VŠCHT PRAHA

FCHI

Sborník anotací

Studentská vědecká konference

19. 11. 2026

Ústav chemického inženýrství

Ústav chemického inženýrství
Fakulta chemicko-inženýrská
Vysoká škola chemicko-technologická v Praze

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.

FAKULTNÍ KOORDINÁTOR

doc. Ing. Jitka Čejková, Ph.D.

fchi.vscht.cz/svk

SPONZOŘI ÚSTAVU CHEMICKÉHO INŽENÝRSTVÍ

Bude doplněno po 9. 11. 2026

Vývoj mikroprůtočné cely pro heterogenní fotokatalýzu

Bc. Matouš Barták (M1)

Školitel: Ing. Anna Vanluchene, Ph.D.

Heterogenní fotokatalýza představuje slibnou metodu pro šetrné odbourávání polutantů či fotochemické syntézy, avšak její uplatnění v konvenčních vsádkových reaktorech je u větších objemů výrazně limitováno exponenciálním poklesem intenzity záření s tloušťkou reakční vrstvy dle Lambertova–Beerova zákona. Tato práce se proto primárně zaměřuje na návrh, konstrukci a optimalizaci kontinuálního uspořádání. Mikroprůtočná cela byla vyvinuta pomocí iterativního prototypování – od prvotního 3D tisku z PETG až po finální mechanicky odolnou hliníkovou konstrukci s FTO sklem a vrstvenými PFA kanálky s variabilní optickou dráhou a objemem. Její účinnost byla ověřena na modelové fotodegradaci rhodaminu B se suspenzí grafitického nitridu uhlíku (g-C_3N_4), přičemž pokus o zmenšení částic mokrým mletím vedl k destrukci krystalické struktury a poklesu aktivity, pročež byl využit nemletý katalyzátor. Ve srovnání s vsádkovým reaktorem ($k = 0{,}0230 \pm 0{,}0007$ min^{-1}) bylo v mikroprůtočné cele v recirkulačním režimu díky efektivnějšímu prozáření směsi dosaženo $19{,}1\times$ vyšší zdánlivé rychlostní konstanty ($k = 0{,}4399 \pm 0{,}0423$ min^{-1}). V jednoprůchodovém režimu byla při průtoku $2{,}02$ mL/min (doba zdržení $11{,}6$ s) naměřena konverze $8{,}4$ % na jeden průchod a $35{,}4$ % po pěti průchodech, přičemž vyhodnocení prostoročasového výtěžku (STY) odhalilo optimum při průtoku okolo 3 mL/min. V současné fázi slouží vyvinutý reaktor k testování mechanické stability imobilizovaného katalyzátoru a ověření fotokatalytické účinnosti tenkých vrstev draselného poly(heptazinimidu) (K-PHI). Navazujícím krokem je konstrukční zvětšení měřítka (scale-up) vyvinuté cely pro zpracování větších objemů kapaliny.

Když tryska nestíhá: modelem řízená tepelná kompenzace pro 3D tisk

Bc. Dalibor Berka (M2)

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

Při 3D tisku metodou FFF (Fused Filament Fabrication) se rychlost vytlačování materiálu mění každých několik sekund – obvod se tiskne pomalu, výplň rychle. Tiskárna přitom udržuje trysku na konstantní teplotě, takže při rychlých úsecích se plast nestihne dostatečně prohřát a při pomalých se přehřívá. Nedostatečně protavený materiál vytváří slabší spoje mezi vrstvami, na kterých závisí pevnost výsledného dílu. Práce se zabývá kompenzací tohoto jevu. Na základě měření na tiskárně Prusa MK4 byl sestaven fyzikální model tepelného chování „hotendu“ – tj. od topné patrony přes topný blok a trysku až po teplotní čidlo, jehož zpoždění bylo určeno frekvenční analýzou. Model umožňuje dvě úrovně kompenzace: první s předstihem upravuje teplotu podle připravovaného G-codu, druhá navíc lokálně upravuje rychlost tisku tam, kde teplota fyzicky nestíhá. Obě jsou implementovány jako post-procesor pro software PrusaSlicer. V simulaci na deseti tiskových profilech snižuje kompenzace nejhorší nedotavení materiálu z 8–12 °C na méně než 1 °C, přičemž se doba tisku změní nejvýše o ±10 %. Zlepšení adheze vrstev 3D výtisků bylo experimentálně validováno.

Assessing Critical CO_2 Cycle Deployment in Waste Heat Utilization for Power Production

Bc. Alexej Bočkorik (M2, Slovenská technická univerzita v Bratislave)

Školitel: doc. Ing. Miroslav Variny, Ph.D.

My thesis focuses on waste heat recovery from the flue gases of a gas turbocompressor unit using a supercritical carbon dioxide (sCO_2) Brayton cycle to generate additional electrical power. The main objective is to design and evaluate a suitable cycle configuration to improve the overall energy efficiency of the system. Simulation models of the turbocompressor unit were developed in DWSIM and compared under three operating conditions. Based on the obtained flue gas parameters, a recuperated sCO_2 Brayton cycle consisting of a compressor, turbine, recuperator, main heat exchanger, and cooler was designed (Figure 1). A parametric analysis investigated the effects of working fluid mass flow rate and flue gas outlet temperature on power generation and consumption, with particular attention to heat transfer and temperature profile in the main heat exchanger. Preliminary results showed a net power output of approximately 1.16–1.72 MW, demonstrating the potential of the proposed system. Further research will focus on cycle optimization, off-design performance, and technical limitations related to heat exchangers, pressure losses, and ambient temperature.

