Pavel RNDr. Mgr. Ph.D.

The primary goal of this work is to examine the fundamental differences between two leading deep learning frameworks: PyTorch and TensorFlow. The key distinction historically lay in PyTorch's eager execution versus TensorFlow 1.x static graphs. However, both frameworks have evolved: TensorFlow 2.x now has eager execution, and PyTorch offers static-graph compilation via TorchScript since 2019. This study aims to explore the practical effects of these changes in future comparisons.

To compare the frameworks' characteristics, a ResNet-34 Convolutional Neural Network (CNN) was implemented in PyTorch and trained on the ImageNet dataset. Two training variants were evaluated: one using pre-initialized original weights and one trained from scratch. The training parameters were further examined to achieve optimal results. The training was performed on a server equipped with an NVIDIA A40 GPU and took approximately 23 hours. Importantly, these PyTorch models will serve as the baseline for future comparisons with a TensorFlow implementation.



# *Příprava a charakterizace udržitelných uhlíkových kovových kompozitních materiálů pro aplikace v ochraně proti elektromagnetickým rušením*

Bc. Elvina Naumova (M2)

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

Vývoj účinných materiálů pro stínění elektromagnetického rušení (EMI) je zásadní pro ochranu lidského zdraví, elektronických zařízení a citlivých dat. Současně posun směrem k obnovitelným zdrojům vyžaduje alternativy k matricím na bázi ropy. Tato studie hodnotí uhlíkovo-kovové (C–M) vedlejší produkty, získané během plazmové katalytické pyrolýzy metanu pro výrobu vysoce čistého vodíku, jako funkční plniva v udržitelných filmech pro stínění EMI. Lehké, flexibilní kompozitní filmy byly vyrobeny s použitím matrice z celulóзовých nanovláken (CNF) v kombinaci s čištěnými a povrchově modifikovanými C–M plnivem. Zároveň byl zkoumán vliv začlenění elektricky vodivého polymeru. Výsledné kompozity byly charakterizovány z hlediska strukturních a morfologických vlastností, elektrické vodivosti, mechanických vlastností a účinnosti stínění EMI. Výsledky demonstrují potenciál přeměny C-M vedlejších produktů na komponenty s přidanou hodnotou pro obnovitelné, vysoce výkonné materiály pro stínění EMI.

## *Rust in performance-critical applications*

Bc. Arian Adam Ott (M2)

Školitel: RNDr. Mgr. Pavel Cejnar, Ph.D.

Rust is a compiled systems programming language that provides high performance and strong memory safety guarantees through its borrow checker, which enforces ownership and borrowing rules at compile time. This work presents Rust implementations of Breadth-First Search, Quicksort, and Monte Carlo simulation, alongside straightforward Python translations for comparison. The examples demonstrate typical Rust patterns such as borrowing slices to avoid unnecessary copies, performing in-place operations, and writing generic functions for type-safe code reuse. Parallelism is introduced using the Rayon library, which allows simple expression of multicore workloads through iterators while preserving safety. Finally, a more applied project is shown: live interpolation of experimental data through a graphical interface, developed as part of the author's master's thesis. This illustrates how Rust can be used for real-world applications involving both computation and user interaction.

