VŠCHT PRAHA

FCHI

Sborník anotací

Studentská vědecká konference

19. 11. 2026

Ústav fyzikální chemie

Ústav fyzikální chemie
Fakulta chemicko-inženýrská
Vysoká škola chemicko-technologická v Praze

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

doc. Ing. Ondřej Vopička, Ph.D.

FAKULTNÍ KOORDINÁTOR

doc. Ing. Jitka Čejková, Ph.D.

fchi.vscht.cz/svk

SPONZOŘI ÚSTAVU FYZIKÁLNÍ CHEMIE

Bude doplněno po 9. 11. 2026

Alloyed 2D Ni/Co-HITP metal-organic frameworks in polymeric mixed-matrix membranes for enhanced CO_2 separation

Anna Barchánková (B3)

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

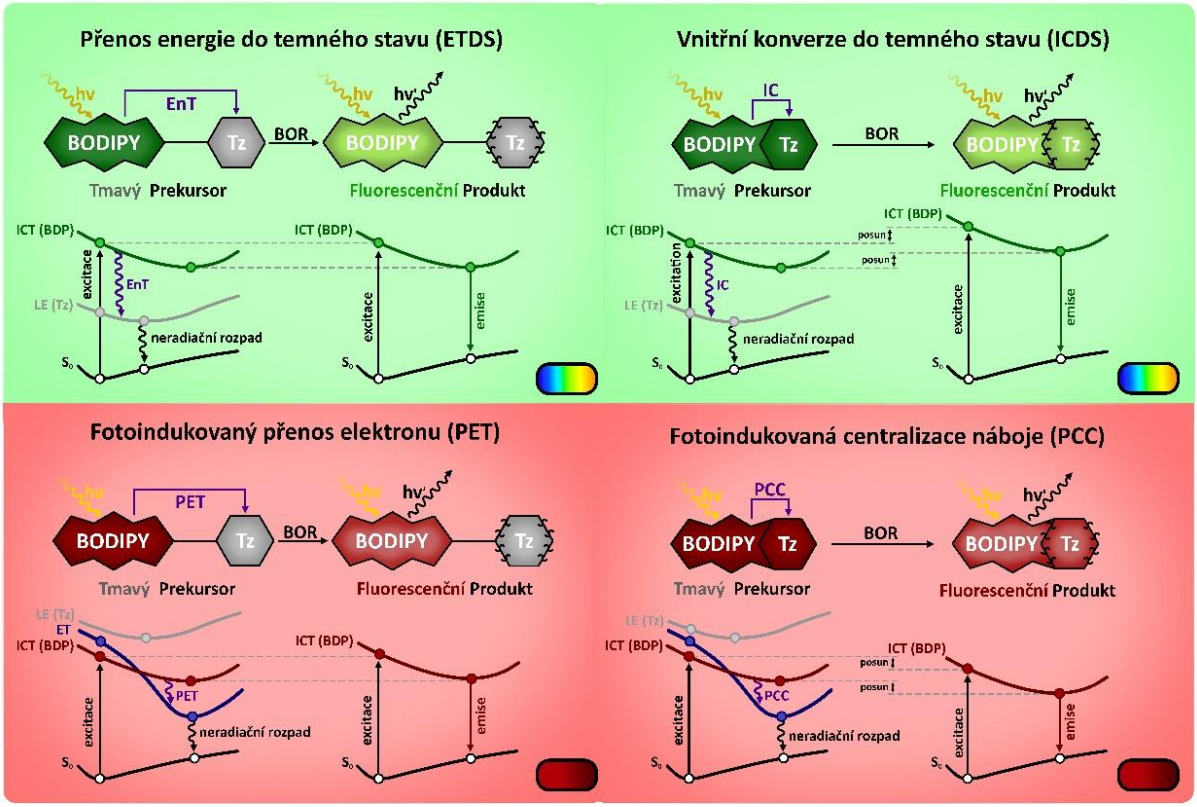
A promising strategy to mitigate anthropogenic CO_2 emissions is to apply membrane separation technology. Polymer membranes are widely used for this due to their ease of processing, cost-effectiveness, and capacity to tailor molecular gas transport. However, neat polymers generally exhibit limited ability to separate gases effectively. The mixed matrix membrane (MMM) concept, which incorporates a dispersed selective filler within the polymer matrix, has been shown to enhance separation performance. Metal-organic frameworks (MOFs) are a particularly promising class of novel advanced nanoadditives in MMMs because their structures are highly variable and modifiable. This work focuses on fabricating and embedding 2D MOFs, $Ni_3(HITP)_2$ and $Co_3(HITP)_2$, and their mixtures, into cellulose triacetate (CTA) and polyether block amide (PEBA) polymers. The primary objective is to compare how the prepared additives affect membrane morphology, permeability, and gas separation performance. Structural analyses (XRD, FTIR) of the prepared materials were conducted. Single-gas permeability experiments were performed at 25 °C and 1 bar using a time-lag method. The evaluated gas separation performance for CO_2/N_2 and CO_2/CH_4 demonstrates the impact of embedded 2D MOFs in MMMs compared to neat polymers.

Ab initio studie zhašení fluorescence v komplexech BODIPY–tetrazin

Bc. Vladislav Bojko (M1)

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

Práce se zabývá mechanismem zhášení fluorescence BODIPY tetrazinem a vlivem typu propojení obou fragmentů na relaxaci excitovaných stavů. Studovány byly dva modelové komplexy s přerušenou a spojitou π–konjugací, jejich fragmenty a produkty aktivační reakce. Výpočty elektronové struktury a optických spekter byly doplněny neadiabatickou molekulovou dynamikou. U obou komplexů je nejnižším excitovaným stavem temný stav tetrazinu. Po aktivační reakci se posouvá nad světlý stav BODIPY, což vysvětluje obnovení fluorescence. Vibronické výpočty lépe reprodukují vibrační strukturu absorpčního spektra tetrazinu a asymetrii absorpčního pásu BODIPY než metoda jaderných souborů. Emisní spektra zachycují zesílení emise po reakci, jeho velikost však experimentu neodpovídá. Dynamické simulace naznačují, že propojení fragmentů zpřístupňuje rychlé nezářivé deaktivační cesty. U komplexu se spojitou π–konjugací zůstávají vyšší excitované stavy obsazeny déle. Metoda ODM2/MR-CISD však předpovídá rychlou relaxaci do základního stavu i u izolovaného modelu BODIPY. Výsledky jsou proto předběžné a jejich spolehlivost bude ověřena multireferenčními metodami.



Predikce rozpustnosti drog pomocí COSMO-RS: Validace a výhled

Nela Březinová (B3)

Školitel: Ing. Martin Klajmon, Ph.D.

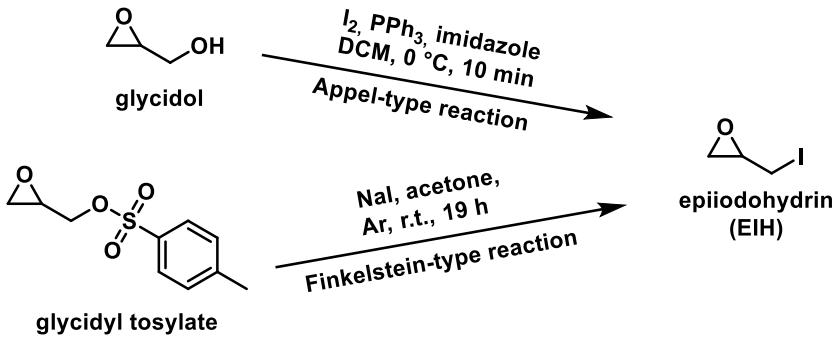
Rozpustnost a rozdělovací koeficienty určují distribuci a chování psychoaktivních látek. V analytické a forenzní praxi však experimentální data často chybí kvůli legislativním omezením, vysoké ceně referenčních standardů a neustálému vzniku nových syntetických analogů. Cílem této práce je využití prediktivního modelu COSMO-RS, propojujícího kvantově-chemický popis molekul s výpočty fázových rovnováh, pro určení rozpustnosti vybraných psychoaktivních látek v širokém spektru rozpouštědel. Jako důležitý první krok byla provedena validace na modelových drogách (např. morfin, kokain, heroin), u nichž byly predikované hodnoty a trendy rozpustnosti porovnány jak s dostupnými experimentálními daty, tak s výsledky COSMO-RS pro jiné druhy rozpuštěných látek. Průměrná odchylka predikce od experimentálních rozpustností činí přibližně jednu logaritmickou jednotku, přičemž model věrně reprodukuje kvalitativní trendy rozpustnosti. Spolehlivost metody COSMO-RS je u sledovaných drog srovnatelná s výsledky pro jiné rozpuštěné látky (léčiva a aditiva do polymerů) obdobné molekulární složitosti. Zvláštní pozornost je věnována vodné rozpustnosti a vlivu pH na extrahovatelnost i chování drog při LC-MS a GC-MS analýze. Přístup bude dále aplikován na analogy a nově objevující se syntetické deriváty stojící mimo seznamy kontrolovaných látek. Výsledky poslouží k tvorbě prediktivní databáze vlastností experimentálně dosud nepopsaných látek, která umožní forenzní praxi držet krok s nelegálním vývojem nových drogových analogů.

Preparation and Characterization of Epiiodohydrin Enantiomers for Time-Resolved Photoelectron Circular Dichroism Studies

Jiří Brouček (B2)

Školitel: Ing. Tereza Navrátilová, Ph.D.

Recent advances in generation of extreme ultraviolet (EUV) circularly polarized (CP) pulses have opened new experimental directions, time-resolved photoelectron circular dichroism (TR-PECD) spectroscopy being one of them. In our experiment, we aim to investigate halogen photodissociation from a parent chiral molecule. In this process, the epihalohydrin molecule undergoes C–X bond cleavage while retaining molecular chirality on femtosecond timescale. The planned experiment will combine linear polarized (LP) and CP EUV laser pulses in a pump-probe scheme together with velocity-map-imaging spectroscopy to record TR-PECD signals. As a prerequisite for these experiments, enantiomerically pure samples of two epihalohydrins – epichlorohydrin (ECH) and epiiodohydrin (EIH) were prepared and characterized. EIH enantiomers were synthesized from enantiopure starting materials using Appel- and Finkelstein-type reactions (Fig. 1), both proceeding with the expected SN2 reaction mechanism. The prepared compounds were characterized by NMR spectroscopy and GC-MS analysis. Their electronic properties were investigated by UV-Vis spectroscopy and compared with theoretical calculations, showing good agreement between theory and experiment. Enantiomeric purity was confirmed by analytical-scale HPLC employing a chiral column. In this way, suitable samples for the ongoing experiments were successfully prepared.



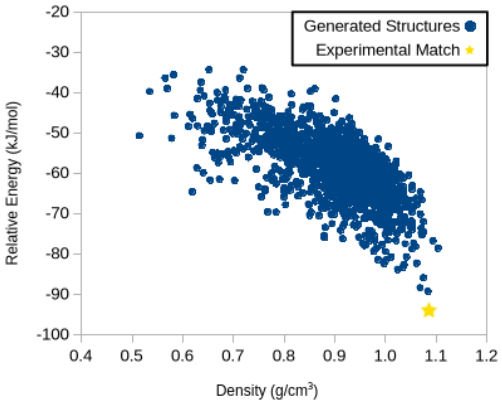
Synthetic procedures used for preparation of epiiosdohydrin enantiomers.