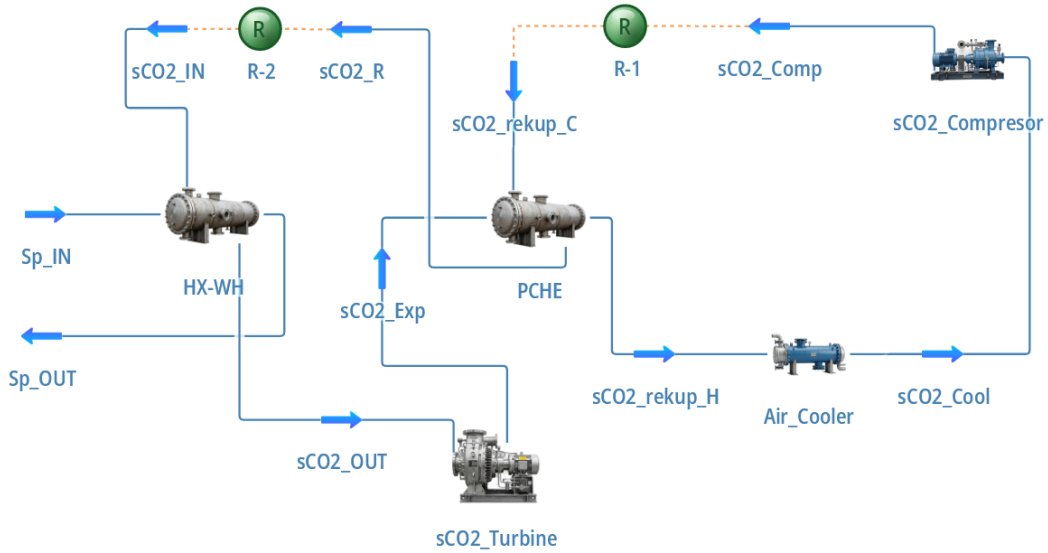


Figure 1 Design of the Brayton sCO2 cycle in the DWSIM simulation software

Utilization of heat from wastewater at a mechanical-chemical-biological wastewater treatment plant

Bc. Gergő Bohony (M2, Slovenská technická univerzita v Bratislave)

Školitel: doc. Ing. Miroslav Variny, Ph.D.

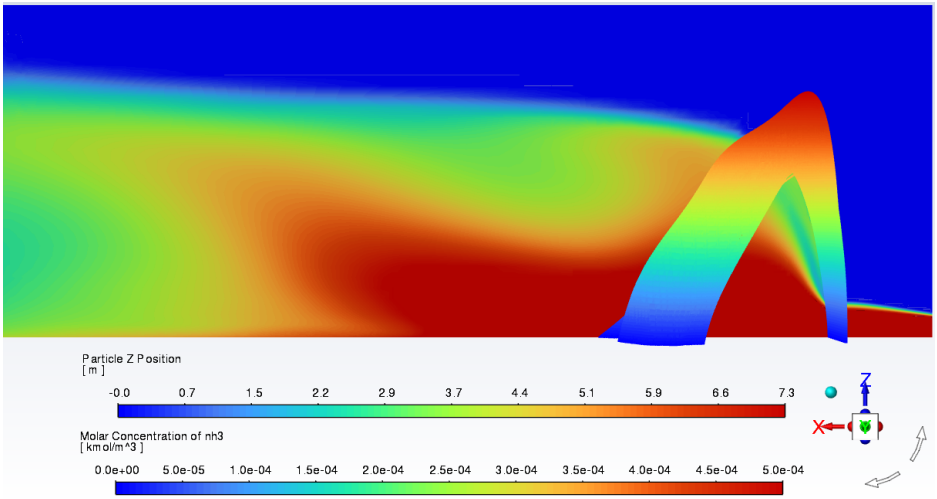
Refineries all over the world generate large volumes of process wastewater. It contains unutilized low-temperature heat. This work aims to quantify the energy recoverable from the treated water. Data were used from the mechanical-chemical-biological wastewater treatment plant at SLOVNAFT. Approximately 340 kg/s of water is discharged into the Danube River without any heat utilization. Using the flow rate and temperature data, corrected by manual measurement, the recoverable heat flux was determined. A basic ammonia heat pump was considered with product temperatures of 60, 70, and 80 °C. The calculations consider two main operating scenarios: year-round and winter season. The economic analysis and sensitivity analysis indicate investment costs of 5-15 million € and a payback period of 5-15 years. The scale of the investment depends on design parameters and the temperature of the product. The cost of the compressor adds up to 50% of the total equipment costs. In year-round operation, the recovered heat has the potential to displace existing or planned natural gas combustion and save up to 21 000 tonnes of CO_2 annually.

Numerické modelování vlivu vodních clon na šíření amoniaku při havarijním úniku

Bc. Jiří Bohuslav (M2)

Školitel: doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

Amoniak je významný průmyslový plyn využívaný zejména při výrobě hnojiv. Jeho toxicita však vyžaduje zvýšené nároky na bezpečnost provozů. Jedním z bezpečnostních prvků jsou tzv. vodní clony. Při mimořádných situacích mohou sloužit jako bariéra blokující šíření unikajícího nebezpečného plynu, nebo naopak jako prostředek k urychlení disperze či jako překážka pro šíření sálavého tepla při požáru, které může mít devastující účinky na okolní technologie. Jsou tedy ochranným prvkem omezujícím následky nehod na lidském zdraví, životním prostředí i na ekonomické úrovni. Problémem je však složitá předpověď chování unikajícího plynu interagujícího s vodními clonami, která komplikuje návrh systémů vodních clon i ověření efektivity již instalovaných zařízení. V rámci práce je zkoumáno, jak využít možností CFD (Computational Fluid Dynamics) modelování k předpovědi účinku vodní clony při úniku amoniaku a tím přispět ke spolehlivějšímu návrhu systémů zmírňujících následky havarijních úniků.



Předpověď vlivu vodní clony na koncentrační pole amoniaku v ose výtoku při definovaném úniku

Magnetic MOFs for Drug Delivery

Ines Boukarfa (M2)

Školitel: Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.