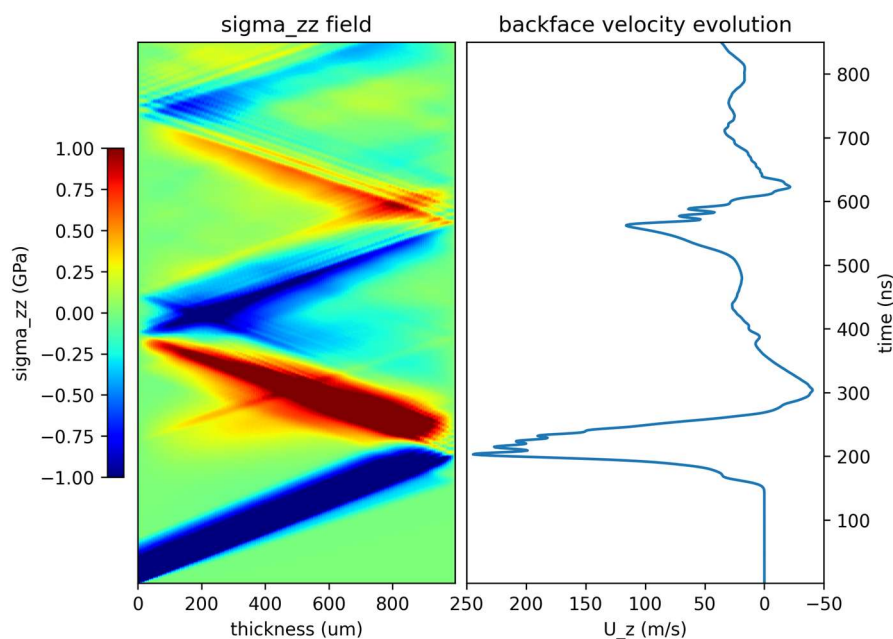
```
1 fn partition(arr: &mut [usize], low: usize, high: usize) -> usize {
2     let pivot: usize = arr[high];
3     let mut i: usize = low;
4
5     for j in low..high {
6         let mask = (arr[j] <= pivot) as usize;
7         arr.swap(i * mask + j * (1 - mask), j);
8         i += mask;
9     }
10    arr.swap(i, high);
11    i
12 }
13
14 fn quicksort(arr: &mut [usize], mut low: usize, mut high: usize) {
15     while low < high {
16         let p = partition(arr, low, high);
17         if p - low < high - p {
18             if p > 0 {
19                 quicksort(arr, low, p - 1);
20             }
21             low = p + 1;
22         } else {
23             quicksort(arr, p + 1, high);
24             if p == 0 {
25                 break;
26             }
27             high = p - 1;
28         }
29     }
30 }
31
```

# Parameter sensitivity analysis in Laser Peening simulations

Bc. Jarmila Terpáková (M1)

Školitel: Ing. Martin Isoz, Ph.D.

Laser Peening (LP) is an advanced surface treatment technique used to enhance fatigue resistance of mechanical components. In principle, fatigue resistance is increased by using high-intensity laser pulses to induce compressive residual stresses to the component surface. The main advantages of laser peening are its intensity, which leads to a depth of the treated region in the order of 1 mm, twice the depth achievable through standard shot peening treatment, and its precision. To fully harness the LP potential, predictive process simulation is crucial. Unfortunately, achieving such a simulation is challenging due to the wide range of variables influencing the LP process. To advance the simulation development, we perform a sensitivity study of the numerical model parameters, focusing particularly on the temporal and spatial profiles of laser-induced pressure and the parameters of the Johnson–Cook material model. The simulation results are validated against experimental measurements from the literature.



# *Zpracování signálů v predikci degradace bateriových úložišť fotovoltaických systémů*

Bc. Tereza Tumová (M2)

Školitel: prof. Ing. Aleš Procházka, CSc.

Fotovoltaické systémy představují moderní způsob získávání elektrické energie z obnovitelných zdrojů (ze slunečního záření). Jednou z klíčových součástí těchto systémů jsou akumulční baterie, které slouží k ukládání vyrobené energie. Tato práce se zaměřuje na zpracování dat naměřených z těchto baterií a vytvoření modelu pro predikci jejich životnosti. Taková predikce umožní včasnou výměnu baterie před degradací, může zvýšit efektivitu systému a snížit ztrátu elektrické energie. Pro zpracování bylo využito prostředí MATLAB a různé statistické metody. Použitá data byla poskytnuta přímo z průmyslové firmy a jejich rozsah umožňuje spolehlivější vyhodnocení výsledků. Výsledkem projektu je posouzení poklesu průměrné hodnoty napětí (v průměru o  $-0.31$  V/rok) a rostoucího rozptylu (v průměru o 10.2 procent) v čase pro dané úložiště energie jako indikátoru degradace bateriového systému. Cílem projektu je přispět k efektivnějšímu provozu fotovoltaických systémů a podpořit jejich udržitelnost.



# *Vývoj aplikace pro odhad únavy člověka s využitím strojového učení*

Matěj Ungr (B3)

Školitel: Ing. Jan Kohout, Ph.D.