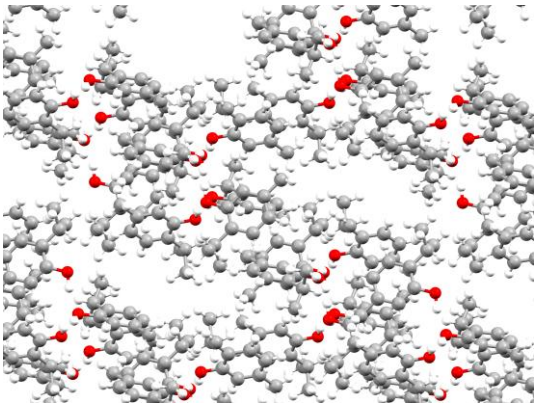
In silico resolution of the potential of thymol and camphor to form deep eutectic solvents or cocrystalline phases

Jakub Červenka (B3)

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

Organic solvents are indispensable across the chemical, pharmaceutical, food and extraction industries, yet many of the conventional ones are volatile, flammable, hazardous or environmentally persistent, and their emission is subject to increasingly strict regulation. Deep eutectic solvents, solve many of these problems by being made from two compounds that are solid at room temperature, but that become liquid when mixed. Their components can be of natural origin, such as thymol and camphor, and the resulting mixtures can also be renewable, low in toxicity and biodegradable, making them promising green replacements for conventional organic solvents. However, mixtures of two molecular components can end up either as an eutectic liquid or as a cocrystalline solid, and it is not obvious in advance which of the two will form. In this thesis, I use molecular-dynamics simulations and crystal structure prediction to assess the potential of thymol, ±camphor and other similar compounds to form eutectic or cocrystalline phases, and to uncover the molecular mechanisms behind this behaviour.



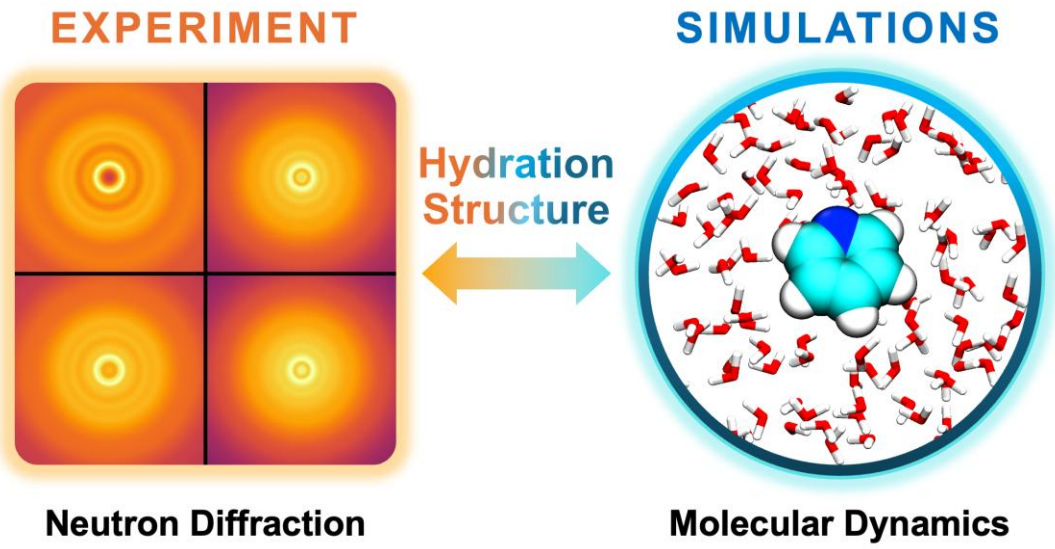


Resolving Pyridine Hydration by Neutron Scattering and Molecular Simulations: Toward Transferable Models of Nitrogen Heteroaromatics

Bc. Matěj Červenka (M1)

Školitel: Hector Martinez-Seara Monne, Ph.D.

Nitrogen-containing aromatic heterocycles are essential components of biomolecules, including the nucleobases of DNA and RNA. Pyridine, as one of the simplest nitrogen heteroaromatics, can serve as a model system for understanding their hydration. Despite extensive experimental and computational studies of aqueous pyridine, detailed experimental insight into its microscopic hydration structure remains limited. Here, we address this gap by neutron diffraction with double isotopic substitution to resolve pyridine–water interactions at atomistic level. We complement the experimental measurements with *ab initio* molecular dynamics, and its variant using machine learning potentials, to gain further insight into the complete three dimensional hydration structure. By combining experimental observations with machine learning powered ab initio level molecular simulations reaching tenths of nanoseconds, we identified and corrected shortcomings in classical force fields, improving their description of hydration around the aromatic nitrogen of pyridine. Ultimately, this work lays the groundwork for more accurate and transferable models of nitrogen heteroaromatics, with potential applications in biomolecular simulations of nucleic acids and other biologically relevant systems.



Ab initio studium fototerapeutických donorů na bázi rhodaminu

Bc. Filip Čížek (M1)

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

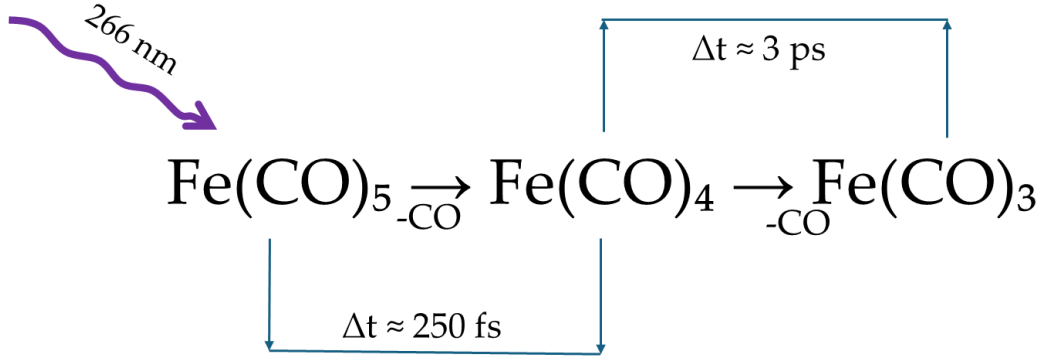
Fotoaktivované uvolňování CO a NO z donorů na bázi rhodaminu je slibnou cestou k lokální terapii infekcí vyvolaných bakteriemi rezistentními vůči antibiotikům. Po ozáření zeleným světlem uvolňuje duální donor AhCR565 jak NO, tak CO, avšak mechanismus této reakce dosud nebyl teoreticky potvrzen. Konečným cílem této práce je studium fotodisociace pomocí neadiabatických molekulárně-dynamických simulací s využitím moderních semiempirických technik MRCISD-OMx. Tento příspěvek je zaměřen na stanovení dvou klíčových aspektů pro metodologicky korektní fotodynamické simulace: (1) volbu vhodného aktivního prostoru zmíněné multireferenční metody a (2) stanovení vhodné geometrické distribuce základního stavu. Aktivní prostor bude zvolen na základě optimalizovaných skenů podél disociační koordináty, zatímco distribuce geometrií základního stavu bude vybrána na základě výpočtu elektronových absorpčních spekter pomocí pokročilejší techniky *nuclear ensemble approach* (NEA).

Theoretical investigation of iron pentacarbonyl photodynamics

David Fiala (B3)

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

Studying photodynamics in organometallic complexes leads to a better understanding of mechanistic pathways during catalytic reactions and their catalytic activity. Iron pentacarbonyl [$Fe(CO)_5$] is a prototypical system for studying such dynamics. With the latest developments in the field of ultrafast spectroscopy, many remaining questions about the ultrafast excited state dynamics of [$Fe(CO)_5$] can be answered. Generally, exciting gas-phase iron pentacarbonyl with 266 nm light populates bound valence excited states, which decay towards dissociative states on a femtosecond timescale. This process yields the [$Fe(CO)_4$] fragment. Subsequently, this vibrationally hot intermediate loses a second CO ligand, yielding [$Fe(CO)_3$] on a few-picosecond timescale. The aforementioned reaction is probed with extreme ultraviolet light with a femtosecond resolution, producing ultrafast transient absorption spectra. In my work, I focus on theoretical modelling of the first reaction step experimentally studied by our colleagues at ETH Zürich. Herein, I present static M-edge absorption spectra of [$Fe(CO)_5$] at different levels of theory, a first glance at simulated ultrafast transient absorption spectra, and a comparison to experimental data.



Molecular dynamics simulations of synthetic plastic oligomers at model lipid membranes

Michal Fox (B3)

Školitel: doc. Mario Vazdar, Ph.D.

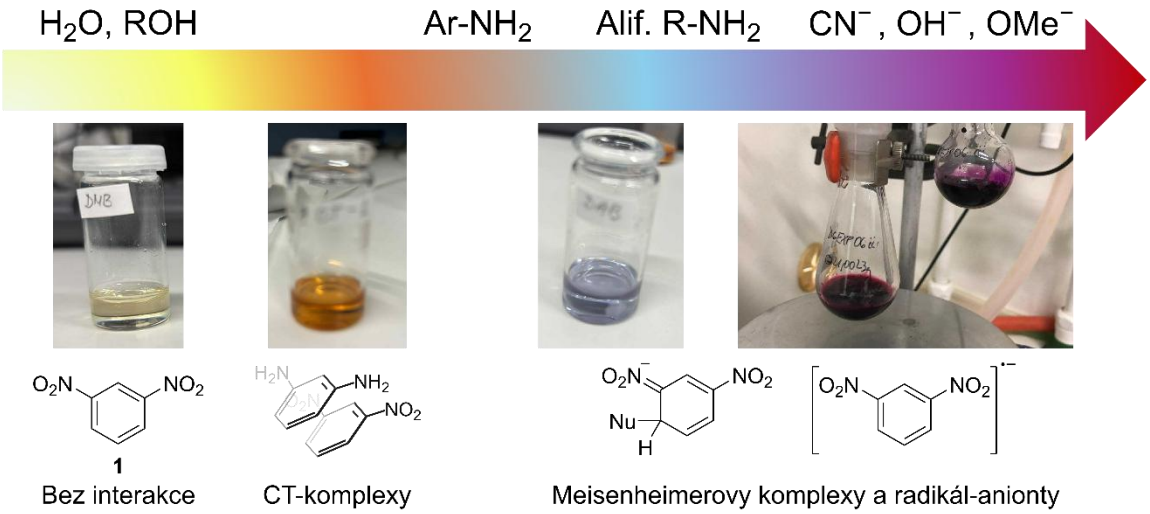
One of the largest environmental problems the world faces today is the abundance of plastic pollutants in the environment. Plastics in ecosystems physically and chemically degrade into smaller subunits such as micro and nano plastics and eventually even further into oligomers and monomers. While research has focused on the adverse effects of micro and nano plastics, the toxicity of synthetic oligomers remains poorly understood. Performing in vivo experiments on these compounds presents many hurdles. Therefore, computational methods could be chosen as a viable addition to experiments. Molecular dynamics (MD) offers a framework to model the interactions between synthetic plastic oligomers and lipid membranes. Bis(2-Hydroxyethyl) terephthalate (BHET) was chosen as the model oligomer, which is produced during the depolymerization of polyethylene terephthalate (PET) – a common plastic polymer. In this work, we performed MD simulations of BHET interacting with phosphocholine (PC) and phosphoethanolamine (PE) model membranes and analyzed the interaction patterns between them. The simulation results will be compared with available experimental data.

Studie komplexního chování donor-akceptorových systémů nitroaromát-nukleofil

Bc. David Gabaj (M1)

Školitel: Ing. Karolína Salvadori, Ph.D.