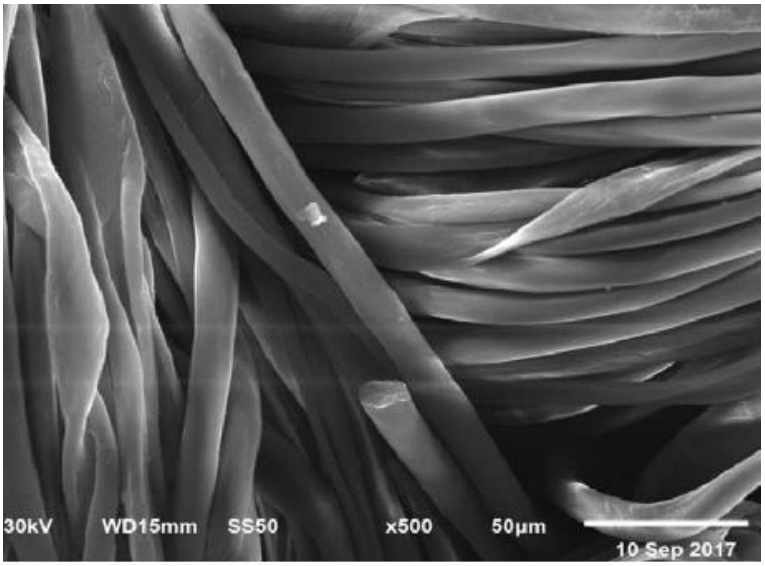
Metal–organic frameworks (MOFs) are highly porous crystalline materials that can store drug molecules inside their pores. Magnetic MOF composites, which contain magnetic nanoparticles, are studied for on-demand drug release: an external alternating magnetic field heats the particles, and this heat can trigger the release of the drug. However, for the drug release, the MOFs must form stable and homogeneous suspensions, so that every dose contains the same amount of material. This work focuses on the dispersion and magnetic heating of UiO-66-NH_2 and ZIF-8 composites containing $MnFe_2O_4$ nanoparticles, designed as carriers for curcumin, a poorly water-soluble drug. The composites were dispersed in organic solvents and in water with four stabilizers (SDS, CMC, Poloxamer 188 and PVP) and characterized by optical microscopy and dynamic light scattering and static light scattering. PVP was the most effective stabilizer in water. All magnetic composites heated in an alternating magnetic field, while the non-magnetic ZIF-8 reference did not. The UiO-66-NH_2 composites heated faster than the ZIF-8 composites. As a final step, the curcumin was successfully loaded into the MOFs and characterized, and the released experiments were performed.

Separace směsných textilních materiálů pomocí selektivního rozpouštění

David Brana (B3)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Textilní odpad se každoročně hromadí a jeho významnou část tvoří oděvy ze směsných vláken, nejčastěji z bavlny a polyesteru (polyethylentereftalát, PET). Mechanická recyklace takových materiálů vede ke ztrátě kvality obou složek. Alternativou je chemická recyklace, ta však obvykle používá agresivní nebo toxická rozpouštědla za extrémních podmínek. Proto zkoumáme použití hlubokých eutektických rozpouštědel (DES) jako šetrnější alternativy pro recyklaci směsných textilií. Zatím se nám podařilo oddělit PET od bavlny rozpuštěním a následným vysrážením z roztoku, přičemž identita izolovaného PET byla potvrzena pomocí spektroskopie v blízké infračervené oblasti (NIR) a výtěžek separace dosahuje přibližně 95 %. V budoucnu se chceme zaměřit na regeneraci a opakované použití rozpouštědla, což je klíčové pro posouzení praktické využitelnosti procesu. Souběžně pracujeme na zvětšení měřítka aparatury pro frakcionaci směsných polymerních materiálů (plastových obalů), která umožní ověřit proces za podmínek blížících se provozním. Další plánovanou aktivitou je opětovné zvlákňování rozpuštěné frakce směsné textilie či plastu.



Obrázek: Elektronová mikroskopie (SEM) směsného textilního materiálu.

Kopermeace: vliv účinných látek na průchodnost lipozomálních membrán

Iva Brhelová (B3)

Školitel: Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D.

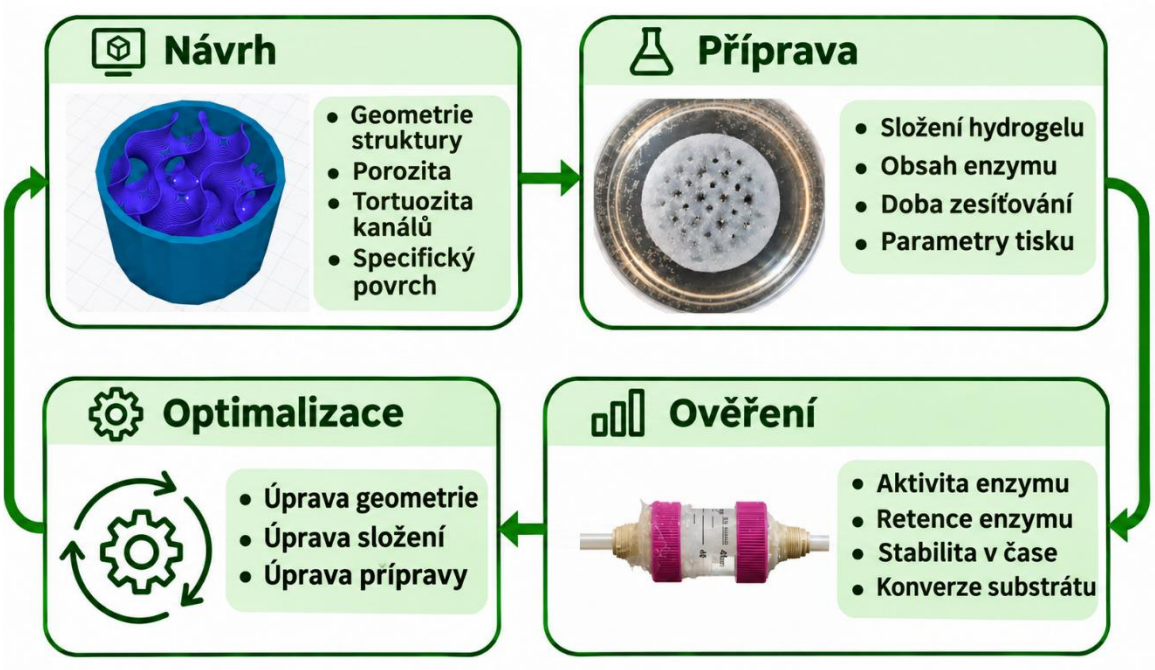
S pokrokem medicíny a stárnutím populace se stalo běžným užívat více různých léků současně. Je známo, že různé léky navzájem ovlivňují svoje účinky na organismus, což musí být bráno v potaz při jejich výrobě i předepisování pacientům. Jedním z mechanismů, jak k tomuto ovlivňování dochází, může být změna propustnosti biologických membrán pro látku A vlivem přítomnosti látky B. Vhodným modelový systém pro studium biologických membrán mohou být lipozomy, které nám umožňují sledovat pasivní permeaci účinných látek bez dalších biochemických faktorů. Cílem projektu je zkoumat různé typy účinných látek a měřit, jak jejich přítomnost ovlivňuje vylučování jiných látek z lipozomů. Měřili jsme vypouštění modelové molekuly 5(6)-karboxyfluoresceinu (CF) z lipozomů za přítomnosti kofeinu, hydrochlorothiazidu a jejich kombinací. Zoptimalizovali jsme podmínky (koncentrace CF, typ pufru, iontová síla uvnitř a vně lipozomů) pro vylučovací experimenty. Experimenty s plynule se měnící teplotou prokázaly posun fázového přechodu membrány vlivem přítomných látek. Při vylučování za konstantní teploty také docházelo k ovlivnění vylučování CF, obzvláště při teplotě v okolí fázového přechodu membrány. V budoucnu budeme zoptimalizovaný protokol aplikovat na širší spektrum látek a experimentální data budeme interpretovat pomocí molekulárně dynamických simulací.