Únava představuje všudypřítomný fenomén, který systematicky narušuje kognitivní a motorické schopnosti člověka. Ačkoli je její vliv často podceňován, důsledky mohou být fatální. Nejviditelnějším příkladem je silniční doprava, problém však zdaleka nekončí za volantem. V celé řadě profesí, včetně těch vyžadujících neustálou interakci s počítačovými systémy, je ostražitost a rychlé rozhodování naprosto klíčové. Mimo jiné jde o operátory výroby, dispečery či pracovníky dohledových center. Přestože metody detekce únavy existují, často se jedná o statické modely, bez možnosti adaptace, zaměřené převážně na řidiče. Cílem práce je proto vyvinout počítačovou aplikaci, která dokáže s použitím webkamery odhadnout míru únavy s minimálním časovým zpožděním. Používá k tomu modely online (průběžného) strojového učení Vowpal Wabbit. Systém predikuje únavu na základě několika atributů, jako například poměr stran očí (EAR), frekvence a délka mrkání, náklon hlavy nebo zívání. Subjektivní anotace pro učení poskytuje sám uživatel pomocí grafického rozhraní programu.



# *Robotizace na webu pro vědecké využití*

Bc. Adam Vaculík (M2)

Školitel: Ing. Jan Kohout, Ph.D.

Výběr vhodného časopisu pro publikaci vědeckého článku představuje pro začínající výzkumníky náročný úkol vyžadující orientaci v množství odborných periodik a znalost publikačního prostředí. Cílem této práce je analyzovat možnosti využití vědeckých databází pro doporučování publikačních časopisů a navrhnout řešení založené na metodách strojového učení. Práce zahrnuje analýzu jak placených databází (např. Scopus, Web of Science), tak open access zdrojů (např. OpenAlex, Crossref), přičemž hodnotí jejich dostupnost, pokrytí dat, kvalitu metadat a možnosti integrace prostřednictvím API. Hlavním výstupem práce je návrh a implementace databázového systému schopného integrovat data z různých vědeckých API do jednotného prostředí. Systém je navržen s důrazem na modularitu a rozšiřitelnost, což umožňuje snadné přidání dalších datových zdrojů v budoucnu. Aktuálně systém integruje data z open access databází OpenAlex a Crossref. Součástí práce je také návrh modelů strojového učení pro inteligentní doporučování vhodných publikačních časopisů na základě charakteristik vědeckého článku. Práce vytváří základ pro budoucí vývoj komplexního nástroje pro podporu publikační činnosti výzkumníků na VŠCHT Praha.

## Automatizace vyhodnocování vlastností kolonií *E. coli* z obrazových dat

Jakub Vencel (B3)

Školitel: Ing. Lukáš Mrazík

Mezi klíčový parametr sledovaný v mikrobiologické praxi patří počet kolonií vyrostlých na živné půdě v Petriho misce. Z důvodu vysokých pořizovacích nákladů komerčně dostupných automatických počítadel je stále hojně využíváno ruční počítání. Ve své práci jsem se soustředil na kompletaci a testování algoritmů číslcového zpracování obrazu s cílem počítání mikroorganismů automatizovat. Ze získaných dat ve formě segmentačních masek jsem dále extrahoval i jiné příznaky, které mají potenciál nalézt v mikrobiologických výzkumech své uplatnění. Otestované algoritmy jsem implementoval do softwaru s GUI, který by mohl nahradit manuální segmentaci kolonií. Aplikaci jsem napsal v programovacím jazyce Python s využitím open-source modulů (například OpenCV). Postupy zpracování obrazových dat jsem vyvíjel na datech poskytnutých výzkumníky *E. coli long-term evolution experiment* (LTEE).