Interakce elektronově deficitních aromatických systémů s nukleofily mohou probíhat prostřednictvím řady nekovalentních interakcí nebo vést k chemickým reakcím. Oba typy dějů přitom bývají doprovázeny výraznými barevnými změnami. Ty však samy o sobě neposkytují dostatečné informace o tom, co se v roztoku skutečně odehrává. Cílem našeho výzkumu je proto objasnit průběh interakcí nukleofilů s vybraným elektronově deficitním systémem a identifikovat jednotlivé procesy odpovědné za zaznamenané optické změny. Ke studiu bylo využito vedle elektrochemických metod, preparativních elektrolýz, a řady spektroskopických technik (NMR, EPR, UV–Vis, IR) i kvantově-chemické modelování. Na základě elektrochemické charakterizace 30 nitroaromatických sloučenin a korelace výsledků s kvantově-chemickými výpočty byl jako modelový substrát zvolen 1,3-dinitrobenzen (**1**). Tato látka společně se slabými nukleofily (H_2O, ROH) neinteraguje, nicméně s aromatickými aminy ochotně tvoří CT komplexy. Společně s aniontovými nukleofily (MeO^-, OH^-, CN^-) dochází u látky **1** k rozrušení aromaticity systému a tvorbě Meisenheimerových σ^H-komplexů, které jsou v roztoku doprovázeny i radikál-anionty. Získané poznatky představují teoretický základ, využitelný při návrhu supramolekulárních receptorů a elektrochemické syntéze.



Experimentální termodynamická studie léčivých látek

Lucie Hampejsová (B3)

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

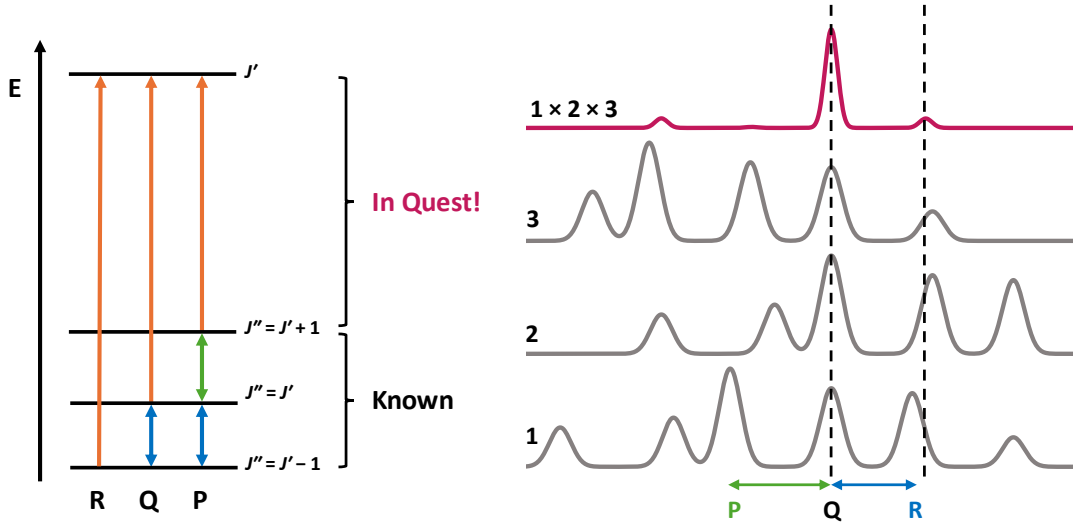
Velká část léčivých látek včetně nifedipinu a naproxenu tvoří více krystalických forem (polymorfů), které se liší svými fyzikálně-chemickými vlastnostmi, jež mohou výrazně ovlivňovat jejich terapeutický účinek. Nifedipin i naproxen patří podle Biofarmaceutického klasifikačního systému (BCS) do třídy II, což znamená, že jejich biologická dostupnost je limitována rychlostí rozpouštění. Proto by bylo žádoucí použít v lékových formulacích některé rozpustnější formy, které jsou z termodynamického hlediska méně stabilní. Jedním z přístupů, jak stanovit vzájemnou termodynamickou stabilitu, je porovnání tlaků nasycených par jednotlivých krystalických forem. Záměrem této práce bylo připravit pomocí publikovaných postupů různé polymorfy nifedipinu a naproxenu a změřit jejich tlaky nasycených par v závislosti na teplotě. Žádným z vyzkoušených postupů se ovšem nepodařilo připravit čistou metastabilní formu, proto byly tlaky nasycených par zatím změřeny pouze pro (*S*)-naproxen. Pro měření tlaku nasycených par v rozsahu teplot 388–423 K byla použita statická aparatura STAT9. Přestože mnou stanovené tlaky nasycených par jsou v přiměřené shodě s výsledky Buchholze a kol. (2016), teplotní závislost se znatelně liší, což vede i k odlišným hodnotám sublimační entalpie.

Developing a Novel Method for Rovibrational Spectral Assignment in Complex Overtone Spectra

Marie Holá (B3)

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

Rovibrational spectroscopy is an essential tool for investigating overtone transitions, which are relevant to reaction dynamics in Earth's atmosphere and interstellar space. To fully exploit the information encoded in overtone spectra, individual spectral lines must be accurately assigned to their corresponding quantum states represented by set of quantum numbers. However, interactions between multiple vibrational states create complex spectral structures that make line assignment particularly challenging, often rendering standard fundamental-band approaches inapplicable. This study proposes a semi-automated assignment method based on cross-correlation analysis between measured overtone spectra, implemented in Python. The method is tested on experimental data obtained for methyl chloride in the $2\nu_4$ overtone region (6000–6035 cm^{-1}), focusing on selected K sub-bands of the parallel band (A_1 symmetry). The measured spectrum contains overlapping lines of the two naturally occurring isotopologues, $CH_3{}^{35}Cl$ and $CH_3{}^{37}Cl$, which further complicate the assignment. The approach aims to provide a systematic framework for overtone spectral assignment, with future work focusing on its extension to the perpendicular bands.

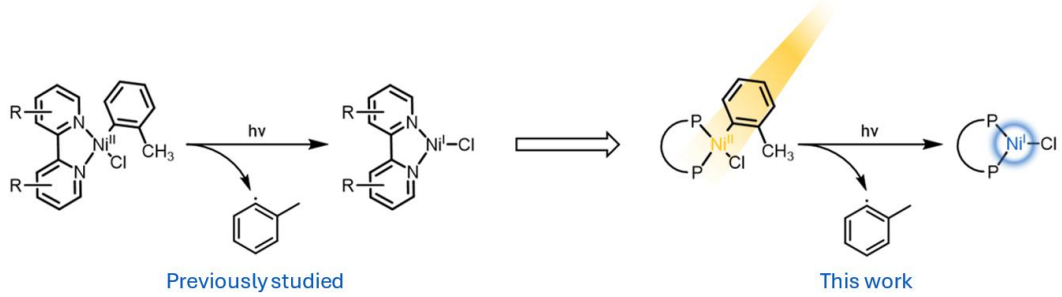


Relationship Between Structure and Photochemical Reactivity of Phosphine-Based Nickel Complexes

Filip Holeček (B3)

Školitel: Ing. Daniel Bím, Ph.D.

Nickel is increasingly popular in organic catalysis for its distinctive reactivity compared with traditional palladium catalysts, with Ni^{I} species serving as one of the key intermediates in many transformations. However, Ni^{I} oxidation state is highly unstable, motivating the development of reliable methods for its *in-situ* generation. We report on the photoactivity of (phosphine)Ni^{II}ArCl complexes and their potential as accessible sources of Ni^{I} through direct irradiation. Our work focuses on synthesis and characterization of nickel complexes with varying phosphine ligands differing in electron-donating ability, steric hindrance and, for bidentate ligands, bite angle. Studied complexes, obtained commercially or prepared by a two-step synthesis, generate Ni^{I} species upon irradiation with 385 nm light. Photogeneration of Ni^{I} was supported by the comparison between spectra collected during photochemical irradiation of DCPFNi^{II}(*o*-tolyl)Cl (DCPF = 1,1'-bis(dicyclohexylphosphino)ferrocene) with the spectra of DCPFNi^{I}Cl obtained through spectroelectrochemistry, and independent chemical synthesis. Kinetic studies of photoactivation processes were carried out, showing first-order kinetics. Lastly, photoactivation quantum yields were determined and correlated with varying ligand properties.



Extension of Ni^{I} photogeneration by direct irradiation from previously studied bipyridine-based to currently researched phosphine-based nickel complexes.

Quantifying Chiral Sensitivity in Modern Protein Force Fields

Bc. Aneta Hrádková (M2)

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

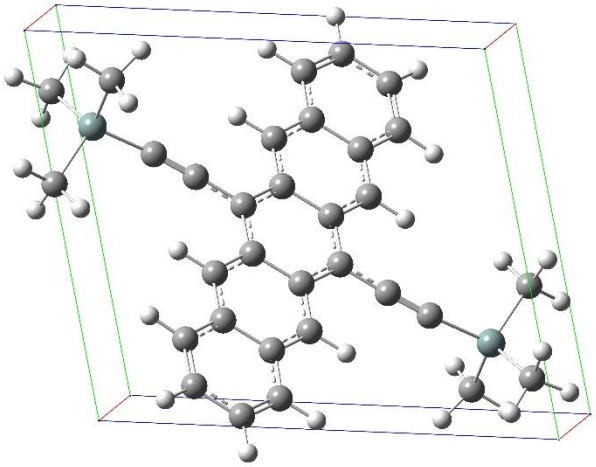
Amino acids are chiral molecules found in two forms, L and D, which are non-superimposable mirror images of each other. Proteins synthesized by ribosomes, however, consist almost exclusively of L-amino acids, whereas D-amino acids are relatively rare in naturally occurring proteins. Because of this strong biological preference, commonly used molecular mechanics force fields have been parametrised primarily for L-peptides and applying them on D-peptides or peptides consisting of a combination of L- and D-amino acids can lead to inaccurate results. Some force fields contain energy terms dependent on backbone torsion angles, mainly ϕ and ψ. While these terms improve the accuracy of the force field for L-peptides, mirroring a molecular structure changes the signs of its torsion angles, which can affect the calculated potential energy of the system. In this work, I investigate the influence of chirality on two modern force fields, AMBER ff19SB and CHARMM36m, by performing molecular dynamics simulations of two model systems: Trp-Cage and an α-helix consisting of ten alanine residues (10Ala), and their mirrored images. The aim is to quantify the sensitivity of each force field to molecular chirality and assess its effect on protein behaviour with focus on its secondary structure.

Studium vlivu morfologie molekulárních krystalů na elektronické vlastnosti organických polovodičů

Bc. Jiří Hrubant (M1)

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

Organické polovodiče představují významnou skupinu materiálů, která v posledních desetiletích získává stále větší pozornost v oblasti moderní elektroniky a optoelektroniky. Jedná se o organické molekuly nebo polymery s konjugovaným systémem, jejichž elektronické vlastnosti lze významně ovlivňovat prostřednictvím změny chemické struktury nebo molekulárního uspořádání. Tato možnost umožňuje cíleně upravovat například optické absorpční vlastnosti, energetické hladiny nebo transport náboje, a organické polovodiče tak nacházejí uplatnění v celé řadě aplikací. Ve své práci zkoumám vliv teplotní roztažnosti a stlačitelnosti a polymorfismu způsobenými vnějším tlakem na elektronovou strukturu polovodičů, které by mohly najít využití jako tzv. *Organic Solar Cells*. Ke studiu vlastností využívám *ab initio* kvantově-chemických metod a kvazi-harmonického modelování fononů krystalové mřížky.