3D biotisk strukturovaných hydrogelových biokatalyzátorů

Bc. Lukáš Bukač (M2)

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

Tato práce se zabývá přípravou prostorově strukturovaných alginátových hydrogelů s imobilizovanou alliinázou metodou FRESH 3D biotisku. Cílem je zmírnit transportní omezení spojená s fyzickou imobilizací enzymu v hydrogelové matrici. Tisk do želatinové podpůrné lázně umožňuje připravovat komplexní geometrie včetně gyroidních struktur, jejichž porozitu, specifický povrch a uspořádání kanálů lze cíleně upravovat. Tyto geometrické parametry mohou ovlivňovat transport hmoty i hydraulický odpor reaktoru. Jako modelový systém slouží enzymatická přeměna alliinu na antimikrobiálně účinný allicin. Experimentální část se zaměřuje na optimalizaci imobilizace alliinázy se zřetelem na zachování její katalytické aktivity po tisku, retenci v hydrogelu a stabilitu v čase. Výsledky hodnocení slouží k iterativním úpravám geometrie, složení hydrogelu a podmínek přípravy. Práce tak ověřuje proveditelnost přípravy enzymaticky aktivních struktur s potenciálem budoucího využití v průtočných bioreaktorech.



Chiral separation via indirect membrane ultrafiltration

Bc. Jana Bursíková (M1)

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

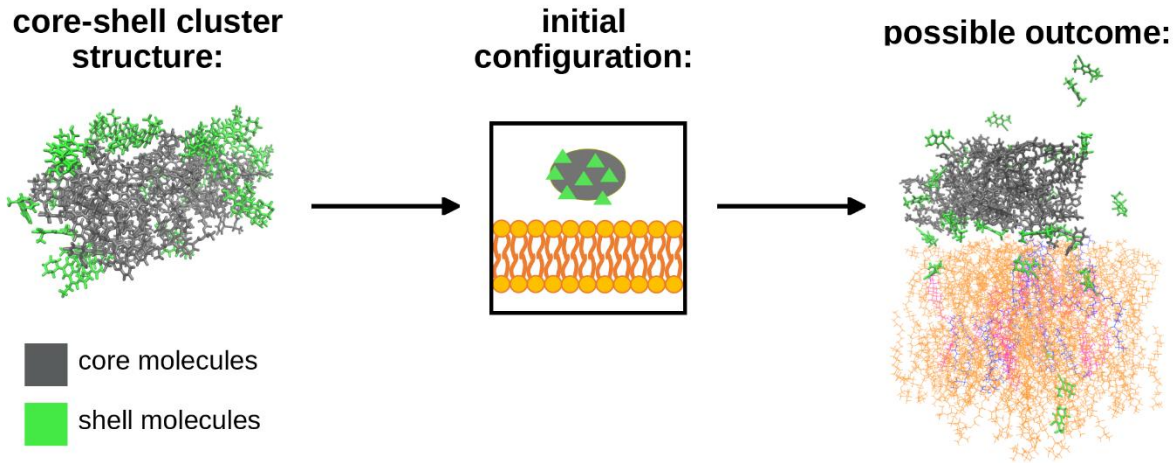
Currently, there is a growing demand in the pharmaceutical industry for enantiomerically pure drugs, as individual enantiomers often exhibit different biochemical activities, significantly influencing efficacy and the risk of side effects. Enantiopure compounds can be produced either by asymmetric synthesis or by the separation of racemic mixtures. This work focuses on the application of commercial porous membranes for indirect chiral separations based on the preferential complexation of a chiral selector with one enantiomer of the analyte. The primary enantioselective interaction occurs in the bulk solution prior to filtration, while the non-chiral membrane serves solely as a size-exclusion barrier. N-Boc-L,D-tryptophan was chosen as a model analyte, whose L-form preferentially forms non-covalent inclusion complexes with the chiral selector, sulfobutylether-β-cyclodextrin. The significant size difference between this supramolecular complex and the uncomplexed enantiomer enables their separation via ultrafiltration using a commercial Ultracel® 1 kDa porous membrane. This study focuses on optimizing the parameters affecting the efficiency of this indirect membrane process, including the operational mode (dead-end vs. cross-flow filtration), solvent composition, selector-to-analyte molar ratio, and process configuration (single-stage vs. cascade setup). The primary objective was to evaluate whether commercial porous membranes can serve as a viable platform for the enantioselective separation of amino acid derivatives based on size differences between the complex and the free analyte.