(a) Původní obrázek



(b) Maska po segmentaci

Obrázek 1: Ukázka segmentace kolonií

# *Model IoT řešení chytré místnosti*

Marek Veselý (B3)

Školitel: Ing. Lukáš Mrazík

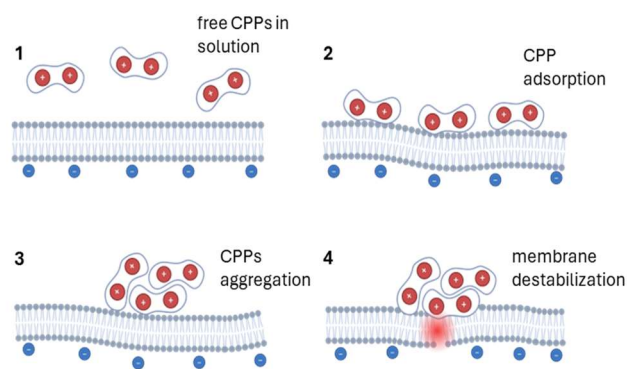
Práce se zabývá návrhem a realizací modelu chytré místnosti využívající technologie internetu věcí. Cílem projektu je vytvořit přenositelný model řízeného prostředí, který demonstruje principy automatizace a využití moderních technologií v domácím i průmyslovém prostředí. Důraz je kladen na přehlednost, snadnou obsluhu a možnost využití modelu pro edukační a propagační účely studijního programu Chemická kybernetika. Model je zhotoven z běžně dostupných materiálů, jako jsou dřevěné hranoly, překližka a plexisklo. Elektronická část systému je tvořena dvěma mikrokontroléry ESP32 a nadřazeným řídicím systémem (počítačem). První mikrokontrolér zajišťuje sběr dat z teploměru, druhý ovládá akční členy, kterými jsou topení a ventilátor. Komunikace mezi mikrokontroléry probíhá prostřednictvím protokolu MQTT, přičemž řízení teploty i sledování aktuálního stavu probíhá přes grafické uživatelské rozhraní (GUI) v nadřazeném řídicím systému.

# *Numerical simulations and experimental design - a story on cell-penetrating peptides and EDTA*

Kamila Yesmurzayeva (B3)

Supervisor: doc. Mario Vazdar, Ph.D.

The controlled transport of cargo into cells is vital for life-sustaining functions. Alongside the active ATP-driven process of endocytosis, which plays a key role in transporting cargo across membranes, another promising method, the direct passive energy-independent translocation, is particularly relevant for controlled drug delivery. Short, positively charged cell-penetrating peptides (CPPs) are commonly utilized vectors for this purpose. In this work, we demonstrate how numerical simulations, specifically classical molecular dynamics (MD) simulations, are employed in the investigation of CPPs composed of positively charged arginine residues (Arg<sub>9</sub>), which have shown significant penetration activity in both model membranes and cells. Using MD simulations, we show the differences in adsorption and aggregation at membranes, which is a necessary first step in the cell penetration mechanism. Importantly, we also reveal how numerical simulations can not only help explain cellular processes at the molecular level, but also play a crucial role in experiment design. Specifically, we demonstrate that the addition of a commonly used chelator agent in biophysical experiments, EDTA, prevents the cellular penetration of CPPs, contrary to the prevailing dogma in the biophysical community.



# *Matematické modelování Li-ion akumulátorů pro posouzení různých nabíjecích protokolů*

Bc. Michail Zajcev (M2)

Školitel: Ing. Petr Mazur, Ph.D.

Lithiové články se staly jedním z pilířů energetické transformace 21. století, zatímco lithium a další materiály potřebné k jejich výrobě zůstávají omezenými, strategickými a kontroverzními nerostnými zdroji. Prodloužení životnosti těchto článků je tedy nezbytným inženýrským zadáním pro ekonomické, enviromentální i strategické ohledy. Pro šetrnější provoz těchto akumulátorů jsou zkoumány různé nabíjecí protokoly. Perspektivní směr v tomto ohledu je pulzní nabíjení, kdy se ke stejnosměrné složce nabíjecího proudu přidává i složka střídavá. Mnohé studie ukazují na prodlouženou životnost a zvýšenou účinnost, ale mechanismus stále není jasný, některé studie se navíc staví k výhodnosti pulzního nabíjení skepticky. V rámci prezentace budou představeny možnosti a omezení posouzení účinnosti pulzního nabíjení vůči protokolu CCCV s použitím elektrochemických modelů, jako je single-particle-model a rozšířený model P2D. Na základě závěrů z kvalitativní analýzy modelů je posouzeno, zda-li je pro pulzní nabíjení možná vyšší energetická účinnost nabíjení, nebo zda jeho možné výhody leží jinde než v prosté energetické účinnosti.