Exciting the Excess Electron: On a Path to Enhanced Reactivity

Bc. Zuzana Hybnerová (M2)

Školitel: Dr. Hanns Christian Schewe

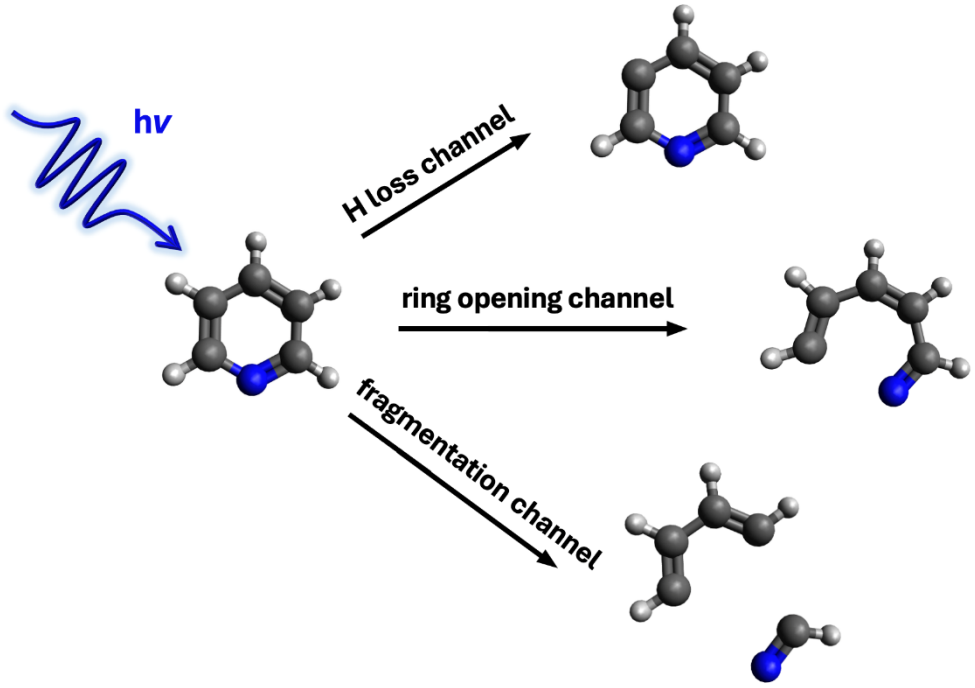
Radical anions of aromatic hydrocarbons serve as key highly reactive intermediates in a wide range of chemical reactions, such as the Birch reduction. They are typically formed in an electron transfer process from an alkali metal (assumed to take place via a solvated electron intermediate) into an unoccupied π^* valence orbital. Previous work was focused on studying their electronic structure through various methods of computational chemistry and attempting to include effects present within the measured UV-VIS absorption spectra for a better description. Their optical properties make them suitable candidates for photoredox chemistry as they absorb light significantly within the UV-VIS-NIR spectroscopic range. Exciting the excess electron should lead to enhancing their reductive properties through an increase in the redox potential. As this research is still ongoing, preliminary results on both the theoretical and experimental side are presented.

Theoretical Insight into Core Level Spectroscopy of Pyridine

Matouš Janda (B3)

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

Recently, spectroscopy has undergone great advancements leading to new experimental techniques utilizing high energy light pulses in the soft X-ray range. These pulses allow to probe K-edge spectra of several elements at once. Furthermore, specificity to a particular element is inherently combined with ultrafast time-resolution since these pulses are generated with time duration of few femtoseconds. As such, core-level transient absorption spectra can be recorded to study molecules with unprecedented temporal and energy resolution, enabling novel insight into dynamics of photoinduced processes. Here, I am focusing on theoretical calculations of time-resolved X-ray absorption spectrum of pyridine molecule at carbon and nitrogen K-edges after its photoionization. The photoionization yields cation excited state which decays in few femtoseconds towards vibrationally hot cation ground state. This state can then relax through one of many possible pathways, such as hydrogen loss, ring opening, or fragmentation. These pathways are identified from ab initio molecular dynamics trajectories. Afterwards, X-ray spectrum is calculated at selected time steps, providing a theoretical result which is directly comparable with experimental data. This will ultimately lead to understanding of photoinduced processes in a pyridine molecule in the gas phase.



Optimalizace sol-gel syntézy pigmentů typu Ca_2MgWO_6

Bc. Karolína Jasanská (M2, Univerzita Pardubice)

Školitel: doc. Ing. Žaneta Dohnalová, Ph.D.

Předmětem této práce je optimalizace citrátové sol-gel metody pro přípravu pigmentů typu Ca_2MgWO_6 dopovaných kobaltem a molybdenem. Tyto sloučeniny byly syntetizovány s cílem získat červené zbarvení prostřednictvím ovlivnění šířky zakázaného pásu základní hostitelské struktury Ca_2MgWO_6. V průběhu syntézy byl studován vliv pořadí přídavku kyseliny citronové, roztoků dusičnanů a wolframového prekurzoru na vlastnosti výsledného produktu. Rozdíl v pořadí se projevil na složení výsledného produktu. Současně byl sledován vliv doby kalcinace při 1250 °C, kdy byly vzorky kalcinovány při různé době zádrže na dané teplotě. Z výsledků vyplynulo, že doba kalcinace (5 a 10 h při 1250 °C) nemá významný vliv na fázové složení výsledných vzorků. Fázové složení vznikajících produktů bylo v jednotlivých krocích syntézy sledováno pomocí rentgenové difrakční analýzy (XRD). U finálních pigmentů byla dále stanovena distribuce velikosti částic a bylo provedeno testování aplikovatelnosti pigmentů do pojiva za účelem hodnocení barevných vlastností. Získané výsledky pomohly k optimalizaci syntézy a popsání podmínek vedoucích k přípravě pigmentů vhodných pro aplikaci do pojivových systémů.

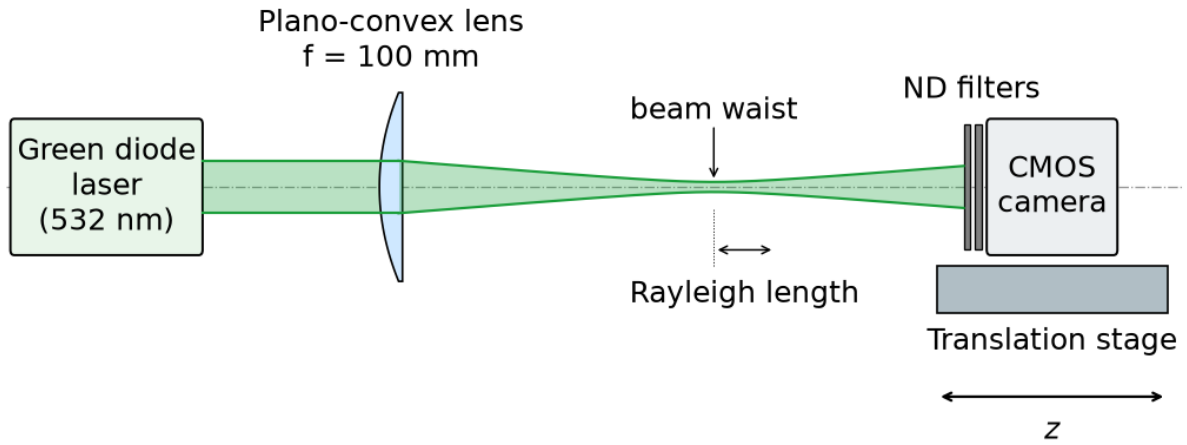
Poděkování: Projekt byl financován pomocí grantu SGS_2026_006 Univerzity Pardubice.

Construction and Application of a Low-Cost Laser Beam Profiler

Marek Jelínek (B3)

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

Lasers are essential tools in physical chemistry, and their output beam parameters directly affect outcomes of experiments. Manufacturers specify some beam parameters, but these have to be independently verified before the laser is used. One of the most important parameters is the beam profile around the focal point. A beam profile can be measured by expensive commercial beam profilers, which are therefore not suitable for routine checks in the laboratory. The aim of this work was to build a simple, low-cost profiler from components available in our optical laboratory. A scientific camera placed on a translation stage records the spatial intensity distribution at different positions along the beam propagation direction, before and after the focus. Parameters such as beam waist size, Rayleigh length, divergence, and M^2 factor are obtained from these images. Together, these characteristics determine the achievable intensity and the size of the probed volume, which is crucial for nonlinear processes and pump-probe spectroscopy, where the signal scales with a high power of the intensity. The setup was tested on a green diode laser and compared with the manufacturer's specifications. The approach allows any laser in the laboratory to be routinely checked before further experiments.

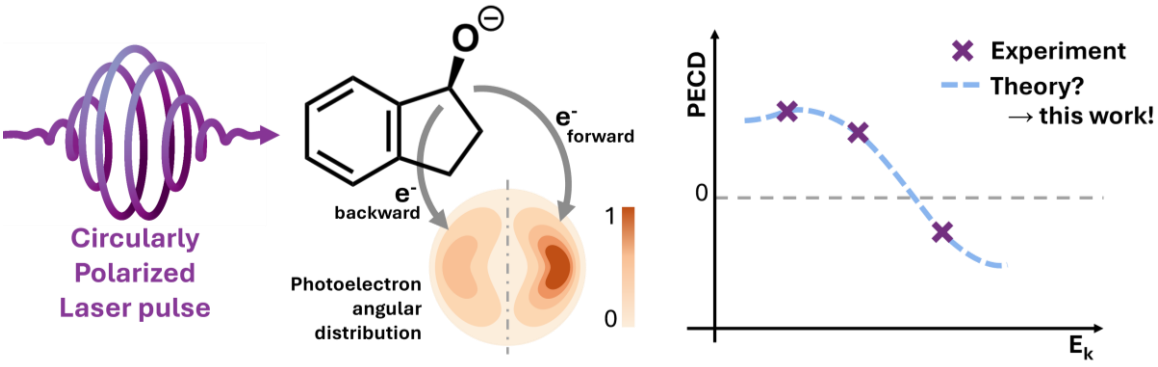


Theoretical Modelling of PECD Spectra of Deprotonated 1-Indanol

Magdaléna Jursová (B3)

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

Photoelectron circular dichroism (PECD) is a forward–backward asymmetry in the angular distribution of electrons emitted from a chiral molecule upon interaction with circularly polarized light. PECD spectroscopy provides a sensitive probe for investigating molecular chirality as well as the electronic and structural properties. In neutral molecular systems, PECD has been extensively studied. However, its experimental observation in molecular anions has been reported only recently, and the theoretical description anion PECD is in its infancy. This work focuses on the theoretical modelling of PECD signal arising from deprotonated *S*-1-indanol. The photoelectron angular distribution produced during electron photodetachment is described and the applicability of PECD modelling approaches commonly used for neutral systems to the description of molecular anions is assessed. The simulated PECD signal is analyzed with respect to its magnitude and characteristic features and compared with published experimental data. In the future, other anions will be analyzed analogically to investigate how molecular structure and electronic properties influence the resulting PECD signal. The results obtained will contribute to a better understanding of chiral molecular anions.



Kalibrace a vyhodnocení přesnosti vysokotlakého hustoměru DMA 4200 M

Jáchym Karbulka (B3)

Školitel: Ing. Pavel Morávek, Ph.D.

Tato práce je zaměřena na určení přístrojových konstant hustoměru Anton Paar DMA 4200 M a ověření stanovené přesnosti přístroje. Pro plné využití přístroje je nutné kalibraci a kontrolu přesnosti přístroje provádět přes co možná největší pracovní rozsah, v této práci od vakua po 50 MPa a od laboratorní teploty po 200 °C. Pro účel seznámení se s přístrojem je kalibrace prováděna pomocí vakua a vody. V práci je uveden podrobný popis přístroje, rešerše stávajících prací, ve kterých je tento hustoměr použit, metodika měření a návrh vyhodnocení přesnosti přístroje.