Molecular dynamics observations of cluster interactions with phospholipid bilayers

Bc. Milana Dejaková (M2)

Školitel: Ing. Terezie Císařová

Patients often take several drugs at once, and such drugs can interact before reaching their target. To predict their uptake, it is crucial to understand how drug-like molecules interact both with each other and with phospholipid bilayers. These bilayers serve as representative models of biological membranes and constitute the primary barrier in the human body for passive molecular permeation. While the behaviour of a single drug with the membrane is well documented, the mechanisms induced by drug-drug interactions in clusters remain poorly explored. Building on previous research in which we characterised clusters formed by two distinct drugs, we focus on core-shell structures, where one drug type forms the core and the second its surface. In this work, we placed these cluster structures above a phospholipid bilayer and studied them using molecular dynamics simulations. The aim is to track how partitioning into the membrane is influenced by the presence of the partner drug. Our results show that the shell drug decides whether the cluster attaches to the membrane, while the core decides how strongly the shell is held. The partitioning of a drug into the membrane therefore depends on its partner.

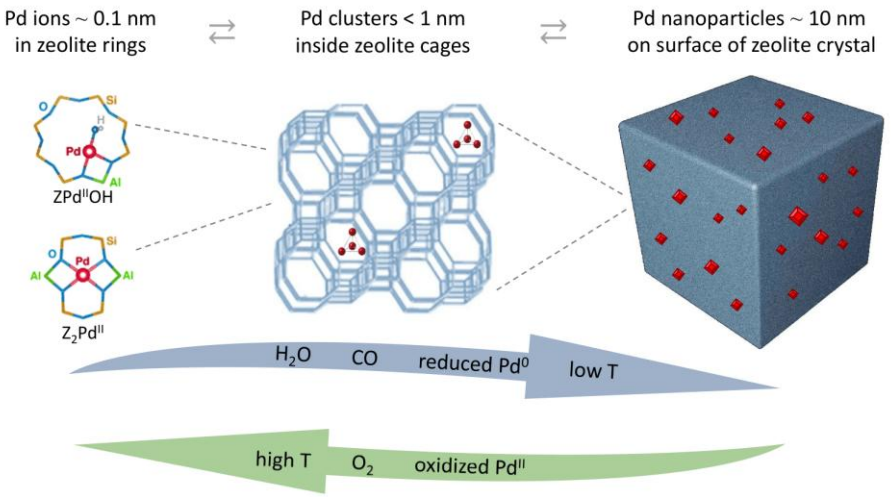


Matematické modelování deaktivace a reaktivace katalyzátoru Pd/SSZ-39

Bc. Hoang Phi Hung Do (M2)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

I přes rozvoj elektromobility zůstávají spalovací motory dominantním pohonem, zejména v nákladní dopravě. Emise škodlivin ve výfukových plynech jsou regulovány a s chystanou normou Euro 7 se limity budou dále zpřísňovat. Jedním z problémů je produkce oxidů dusíku (NO_x) během studeného startu, kdy ještě není dosažena teplota nutná pro fungování systému selektivní katalytické redukce NO_x (SCR). Jako řešení se nabízí pasivní adsorbér NO_x (PNA), například zeolitového typu Pd/SSZ-39, který byl zkoumán v této práci. Při teplotách pod 200 °C dochází k chemisorpci NO_x na aktivní Pd^{2+} centra a desorpce probíhá až po ohřátí na provozní teplotu systému SCR. V přítomnosti CO se však centra Pd^{2+} redukují na Pd^0 a migrují ze struktury zeolitu do nanočástic, což vede ke snížení počtu aktivních míst pro adsorpci NO_x. Deaktivaci lze zvrátit za vyšších teplot oxidací a rozkladem nanočástic a následným ukotvením Pd^{2+} zpět do struktury katalyzátoru. V této práci byl vytvořen reakčně-kinetický model, který předpovídá průběh adsorpce a desorpce oxidů dusíku a zároveň i proces deaktivace a reaktivace katalyzátoru v závislosti na provozních podmínkách. Vyvinutý model umožňuje lépe řídit provoz katalyzátoru a nalézt vhodné strategie pro jeho regeneraci během jízdního cyklu.



Studium reakčně-transportních procesů v elektrodeionizačních systémech

Bc. Dalibor Dohnal (M1)

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

Elektrodeionizace představuje perspektivní separační technologii kombinující výhody iontové výměny a elektrodialýzy. Její význam spočívá zejména v potenciálu pro čištění průmyslových odpadních vod a výrobu vysoce čisté vody, která je nezbytná pro řadu technologických procesů v energetickém a elektronickém průmyslu. Tato práce se zaměřuje na studium základních transportních mechanismů v elektrodeionizačních systémech. Za tímto účelem jsou jednotlivé částice iontoměničových pryskyřic zkoumány samostatně, a to pomocí speciálně navržených elektrochemickým cel, ve kterých je daná částice považována za samostatný iontovýměnný systém a jejichž konstrukce současně umožňuje sledovat probíhající jevy v mikroměřítku. V rámci práce bylo studováno elektrochemické a hydrodynamické chování částic při polarizaci ve stejnosměrném elektrickém poli. K charakterizaci tohoto chování byly využity voltampérové charakteristiky a optická mikroskopie v kombinaci s analýzou metodou PIV (Particle Image Velocimetry), která umožnila vizualizaci a vyhodnocení transportních jevů v bezprostředním okolí studovaných částic.