Theoretical Insight to Time-Resolved Photoelectron Circular Dichroism of Epichlorohydrin

Ondřej Kejzlar (B3)

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

Photoelectron circular dichroism (PECD) spectroscopy is a method sensitive to molecular chirality. It manifests as a forward–backward asymmetry in the photoelectron angular distribution relative to the propagation direction of circularly polarized light. Combining PECD with a pump–probe approach enables time-resolved PECD (TR-PECD) to track ultrafast photochemical dynamics in real time of the investigated process. In this study, epichlorohydrin serves as a model system, in which a pump pulse triggers carbon–chlorine bond cleavage, and a time-delayed circularly polarized probe pulse captures the evolving chirality changes during the dissociation. Interestingly, these TR-PECD data represents a case where the photodissociation does not occur at the chiral centre. This work provides necessary theoretical backbone to interpret experimental data from the TR-PECD experiments. Ground and excited-state trajectories are calculated using ab initio molecular dynamics in the ORCA quantum chemistry suite. From photoionization matrix elements calculated using the ePolyScat package, time-resolved photoelectron angular distributions are predicted and factored into individual dynamical coefficients, where $b_1(t)$ represents the chiral signal related to PECD at various pump-probe delays t.

Ab initio study of effects of dry and wet hydrogen on the iron embrittlement using an icosahedral Fe_{13}

Šimon Kilián (B3)

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

Transitioning to sustainable energy relies on improving high-pressure hydrogen storage, where material selection balances cost against degradation. While low-cost steel alloys suffer from hydrogen embrittlement and expensive composites withstand higher pressures, this work elucidates the reaction pathways of iron corrosion and embrittlement, contrasting pure H_2 reactivity with realistic scenarios containing trace H_2O and O_2. Density Functional Theory (DFT) calculations were performed using the GGA functional BP86 with D3BJ dispersion correction. Computations employed the def2-TZVP basis set. The unrestricted Kohn–Sham (UKS) formalism was employed due to the metallic electronic structure and radical intermediates. Substrates were modelled using an icosahedral Fe_{13} cluster framework, as well as a central-vacancy cluster to evaluate subsurface embrittlement mechanisms. Initial energy profiles were scanned along key reaction coordinates using constrained geometry optimizations. The boundary geometries were subsequently processed via Geodesic Interpolation (GI) to map reaction pathways and identify candidate transition states. Transition State (TS) optimizations and frequency analyses were conducted to calculate activation energies. Hydrogen dissociation is exergonic on both pristine Fe_{13} (ΔG = −79.37 kJ/mol / −0.82 eV) and hydrated Fe_{13}–H_2O (ΔG = −44.96 kJ/mol / −0.47 eV). However, co-adsorbed H_2O introduces an activation barrier of E_a = 21.02 kJ/mol (0.22 eV), contrasting with the barrierless process on pure Fe_{13}.

EUV Source Chemistry: Reduction of Sn-Ions by Molecular Hydrogen

Bc. Jan Koreš (M2)

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

Extreme ultraviolet (EUV) lithography is a recent major advancement for the semiconductor industry, which allows printing tiny features onto silicon wafers for the production of advanced computer chips. A tin plasma is used as a source of 13.5 nm EUV light. However, the plasma also emits high-energy, highly charged Sn ions, which damage the optics collecting the EUV light. To prevent this, the plasma is surrounded by hydrogen gas. This slows down and reduces the emitted ions. The reduction process is successfully used in practice, yet the quantitative characteristics and molecular understanding of elementary processes are unclear. Previously, I have tried exploring these reactions using constrained density functional theory and Landau–Zener ab initio molecular dynamics. Although theoretically suitable, so far the approach has reached its technical limitations. Therefore, other approaches for modelling excited states have to be considered. These are currently orbitally optimised DFT (OO-DFT) and XMS-CASPT2. These approaches are explored and validated for their suitability for future use in Landau–Zener molecular dynamics and the subsequent calculation of cross-sections, which are comparable to the experimental data.

Solvation Effects on the Ionization of Hydrogen Peroxide

Lucie Kotrabová (B3)

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

Life as we know it depends on molecular oxygen. In our atmosphere, it is produced as a by-product of photosynthesis, but the conditions for this reaction are not suitable for most celestial bodies. However, molecular oxygen could be produced from hydrogen peroxide, which is a product of radiolysis in water-rich ices detected on Mars, Europa and Enceladus.[1] The absorption of X-rays can ionize hydrogen peroxide molecules. The excess energy can induce the Auger–Meitner effect, leading to double ionization of the molecule. While traditional mechanisms (e.g., water photodissociation) remain poorly characterized, this proposed pathway suggests that molecular oxygen might be formed directly from doubly ionized peroxide. This study focuses on the isolated H_2O_2 molecule and the $H_2O_2{\cdot}H_2O$ and $H_2O_2{\cdot}2H_2O$ clusters. Calculations show that solvation has a significant effect on the charge distribution in the system and on the vertical and adiabatic ionization energies leading to both singlet and triplet states. The ωB97 functional with the 6-31G* basis set was used to calculate the energies and analyse the charge distribution. The results obtained at the ωB97 level were compared with multireference methods, such as CASPT2, for which a suitable active space was explored. So far, only static calculations have been performed. However, molecular dynamics simulations are planned in the future, where fragmentation methods or machine learning approaches may need to be employed to overcome the high computational costs.

(1) Newman, S. F.; Buratti, B. J.; Jaumann, R.; Bauer, J. M.; Momary, T. W. Hydrogen Peroxide on Enceladus. *The Astrophysical Journal* **2007**, *670*, L143.

All-atom Simulation Model of the Mitochondrial Ribosome

Bc. Rudolf Kvasňovský (M2)

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

Mitochondrion is a cellular organelle responsible for several crucial biochemical pathways. Mitochondrial ribosomes (mitoribosomes) are biomacromolecular complexes located within mitochondria. Mitoribosomes are responsible for performing the final step of mitochondrial genome expression - mitochondrial translation. Proper mitoribosomal function directly affects one of the central processes of cellular metabolism. Therefore, a detailed understanding of mitoribosomal behaviour is of great importance with potential applications in cancer therapy and longevity. Here we present a full all-atom simulation model of the human mitoribosome in explicit solvent. To the best of our knowledge, this is the first simulation model of a mitoribosome completed under such conditions. We use the simulation model to describe the dynamics of the selected mitoribosomal parts. We focus on comparison of the human mitoribosome with a bacterial ribosome, as these two ribosomes share a lot of structural similarities and evolutionary origin. The simulation model was validated against the available cryo-EM model using basic analytical metrics RMSD, RMSF, and radius of gyration. According to RMSD and RMSF values we have revealed the most static and the most flexible regions of the mitoribosome. Overall, our model opens a way for studies of mitochondrial ribosome dynamics at atomic detail.

Když protiklady tvoří celek: Hydrogely z hydrofobních a hydrofilních polymerů

Laura Lapčíková (B3, Vysoké učení technické v Brně)

Školitel: doc. Ing. Petr Sedláček, Ph.D.

Hydrogely jsou trojrozměrné polymerní sítě schopné absorbovat velké množství vody. Díky schopnosti napodobovat měkké tkáně mají uplatnění v tkáňovém inženýrství i transportu léčiv, jejich širší využití však omezuje nízká mechanická pevnost. Jednou z možností zlepšení těchto vlastností je zavedení hydrofobní složky do hydrogelu. Vhodnými kandidáty jsou polyhydroxyalkanoáty (PHA), například poly(3-hydroxybutyrát) (PHB). PHA se díky svým mechanickým vlastnostem využívají při přípravě porézních scaffoldů či náhrad tuhých tkání. PHB vyvolává zájem díky své biokompatibilitě a biodegradaci, ale jeho hydrofobicita a vysoká krystalinita zužují jeho potenciální využití. Kombinace hydrofilní matrice a hydrofobního PHB umožňuje přípravu hybridního hydrogelu jakožto materiálu, který kombinuje jejich vlastnosti a může tím pomoci překonat jejich dosavadní omezení. Tato práce se zaměřuje na hledání vhodného složení a podmínek pro přípravu hybridních hydrogelů. Polymery jsou rozpuštěny v dimethylsulfoxidu, následuje fotopolymerizace a vzniklý organogel je podroben gradientové výměně rozpouštědla za vodu, což vede ke vzniku hydrogelu. V závislosti na koncentraci PHB a podmínkách fotopolymerizace jsou hodnoceny změny v botnání, mechanických a optických vlastnostech hybridních hydrogelů.

Termodynamická charakterizace vybraných přísad do motorové nafty s nízkým dopadem na životní prostředí

Michaela Martínková (B3)

Školitel: prof. Ing. Květoslav Růžička, CSc.

Tato práce vychází z projektu zaměřeného na vývoj nové generace nízkouhlíkových syntetických palivových příměsí na bázi oxygenovaných etherů (OME, OEE) určených pro vznětové motory. Cílem je přispět k dekarbonizaci dopravy prostřednictvím „drop-in“ paliv využívajících obnovitelné a cirkulární zdroje, včetně biomasy, odpadních surovin a CO_2 ve spojení s nízkoemisním vodíkem. To umožňuje významné snížení emisí skleníkových plynů bez nutnosti úprav motorů a distribuční infrastruktury. Výzkum se zabývá konkrétním polyetherem – ethylenglykol dibutyletherem, který představuje potenciální příměs do motorové nafty. Problémem, který brání jeho posouzení a reálnému využití, je však kritický nedostatek experimentálních dat v odborné literatuře. Tato data jsou nezbytná pro zhodnocení chování paliva v reálném provozu vznětového motoru. Hlavním cílem práce je experimentální stanovení klíčových termodynamických a fyzikálně-chemických vlastností této látky, konkrétně tlaků nasycených par, hustoty, viskozity, tepelných kapacit, spalného tepla atd.

Photocatalyst based on Sc(III) coordination complex: Quantum chemical approach

Bc. Jan Mišek (M2)

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

This study presents a quantum chemical investigation into $\mathrm{Sc(III)}$ complexes to explore their unexpected photocatalytic activity. The primary objective is to identify the specific structure formed upon solvation of $\mathrm{Sc(OTf)_3}$ in acetonitrile that simultaneously enables the photocatalytic process and represents the energetically most favorable conformation among viable candidates. To screen for the optimal structure, individual excitation spectra are simulated and excited-state energetics are thoroughly analyzed. Consequently, this computational work focuses on a detailed description of the single-electron transfer (SET) occurring between the photoexcited $\mathrm{Sc(OTf)_3}$ complex and a reagent. Furthermore, advanced electronic structure techniques capable of describing diabatic states are utilized to examine the role of the scandium ion and precisely map the pathways and kinetic rates of the underlying elementary processes.

Tetrasubstituted Allenes as Probes of Axial Chirality in Photoelectron Circular Dichroism: Theoretical Insights

Klára Mládková (B3)

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

One of the suitable methods for probing chirality is photoelectron circular dichroism (PECD). When a circularly polarized light ionizes a chiral molecule, electrons are emitted preferentially in either forward or backward direction relative to the light propagation. This asymmetry encodes valuable information about a photoionized molecule. To show that PECD effect is not limited only to point chirality, we explore axial chirality of tetrasubstituted allene derivatives. Here, I present calculations of their electronic absorption (UV–Vis) and electronic circular dichroism (ECD) spectra. To capture realistic spectral band shapes, I extend my calculation beyond the commonly applied static approach by taking into account nuclear motion using the nuclear ensemble approach (NEA) coupled with ground-state Wigner sampling. The computational strategy combines an automated conformer search (GOAT) and Boltzmann population analysis. The results represent either jet-cooled conditions of a molecular beam in vacuum, or calculations in the liquid phase (DMSO), which are suitable for direct comparison with future experiments. Overall, these simulations establish a computational reference for axially chiral systems studied in our group.