Optimalizace procesu disoluce API v nenewtonovské tekutině s využitím metody CFD

Simona Doubravská (B3)

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

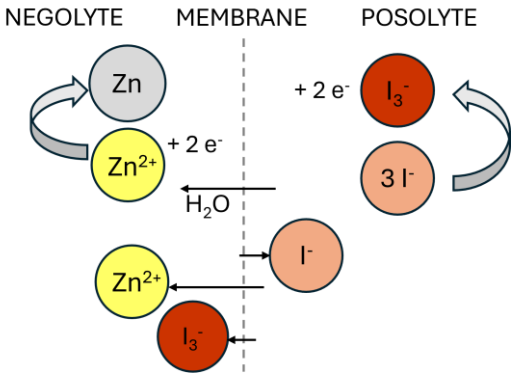
Lékové formy pro děti i v dnešní farmaceutické výrobě bývají navzdory přípravkům se stejnou účinnou látkou pro dospělé podávány v perorální formě, přičemž mezi nejčastější příklady takových forem patří ibuprofenové sirupy. Tyto přípravky mají podobu hustých suspenzí, jejichž struktura je ovlivněna přítomností xanthanové gumy. Právě ta dává léku charakteristické nenewtonovské, konkrétně pseudoplastické chování. To znamená, že viskozita závisí na rychlosti smyku – v klidu v lahvičce je systém dostatečně hustý, takže nedochází k nežádoucí sedimentaci aktivní látky, ale při dávkování lék teče snadno. Podstata míchání takovýchto tekutin je už při samotné výrobě velkou neznámou. Přípravky se v praxi míchají zbytečně dlouho, protože chybí přesná data o tom, jak se suspenze uvnitř nádoby reálně chová. Hlavním cílem této práce je proto pomocí počítačové fluidní dynamiky detailně popsat chování tekutiny za míchání, v budoucnu pak navázat sledováním procesu dizoluce aktivní látky a poskytnout průmyslové praxi spolehlivé podklady. Důležitou součástí práce bylo i posouzení geometrie míchadla a jejího vlivu na účinnost míchání. Finálním cílem by měl být optimalizovaný proces a zkrácení výrobních časů, které zajistí zkrácení provozních nákladů i přes zachování kvality výsledného přípravku.

Permeation of Electroactive Electrolyte Species Through Homogeneous Ion-Exchange Membranes in a Zinc–Iodine Hybrid Flow Battery

Bc. Martin Drnec (M1)

Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Growing deployment of weather-dependent renewable energy sources creates significant grid instability, highlighting the critical need for large-scale stationary energy storage. Zinc–iodine hybrid flow battery (ZIHFB) offers an attractive solution, combining high theoretical capacity, non-flammable aqueous electrolytes, and naturally abundant active materials. The operational principle relies on the reversible deposition and dissolution of zinc on the negative electrode coupled with the iodide/polyiodide redox couple on the positive one. Despite the promise, ZIHFB faces complex trade-offs between charging capacity, long-term efficiency, and system stability, as well as the strong dependence of zinc deposition morphology on operating currents. To address these challenges and gain deeper insight into the internal battery processes, this work investigates the transport of electroactive species through a series of commercially available homogeneous cation-exchange membranes of various thickness and ion-exchange capacity. Ex-situ permeation measurements with UV-VIS assisted analysis of the permeate concentration enables the evaluation of ion crossover rates through the membrane. Mapping the transport of these species provides essential insights into real cell behavior, establishing a foundation for mitigating of coulombic efficiency losses, self-discharge and extending ZIHFB operating lifetime.



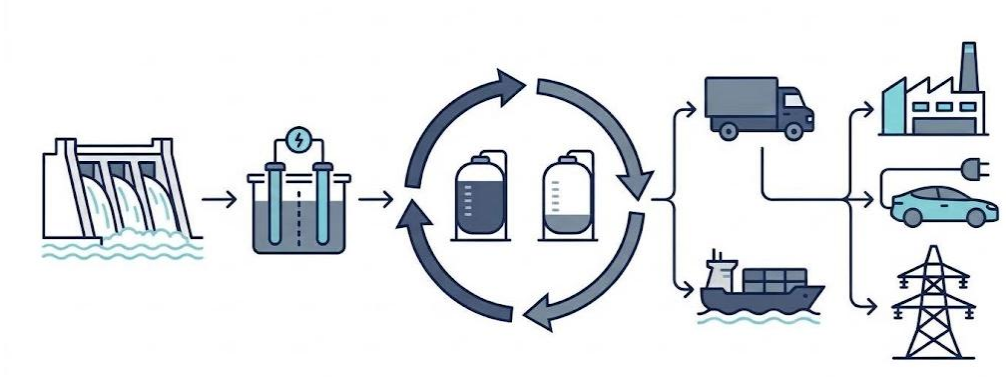
Schematics of ion permeation through cation-exchange membrane during charging

Process Simulation and Evaluation of LOHC and Compressed Hydrogen Pathways for Slovak Logistics

Bc. Daniela Dúbravská (M2, Slovenská technická univerzita v Bratislave)

Školitel: doc. Ing. Miroslav Variny, Ph.D.

This study evaluates advanced pathways for hydrogen logistics using liquid organic hydrogen carriers (LOHCs). The anticipated production pathway is driven by renewable electricity from the Gabčíkovo hydropower plant (2,200 GWh/y). Ambient-liquid carriers allow repeated hydrogenation and dehydrogenation cycles. Current research integrates this formulation into Slovak infrastructure. The reference pathway of compressed hydrogen is compared against two LOHC alternatives: toluene/methylcyclohexane (TOL/MCH) and dibenzyltoluene/perhydro-dibenzyltoluene (DBT/PDBT). Process simulations using the Peng–Robinson method in the Aspen Plus V14 environment optimized phase equilibria and energy demands during loading and release stages. The selected LOHC pairs offer distinct trade-offs, balancing the long-distance transport experience of TOL/MCH against the low volatility and superior safety of DBT/PDBT. The main objective is to quantify these pathways, testing their energy efficiency and infrastructure compatibility. This study was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract no. APVV-25-0315.