Tailoring the Potential Energy Surface for Benzene Nonadiabatic Dynamics

Bc. Anna Mokrá (M2)

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

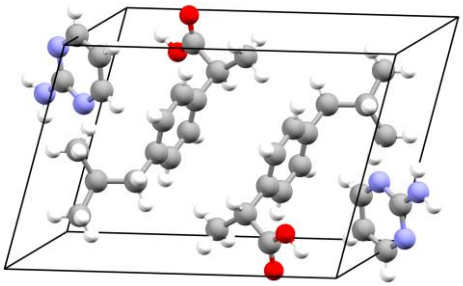
The methods of nonadiabatic dynamics (NAD) simulations are widely used to answer queries in the field of photochemistry and beyond. A discrepancy between NAD simulations of benzene has inspired the construction of a framework aimed at addressing this issue. In a previous study, the NAD methodology was utilized to simulate the dynamics of benzene deexcitation. During the simulations, the molecular electronic structure and, thus, the potential energy surfaces (PES) on which the phenomena of interest proceed were calculated using both ab initio methods–including CASPT2–and a semi-empirical method–MRCISD-OM2. While the excited-state lifetime obtained with the ab initio methods was in agreement with literature, the semiempirical results obtained with MRCISD-OM2 predicted a vastly quicker deexcitation of benzene. This is an issue worth solving, considering the far longer timescale of benzene excited-state dynamics that could be explored using semi-empirical methods due to their substantially lower computational cost relative to the ab initio methods. In the present work, I show the possible origins of this discrepancy, outline the implementation of a framework based on tailoring the PESs, and present the outcomes of the early tests and simulations implementing it.

In silico interpretace tvorby kokrystalů ibuprofenu s biokompatibilními koformery

Tomáš Mráz (B3)

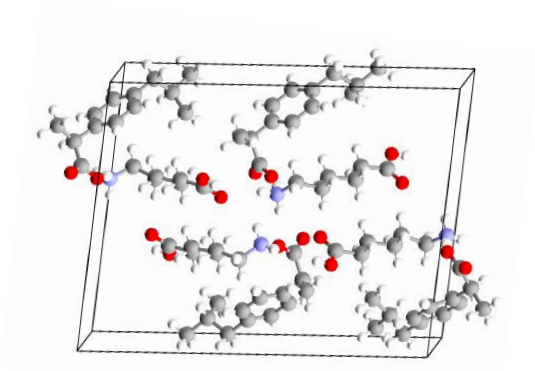
Školitel: doc. Ing. Ctirad Červinka, Ph.D.

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 2-(4-isobutylfenyl)propionovou kyselinu známou pod oficiálním názvem ibuprofen. Vyskytuje se v různých chemických formách jako 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 kokrystal, 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 léčivá látka a hostem je biokompatibilní koformer. V této práci se zabývám interpretací dvou takových systémů, z nichž první tvoří racemický ibuprofen v kombinaci s 2-aminopyrimidinem, zatímco druhý obsahuje S-ibuprofen s 6-aminohexanové kyseliny. Tyto systémy jsem studoval pomocí *in silico* výpočetních metod využívajících kvantově mechanických výpočtů a hodnocení termodynamické stability. Zaměřil jsem se na porovnání Gibbsových energií čistých látek a kokrystalů v rámci kvaziharmonické aproximace na úrovni teorie hustotního funkcionálu a na modelování acidobazické reaktivity ibuprofenu s daným koformerem s cílem posoudit možnosti přeskoku protonů vedoucích od kokrystalu k iontové soli.



Elementární krystalová buňka kokrystalu racemického ibuprofenu s 2-aminopyrimidinem

VS



Elementární krystalová buňka kokrystalu S-ibuprofenu s 6-aminohexanovou kyselinou

Mapping Substrate Entry in Glutamate Dehydrogenase: The Impact of pH, Coenzyme, and Solvent on Free Energy Profiles

Bc. Daniel Myšák (M2)

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

Living organisms regulate their functions through enzymes, whose activity is highly sensitive to the surrounding environment. While the cellular interior is densely packed with macromolecules, most *in vitro* enzyme studies rely on simple aqueous buffers, neglecting crowding effects. Using classical all-atom molecular dynamics simulations, we previously studied the effects of pH, substrates, and crowded environments on glutamate dehydrogenase (GDH) structure and dynamics [1]. Based upon this, our current research focuses on ligand access to the active site. Using steered MD and umbrella sampling, we evaluate the free energy profiles of glutamate entry under different conditions. We systematically quantify how are these energy landscapes affected by: (i) distinct pH levels, (ii) the presence versus absence of the coenzyme, and (iii) macromolecular crowding—mimicked via explicit glucose or dextran solutions. These findings provide a qualitative explanation at atomistic resolution for experimental measurements of enzyme kinetics.

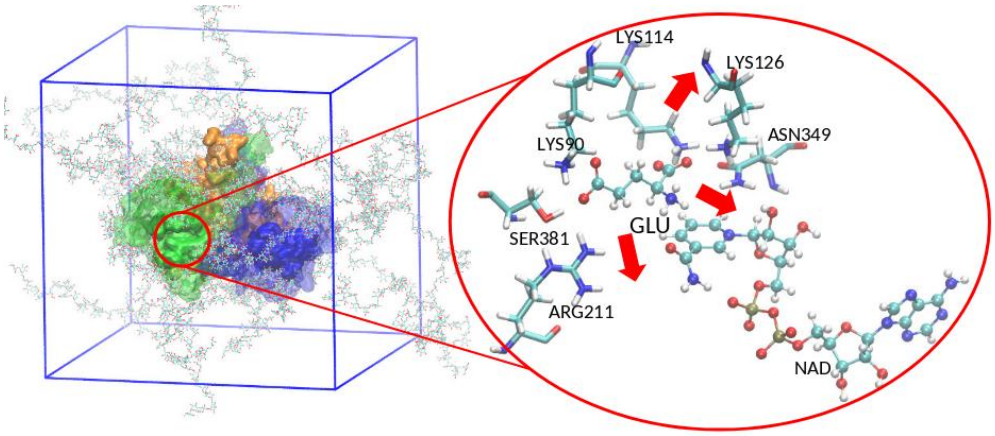


Figure 1: Our model system with zoom into the active site and highlighted three entry paths.

[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

Studium povrchových vlastností rozhraní kapalina-kapalina s ohledem na medicinální aplikace

Bc. Tomáš Navrátil (M2)

Školitel: Ing. Mária Zedníková, Ph.D.

Silikonový olej se v oftalmologii používá jako dlouhodobá náhrada sklivce. U přibližně 10 % pacientů však dochází k jeho emulgaci a drobné kapky oleje mohou pronikat do předního segmentu oka, kde zhoršují jeho funkci a v krajním případě vedou až ke ztrátě zraku. To, zda a jak snadno olej emulguje, je přitom do značné míry dáno vlastnostmi rozhraní mezi olejem a okolní vodnou fází. Práce proto studuje rozhraní silikonových olejů různé viskozity s vodnými fázemi od destilované vody přes fyziologický roztok a roztok hovězího sérového albuminu (BSA) až po modelovou komorovou vodu s lidským proteinem, doplněnými také o aditiva používaná v lékařské praxi. Mezifázové napětí je stanovováno metodou visící kapky, viskoelastické vlastnosti rozhraní pak mezifázovou smykovou reologií s bikónickou geometrií a s jednoduchým i dvoustěnným Du Noüyho prstencem. Výsledky by měly objasnit, jak přirozené složky oka a lékařská aditiva ovlivňují mezifázové napětí a elasticitu rozhraní, a tím i náchylnost silikonového oleje k emulgaci.

Vývoj, syntéza a štúdium fyzikálno-chemických vlastností nových MOF materiálov na báze azo-karboxylátových ligandov

Bc. Peter Obšatník (M2, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach)

Školitel: Mgr. Nikolas Király, Ph.D.

Kovovo-organické siete (MOF) predstavujú pórovité materiály s potenciálom využitia pri adsorpcii plynov a heterogénnej katalýze. Cieľom práce bolo štúdium štruktúrnych, adsorpčných a katalytických vlastností lantanoidových MOF materiálov pripravených na báze azo-karboxylátového ligandu H_4MTA. Solvotermálnou reakciou s dusičnanmi lantanoidov bola pripravená séria 14 materiálov Ln-MTA, charakterizovaných širokým spektrom fyzikálno-chemických metód. Štruktúrna analýza potvrdila prítomnosť 1D pórovitosti umožňujúcej adsorpciu CO_2, ako hlavnej zložky skleníkových plynov. Nízkotlaké adsorpčné izotermy sa merali pri teplotách 0 a 20 °C, pričom materiály Ln-MTA dosahovali vyššie adsorpčné kapacity ako porovnateľné lantanoidové MOF materiály. Vybrané materiály sa skúmali pri vysokotlakej adsorpcii CO_2 pri rôznych teplotách, čo umožnilo stanoviť izosterické teplá adsorpcie. Katalytická aktivita sa hodnotila pri Knoevenagelovej kondenzácii. Materiál Gd-MTA dosiahol pri 100 °C najvyššiu stanovenú konverziu spomedzi všetkých Ln-MTA materiálov (95 % so selektivitou 100 %). Skúmali sa magnetické vlastnosti a odozva materiálov na osvetlenie z hľadiska možného fotovoltaického využitia. Celkové výsledky štúdie poukazujú najmä na výrazný potenciál Ln-MTA ako adsorpčných a katalytických materiálov.

Molecular Solar-Thermal Systems: The Future of Large-Scale Energy Storage – or a Blind Alley?

Marek Plachý (M1)

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

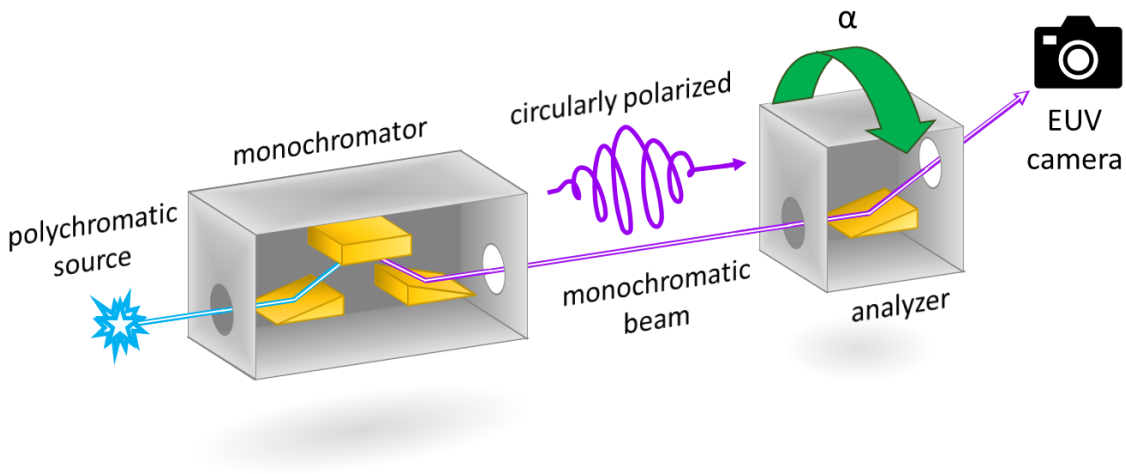
In the times when humankind has decided to transition towards renewable energy, countless engineering challenges arise; one of them is how to store the surplus energy to fulfil later demand effectively. Molecular solar-thermal (MOST) systems, which can store sunlight in the form of chemical energy, might offer a compelling alternative. We investigated photon-induced isomerisation reactions of several candidate MOST systems, such as norbornadiene and dihydroazulene and their derivatives. Reaction energetics were evaluated with electronic structure methods. Potential energy surfaces (PES) were examined using the nudged elastic band (NEB) method at the CASSCF(2,2) level, providing an estimate reaction coordinate and an initial guess for transition-state optimization. Photochemical dynamics were studied through the lens of nonadiabatic molecular dynamics (NAMD) with FSSH algorithms to evaluate the excited-state population lifetimes and photoproduct quantum yields. Various molecular descriptors and classification approaches were proposed and tested. The use of semiempirical MRCISD-OM3 theory for the NAMD simulations showed reasonable agreement with expensive electronic structure methods such as CASSCF or CASPT2. Theoretical UV–VIS absorption spectra were predicted using TDDFT on Wigner-sampled geometries. The proposed computational workflow may enable the screening of structurally different molecular frameworks and their derivatives, allowing for rational molecular design.