Příprava a charakterizace inhalovatelných práškových formulací allicinu s cyklodextriny

Bc. Vojtěch Dvořák (M2)

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

Rostoucí antibiotická rezistence představuje závažnou překážku v léčbě bakteriálních infekcí. Jednou z perspektivních látek je allicin, vysoce reaktivní přírodní thiosulfinát vznikající při poškození buněk česneku. Jeho využití však omezují nízká chemická stabilita, těkavost a vysoká reaktivita. Cílem práce je příprava inhalovatelných prášků s obsahem allicinu pomocí rozprašovacího sušení. Allicin je před sušením stabilizován v hydrofobní kavitě inkluzních komplexů. Byly porovnávány β-cyklodextrin (β-CD) a hydroxypropyl-β-cyklodextrin (HP-β-CD). U připravených prášků byly hodnoceny obsah allicinu, jeho stabilita při skladování a antimikrobiální aktivita vůči *E. coli*. Aerodynamické vlastnosti byly vyhodnoceny Andersenovým kaskádovým impaktorem (ACI) ve spojení s práškovým inhalátorem (HandiHaler) a depozice odhadnuta modelem MPPD. Při sušení docházelo k výrazným ztrátám volného allicinu. Při skladování (-20 °C) zůstával obsah allicinu v práškovém produktu prakticky neměnný. Další zvýšení podílu allicinu ve výchozím roztoku nevedlo k výrazně vyššímu obsahu allicinu ve finálním produktu. Podíl částic s aerodynamickým průměrem menším než 5 µm (FPF) byl 55,3 % pro β-CD a 62,6 % pro HP-β-CD. MPPD model využívající experimentální ACI data předpověděl obdobné chování obou formulací.

Vplyv pH na chromatografickú separáciu polyfenolov z repkového šrotu

Bc. Denisa Dzubová (M1, Slovenská technická univerzita v Bratislave)

Školiteľ: Ing. Monika Antošová, Ph.D.

Repkový šrot je vedľajším produktom pri spracovaní repky olejnej. Po extrakcii oleja z tejto rastliny sú v jej zvyškoch vo významnej miere zastúpené polyfenoly. Medzi ich dôležité vlastnosti patria silné antioxidačné, antibakteriálne a preventívne účinky voči civilizačným chorobám. Vďaka týmto vlastnostiam majú veľký potenciál ako udržateľný, prírodný zdroj antioxidantov pre potravinársky, kozmetický či farmaceutický priemysel. Ich vysoká koncentrácia v repkovom šrote a dobrá dostupnosť tejto suroviny naznačujú, že repkový šrot je vhodným zdrojom týchto látok. Účinným spôsobom izolácie polyfenolov z repkového šrotu je adsorpcia. Práca vznikla v spolupráci so spoločnosťou Centrum výskumu a vývoja, s.r.o. a jej cieľom bolo vyvinúť priemyselne aplikovateľnú metódu separácie polyfenolov. pH má zásadný vplyv na adsorpciu polyfenolov na nepolárne makroporézne adsorbenty, pretože ovplyvňuje polaritu polyfenolov. Experimentálne sa tak určilo optimálne pH na adsorpciu polyfenolov z extraktu repkového šrotu a vybral sa vhodný adsorbent. Chromatografickou separáciou sa následne stanovili vhodné podmienky na ich desorpciu. Navrhnutou metódou sa účinne vyčistili polyfenoly od hlavných prímesí a to s desorpčným výťažkom polyfenolov 79%.

Energy and Economic Evaluation of Steam Network Optimisation in a Refinery

Bc. Barbora Božidara Ferková (M2, Slovenská technická univerzita)

Školitel: doc. Ing. Miroslav Variny, Ph.D.

Industrial refineries face increasing pressure to improve energy efficiency and reduce CO_2 emissions. This study evaluates three alternatives for optimising a 0.4 MPa(g) steam network at SLOVNAFT a.s. The system supplies heat to buildings, storage tanks, steam tracing lines and pumping stations, with annual baseline energy losses of 2,018 GJ. Following an on-site inspection, all heat consumers were identified and mapped in the AutoCAD schematic. Their seasonal heating requirements were assessed, revealing that most consumers require heating only during winter. Three alternatives were compared: seasonal summer shutdown, electric heating and a hot water circulation loop. The solutions were evaluated based on energy consumption, investment and operating costs, payback periods, and CO_2 emissions. The results show that a six-month summer shutdown is the most cost-effective option, requiring an investment of around €10,000 and generating annual savings of around €21,087. The payback period is approximately six months, while CO_2 emissions decrease by 187 t/year. The findings demonstrate that optimising existing network operation can significantly improve energy efficiency and reduce emissions without major infrastructure investments.

Development of a Nutraceutical Multi-Unit System with Controlled Release

Bc. Nazir Galin (M2)

Supervisor: Ing. Ondřej Rychecký, Ph.D.

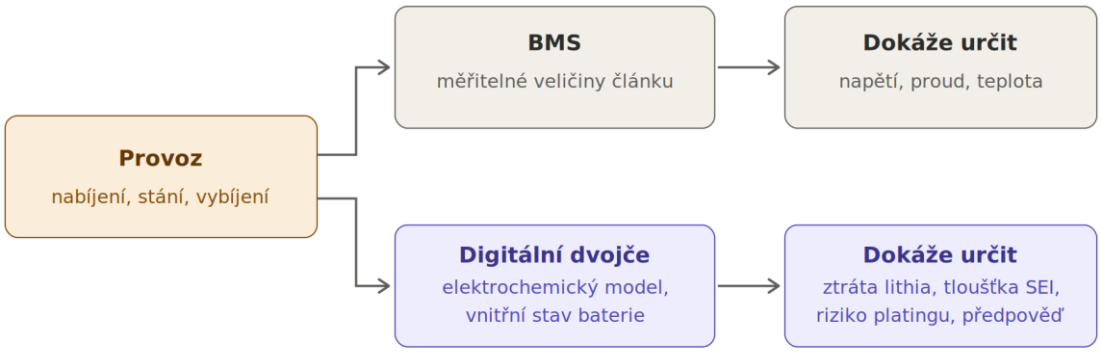
This project aims to develop a vegan, clean-label nutraceutical combining three tablets to release natural extracts at different times (immediately, delayed and sustained release). Dissolution is monitored by UV–Vis spectrophotometry in acidic and neutral pH according to EU pharmacopeia. The immediate-release tablet is optimised through excipient selection to promote rapid disintegration. The delayed-release tablet targets a three-hour lag phase followed by rapid release. As conventional pharmaceutical enteric polymers are excluded from the intended food-supplement formulation, ethylcellulose/sodium alginate coatings are investigated with Colorcon - leader of pharmaceutical film coating application. Ethylcellulose is insoluble in acid, while alginate responds to pH. We proved our hypothesis that greater coating weight gain and a higher ethylcellulose proportion will prolong the lag phase. The sustained-release tablet uses hydroxypropyl methylcellulose (HPMC) matrices with different polymer grades and contents to extend release over several hours. This work represents a solution for delayed release profile of tablets for food supplements.