Polarization state analysis of EUV radiation for photoelectron circular dichroism spectroscopy of epihalohydrins

Bc. Adam Přádný (M1)

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

Chirality is an intrinsic property of many biomolecules and pharmaceuticals, and this year's Nobel Prize in Chemistry illustrates how central it has become. Beyond its applications in synthesis and biochemistry, there is a growing interest in studying chirality at a fundamental level. Photoelectron circular dichroism (PECD) spectroscopy offers a powerful probe of this phenomenon, utilizing high-energy circularly polarized light, sometimes reaching into the extreme ultraviolet (EUV) spectral region. Yet, at such short wavelengths, polarization control and characterization pose a formidable challenge: EUV light is absorbed by almost all materials, so traditional transmissive optics must be replaced by reflective metallic mirrors in vacuum. Finding suitable mirror geometries and evaluating experimental polarization data are best achieved by simulating the optical system. For this reason, I developed `stokes_mueller`, a Python package based on the combined Stokes–Müller formalism that models polarization evolution and reconstructs Stokes parameters via nonlinear regression. Here, this software toolkit is applied to analyze polarization data from recent PECD measurements of chiral epihalohydrins performed by our research group at the ELI Beamlines facility.

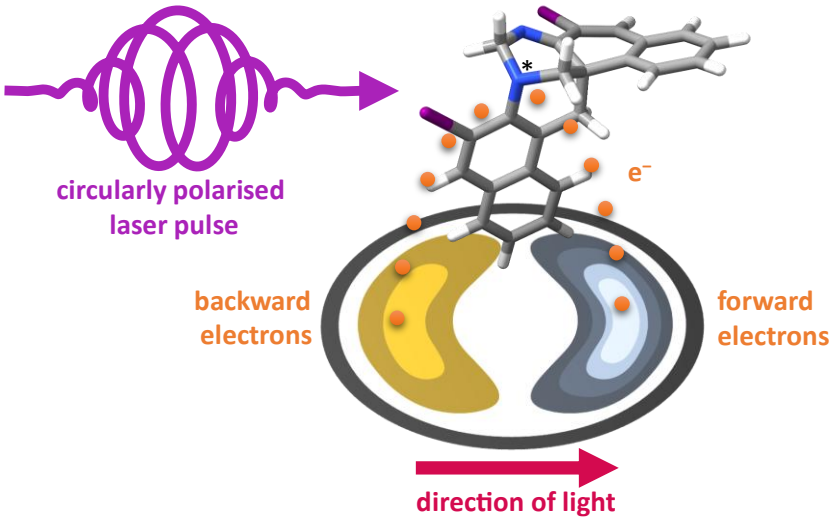


Synthesis and Characterization of an Iodinated Spiro-Tröger's Base: A Model System for Nitrogen-centred Chirality Investigation by PECD Spectroscopy

Jakub Savula (B3)

Školitel: Ing. Tereza Navrátilová, Ph.D.

Photoelectron circular dichroism (PECD) spectroscopy is a sensitive probe of molecular chirality, and its time-resolved variant can be used to study ultrafast stereodynamics. This project focuses on an iodinated spiro-Tröger's base (spiroTB) derivative having a configurationally stable nitrogen stereogenic centre, for which PECD measurement has not yet been reported. It can additionally undergo iodine photodissociation upon excitation at 266 nm, enabling the subsequent time-resolved investigation of molecular dynamics of the chiral molecule during this reaction. In this work, model spiroTB derived from 3-iodonaphthalen-2-amine was synthesised using a trifluoroacetic acid catalysed reaction employing hexamethylenetetramine as a methylene source. The compound was characterised by HRMS, NMR and UV–Vis absorption spectroscopy. Full ^{1}H and ^{13}C NMR signal assignment was performed using combination of 1D and 2D correlation NMR spectroscopy. The experimental UV–Vis spectra were further compared with TD-DFT calculations. Enantiomers of the pure racemic sample were successfully resolved on analytical scale by chiral stationary phase HPLC. In the future, preparative enantioseparation will be performed to obtain the samples suitable for our planned PECD experiments.



Prebiotic interactions between aminoacyl adenylates and a substrate–ribozyme complex

Denis Šebo (B3)

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

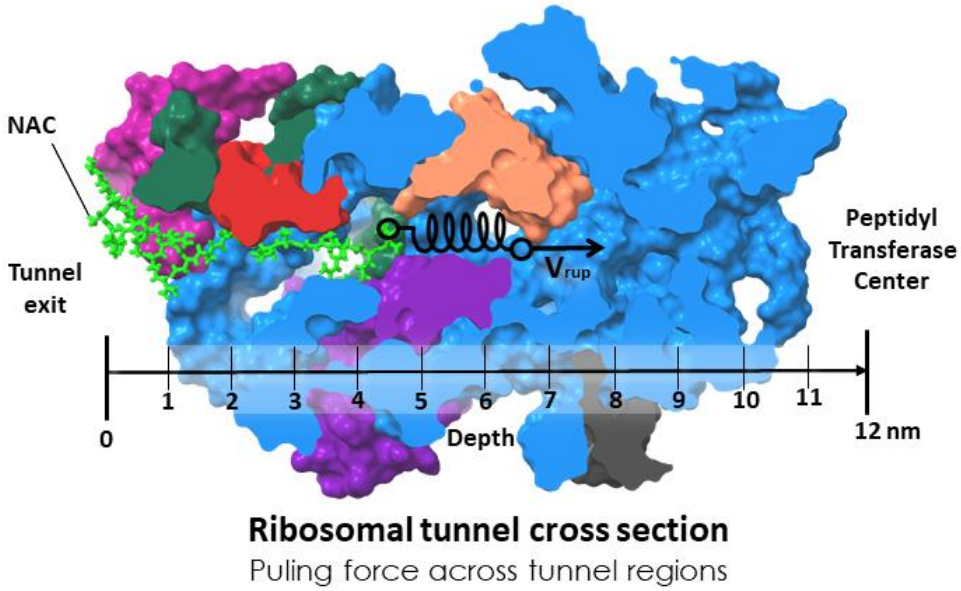
According to the RNA-world hypothesis, RNA molecules are thought to have played a central role in the emergence of early biological systems, potentially preceding the evolution of modern protein-based enzymes and the biomolecular machinery responsible fot complex proteosynthesis. In this context, prebiotic RNA models can offer insight into how early RNA structures may have interacted with activated amino acids and contributed to the origins of aminoacylation and tRNA function. Previous experimental studies and ongoing experiments have identified short RNA sequences capable of interacting with aminoacyl adenylates and catalyzing their own aminoacylation. Interestingly, structurally similar activated amino acids exhibit drastically different reactivity when in solution with the prebiotic tRNA (leucyl vs isoleucyl adenylate, or phenylalanyl vs tyrosyl adenylate). This work investigates one such RNA system as a model of a prebiotic tRNA complex. Using molecular dynamics simulations, we examine the pre-reaction stage of the prebiotic tRNA model in the presence of five different aminoacyl adenylates. We focus on understanding the specific interactions between the aminoacyl adenylates and the double-stranded RNA complex, especially binding preferences and conformational variability.

Nonequilibrium Simulations of a Conserved Regulation Factor in the Ribosomal Exit Tunnel

Tatiana Šimeková (B1)

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

In all known life, proteins are synthesized on ribosomes. This delicate biochemical process is regulated by a multitude of factors, many of which are not yet completely understood. The nascent-polypeptide associated Complex (NAC) is an eukaryotic regulation factor that docks near the tunnel exit and inserts one of its termini deep into the tunnel where it interacts with a short nascent polypeptide chain. However, the mechanistic insights and driving forces behind this process remain unclear. We investigated this mechanism using atomistic nonequilibrium molecular dynamics simulations, pulling the NAC terminus into a model of the human ribosome. *In silico* mutations of two key arginine residues enabled the identification of a potential motif responsible for the tunnel insertion. Analysis of pulling trajectories revealed greater mechanical resistance to pulling, higher solvation and more tunnel interactions in the native chain. Our study expands the knowledge of the birthplace of proteins, contributing to research on the prevention and treatment of misfolding-related diseases such as Huntington's or Parkinson's disease. Further research could investigate the dynamics of NAC in the ribosomal tunnel of a different organism or its interactions with misfolded proteins in the cytosol, as has been documented during metabolic stress.



Ribosomal tunnel cross section

Puling force across tunnel regions

Termofyzikální vlastnosti alternativních fluorovaných pracovních látek

Pavel Skála (B3)

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

Práce se zabývá studiem termodynamických vlastností vybraných alternativních chladiv ze skupiny hydrofluoroetherů (HFE) a fluoroketonů (FK). Studovanými látkami jsou fluoroketon Novec 649, hydrofluoroether HFE-347E a směs TMC-71IPA (azeotropická směs HFE-7100 a isopropanolu). Tlak par byl stanovován pomocí statické metody v teplotním rozsahu 228–278 K. Naměřená data tlaku par byla porovnána s literaturou pomocí Aimova testu. U směsi TMC-71IPA jsem zjistil, že při nízkých teplotách se při vypařování nezachovává její složení. Během statických měření byl vidět kontinuální pokles absolutního tlaku, až na hodnoty blízké tlaku nasycených par isopropanolu. Z toho lze usuzovat, že za daných teplot nebylo vstupní složení azeotropické a parní fáze byla bohatší na HFE-7100. Pomocí Tianova–Calvetova kalorimetru byly měřeny izobarické tepelné kapacity látek Novec 649 a HFE-347E v teplotním rozsahu 260–300 K. Pro účely simultánní korelace tlaků nasycených par a rozdílů v tepelných kapacitách byly pro Novec 649 vypočteny tepelné kapacity ideálního plynu. Výsledky značně rozšiřují soubor dostupných termodynamických dat studovaných látek a přispívají k lepšímu popisu jejich termodynamického chování. Získané experimentální údaje budou sloužit jako podklad pro další termodynamické modelování.

Studium iontové výměny mezi elektrolytem a elektrochemickým tranzistorem

Jakub Šnajdr (B3, Vysoké učení technické v Brně)

Školitel: prof. Mgr. Martin Vala, Ph.D.

Studium iontové dynamiky draselných kationtů na rozhraní mezi elektrolytem a organickým elektrochemickým tranzistorem (OECT) je klíčové pro pochopení transportu náboje na tomto rozhraní. OECT na bázi vodivého polymeru PEDOT:PSS představují účinnou platformu pro řízení iontových dějů, avšak přesné mechanismy lokální sekvestrace a uvolňování iontů na rozhraní polymeru a elektrolytu zůstávají obtížně objasnitelné pomocí charakterizace založené výhradně na elektrické odezvě OECT. Tato práce představuje vývoj nového systému OECT v koplanárním uspořádání se zlatými interdigitálními elektrodami, který umožňuje tento limit překlenout studiem simultánní optické a elektrické detekce iontů na jediné platformě. Tato metodika umožnila synchronizovanou korelaci změn iontové koncentrace v reálném čase s cyklicky se měnícím hradlovým potenciálem. Obě nezávislé metody poskytly konzistentní výsledky při stanovení vyměněného náboje a objemové kapacitance. Výsledné lokální změny koncentrace dosahují úrovní relevantních pro budoucí bioelektronickou stimulaci buněk.

Studium polymorfismu z pohledu kalorimetrie a měření tlaků sytých par

Bc. Jiří Šnajdr (M2)

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

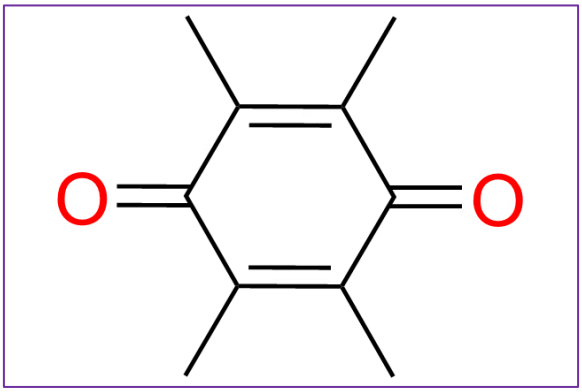
V rámci této práce studuji termodynamické vlastnosti tří látek vykazujících polymorfní chování: 2,2’-dipyridylaminu, pyrazinamidu a 1,2,4,5-tetrabrombenzenu. Látky byly pro studium vybrány v návaznosti na mezinárodní projekt zaměřený na testování metod predikce termodynamických vlastností krystalů. K výsledkům předchozí SVK doplňuji tepelné kapacity jednotlivých polymorfů všech tří látek stanovené pomocí Tianovy–Calvetovy kalorimetrie. Ty umožní zejména výpočet teplotní závislosti entalpií fázových změn. Dále jsem pomocí diferenční skenovací kalorimetrie (DSC) studoval fázové chování pyrazinamidu a 1,2,4,5-tetrabrombenzenu. Pro 1,2,4,5-tetrabrombenzen jsem opakovanými analýzami několika vzorků při různých náhřevových rychlostech v režimu ohřevu i chlazení dokázal zúžit rozsah, který vymezuje rovnovážnou teplotu jeho termosalientního přechodu. Dosavadní údaje v literatuře pokrývají rozpětí přes 10 K, zatímco nejistota mého stanovení je 0,8 K. Dále se mi podařilo změřit tlak sytých par kapalné fáze 2,2’-dipyridylaminu a sublimační tlaky jeho krystalických forem T a O, které dosud nejsou v literatuře k dispozici. Z naměřených dat jsem stanovil sublimační entalpie obou forem. Získané hodnoty budou využity jako referenční data pro systematické hodnocení teoretických přístupů.

Investigation of the Excited States and Nonadiabatic Dynamics of Duroquinone

Daniela Strnadová (B2)

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

Duroquinone (DQ) is an organic molecule known for its efficient formation of triplet excited states following photoexcitation. Understanding the relaxation pathways of its electronically excited states is important to the photophysical behavior of quinone organic chromophores, in particular, the competition between internal conversion and intersystem crossing. In this work, I will employ a variety of computational approaches, including Density Functional Theory (DFT with various functionals), *ab initio* methods and semiempirical methods (OMx) to investigate the excited singlet and triplet states of DQ. The resulting data will be systematically analyzed in comparison with available experimental data and higher-level theoretical calculations, allowing us to select a suitable level of theory for the system. Ultimately, these benchmarked electronic structure calculations will establish the basis for subsequent nonadiabatic molecular dynamics simulations using the surface hopping approach. Starting from the optically bright singlet excited state, I aim to investigate whether rapid internal conversion to lower-lying singlet states occurs when nuclear motion is treated in full dimensionality.



Hustota a viskozita směsi toluen + propylbenzen v závislosti na teplotě a složení

Bc. Marie Štrumfová (M2)

Školitel: Ing. Alena Randová, Ph.D.

Práce se zabývá experimentálním studiem hustoty a viskozity binární kapalné směsi toluen + propylbenzen v závislosti na složení a teplotě. Obě složky náleží do stejné homologické řady aromatických uhlovodíků, tudíž jejich strukturní podobnost umožňuje posoudit vliv relativně malé změny v molekulární struktuře na hustotě a viskozitě směsi. Hustota a dynamická viskozita byly měřeny při teplotách 15, 20, 25 a 30 °C v celém rozsahu složení směsi. Experimentální hodnoty čistých složek byly porovnány s dostupnými literárními údaji. Z naměřených dat byly následně vyhodnoceny dodatkové hodnoty hustoty a viskozity, které umožňují charakterizovat odchylky systému od ideálního chování. Pomocí Eyringovy teorie byla z viskozity a molárního objemu pro jednotlivé teploty stanovena aktivační Gibbsova energie viskózního toku, která charakterizuje energetickou bariéru molekulárního přeskupení při toku kapaliny.

Coarse-grained simulations of protoribosome-peptide mixtures

Martin Stýblo (B3)

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

Ribosomes are molecular machines responsible for translation of genetic information into proteins. Peptide bond catalysis is provided by an RNA structure at the ribosome's core, the peptidyl transferase centre (PTC). The protoribosome is a hypothetical ancestral structure consisting of a PTC molecule stabilized by short peptides. Similarly to the modern ribosome, it is able to perform peptide bond catalysis. The evolutionary conservation of the PTC across species is remarkable and it serves as one of the supporting arguments for the RNA-world origin of life hypothesis. This work focuses on the origins of the protoribosome itself. Experiments show that mixtures of the PTC with peptides tend to coacervate – form phase separated droplets with high concentration of biomolecules. Prebiotic conditions could have provided such an environment and coacervation could have supported the emergence of protoribosomes. Coacervation is mediated mainly by electrostatic interactions. Coarse grained simulations using the CALVADOS model performed in this work help to understand how parameters such as ionic strength, temperature, concentrations or peptide sequences influence the process of coacervation.

In silico crystal structure predictions for model sulfamide-based active pharmaceutical ingredients

Jan Sýkora (B3)

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

Crystal polymorphism is an important phenomenon in pharmaceutical development, as different crystal structures of the same compound may exhibit significantly different physical and chemical properties. Crystal structure prediction (CSP) provides a computational approach to exploring possible polymorphic forms. However, conformational flexibility introduces additional challenges due to the existence of multiple molecular conformations. This work focuses on sulfapyridine, a conformationally flexible sulfonamide-based pharmaceutical compound. Potential energy surface scans and quantum-chemical geometry optimisations are employed to identify distinct molecular conformers. These conformers are subsequently used to generate candidate crystal structures, which are ranked according to their lattice energies and compared with experimentally determined polymorphs.

Electronic-Structure Interpolation with Constrained DFT: Transition States and Reaction Coordinates

Lukáš Tabery (B3)

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

I use constrained density functional theory with configuration interaction (CDFT-CI) to guide nuclear geometry optimization using reactant- and product-like diabatic electronic states. I present two related ideas. First, I use the diabatic crossing seam to generate transition state guesses by minimizing the lower adiabatic energy near equal diabatic energies. Second, as a more general approach, I vary the diabatic energy gap and optimize the nuclear geometry multiple times under a soft constraint given by the different values of the diabatic gap. This way, an electronic reaction coordinate between reactants and products is constructed, and the highest-energy geometry can be selected without assuming that the transition state lies on the seam. These approaches offer a different perspective on the transition state than the traditional one based on the potential energy surface (PES) and, due to the core algorithm being pure minimization, they also offer a larger region of convergence which often contains both the reactant and product geometries. This work tests both approaches on a set of CDFT-describable reactions, namely nucleophilic substitutions and radical transfers. It also addresses the limitations of these approaches and connects them to existing valence bond theory.

Studium separačních vlastností membrán na bázi kyseliny hyaluronové pro plyny a páry

Bc. Jáchym Tunzer (M1)

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

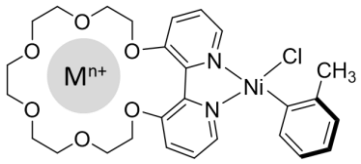
Tato práce se zabývá studiem sorpčních a permeačních vlastností tenkých filmů na bázi lauroylovaného hyaluronanu a možnostmi jejich cílené úpravy. Cílem bylo posoudit vliv fyzikálních a chemických modifikací na strukturu materiálu, jeho interakce s vodní parou a vybranými plyny a jeho využitelnost pro membránové separace. Fyzikální modifikace byla provedena působením UV zářením o vlnových délkách 254 nm a 302 nm, chemické úpravy byly zaměřeny na aminaci karboxylových skupin a reakce hydroxylových skupin s tosylchloridem. Změny morfologie, chemické struktury a dielektrických vlastností byly sledovány pomocí 3D profilometrie, ATR-FTIR a širokopásmové dielektrické spektroskopie. Pro posouzení interakcí s prostředím byla hodnocena sorpce vybraných rozpouštědel, vodní páry a plynů na základě hmotnostních změn vzorků. Propustnost vybraných plynů byla měřena integrální manometrickou metodou. Pozornost byla věnována také vztahu mezi způsobem modifikace, sorpčním chováním a stabilitou filmů při permeačních měření.

Tuning Nickel Photoredox Catalysts with Local Electric Fields

Bc. Adéla Ulrichová (M2)

Školitel: Ing. Daniel Bím, Ph.D.

Nickel photoredox catalysis is a powerful platform for functionalizing organic substrates. In Ni(II)–bipyridine aryl halide complexes, photoexcitation can generate reactive Ni(I) intermediates that drive key bond-forming steps. However, both photochemical activation and subsequent Ni(I) reactivity depend on the electronic structure of the complex, intrinsically coupling these properties: ligand changes that favor photoactivation produce stable, less reactive Ni(I) species, while those that enhance Ni(I) reactivity may hinder photoactivation. We propose using local electric fields to tune Ni(I) reactivity while retaining efficient Ni(II) photoactivation. We hypothesize that local electric fields near the Ni center can shift the absolute energies of its 3d orbitals, directly affecting reactivity while leaving the relevant absorption profile largely unchanged. To test this concept, we prepared a Ni(II) complex bearing bipyridine ligand with covalently attached crown ether (Fig. 1) to allow binding of alkali metal cations, thereby generating local electric fields near the nickel center. Ongoing studies investigate how cation binding affects absorption spectra, reduction potentials, photoactivation kinetics, and reactivity of the resulting Ni(I) species.



$M^{n+} = K^+, Li^+, Ba^{2+}, Mg^{2+}$

Figure 1: Structure of the target Ni(II)–bipyridine aryl chloride complex.

Solvent-Induced Modulation of Spin Multiplicity in Organic Charge-Transfer Complexes

Jitka Zienertová (B3)

Školitel: doc. RNDr. Dana Nachtigallová, Ph.D.

Molecular spin-state switching, particularly the interconversion between singlet and triplet states, is commonly induced by UV irradiation. Recent studies have explored alternative strategies involving milder stimuli, such as visible-light excitation of suitable charge-transfer (CT) complexes, which can facilitate energy transfer to spin-switchable molecules. However, stabilizing the resulting triplet states often remains challenging under ambient conditions. Here, we investigate an alternative approach based on the role of solvent polarity in modulating the relative stability of singlet and triplet states in organic CT complexes. We aim to elucidate how the solvation environment influences spin-state energetics, electronic structure, and molecular geometry by comparing selected CT complexes in the gas phase and in different solvent environments. The study combines density functional theory calculations with UMA machine-learning interatomic potentials developed by FAIR-Chem to explore the energetic landscapes and structural features associated with solvent-dependent spin-state modulation. This work seeks to establish a molecular-level understanding of solvent-mediated spin-state stabilization and assess its potential as a strategy for controlling spin multiplicity in organic CT systems.