Elektrochemický model stárnutí článku $LiFePO_4$/grafit a jeho využití pro digitální dvojče baterie

Bc. Ivana Havlenová (M2)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Dvě stejné baterie v elektromobilu se stejným počtem najetých kilometrů nemusí být ve stejném stavu. Záleží na tom, jak rychle se nabíjely, jak dlouho a při jakém stavu nabití stály a v jakých podmínkách pracovaly. Nejjednodušší systémy BMS (Battery management system) měří jen napětí, proud a teplotu, takže vnitřní stav článku a změny, jako např. ztrátu lithia nebo vylučování kovového lithia, nedokáže zaznamenat. Digitální dvojče baterie, které je průběžně aktualizované pomocích měřených dat, toto dokáže – uchovává stav konkrétního článku a na základě historie zacházení dokáže předpovědět jeho další vývoj. Tato práce prezentuje fyzikální model, který může sloužit jako jádro takového dvojčete. Model popisuje komerční $LiFePO_4$/grafit článek, ve kterém jsou elektrody reprezentovány částicemi s difuzí lithia v pevné fázi, transport iontů v separátoru je řešen soustavou rovnic Poisson–Nernst–Planck a stárnutí anody zahrnuje růst vrstvy SEI a vylučování lithia. Model je implementován v MATLABu metodou konečných objemů. Na rozdíl od empirických přístupů mají jeho parametry fyzikální význam a lze je převzít z literatury a ověřit na měřeních. Model je proto vhodnější pro extrapolaci mimo validované podmínky než čistě empirické modely. Model byl kalibrován a ověřen na experimentálních datech a následně použit k porovnání různých scénářů využívání baterie. Práce ukazuje, jaké další informace o stavu článku může dvojče poskytnout nad rámec jednoduchého BMS.



Preparation of Immobilised Photocatalytic Layers for Continuous-Flow Reactors

Bc. Tomáš Heimerle (M1)

Školitel: Ing. Anna Vanluchene, Ph.D.

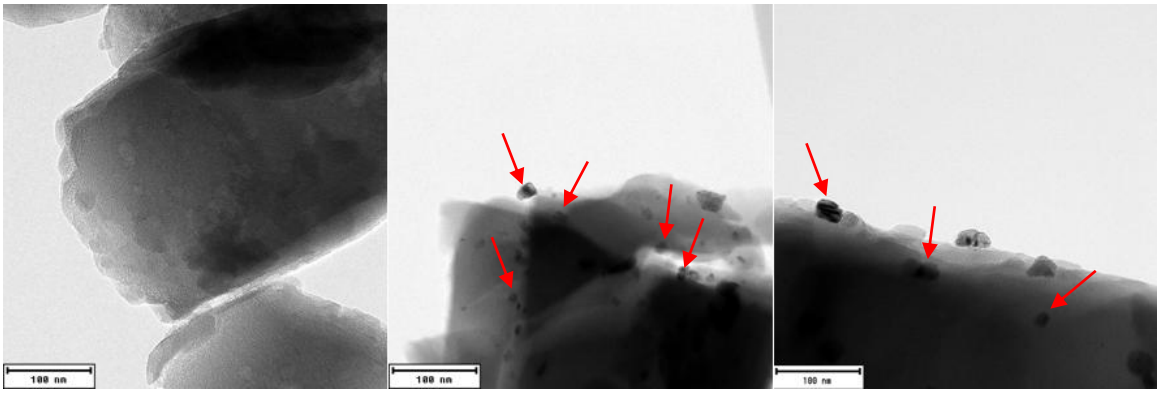
Graphitic carbon nitride (g-C_3N_4) is a metal-free visible-light photocatalyst, but its powder is difficult to recover from water, which limits its use in continuous water treatment. Immobilizing it as a thin layer in a microfluidic flow cell solves this problem. In this work, g-C_3N_4 was synthesized by thermal polycondensation of a melamine-cyanuric acid complex and deposited on glass by the doctor blade technique, chosen over spin and dip coating for its reproducibility. Three binders were compared (PVA, PVP, polysiloxane); a 60% polysiloxane formulation gave the most stable and homogeneous layer. At flow velocities of 0.36-7.8 m/s, its relative weight loss did not exceed 0.24%, and under UV light the layer degraded 81% of Rhodamine B in a residency time of 37 minutes. Ball milling of g-C_3N_4 is essential for forming such layers, but it reduces the catalyst's activity. Future work will focus on the kinetics of ball milling and on determining the photocatalytic activity of the individual milled fractions.

Deaktivace a reaktivace pasivních adsorbérů NO_x typu Pd/SSZ-13 a Pd/SSZ-39

Bc. Anežka Hendrychová (M2)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Pasivní adsorbéry NO_x (PNA) typu Pd/zeolit jsou katalytické systémy určené ke snížení emisí NO_x během studeného startu motoru, kdy navazující katalyzátory pro selektivní katalytickou redukci NO_x kvůli nízké teplotě ještě nepracují dostatečně účinně. PNA za nízkých teplot zachytí NO_x a po dostatečném ohřátí je uvolní pro další redukci. Provozní podmínky mohou měnit charakter aktivního kovu (Pd) v PNA. Za vysoké teploty se v oxidačním prostředí Pd může iontově vyměnit do zeolitu, kde je stabilizováno ve formě Pd^{2+} na kyselých centrech. Při expozici redukčním činidlům (CO, HC) za nižších teplot se iontově vázané Pd^{2+} redukuje na kovové Pd^0 a shlukuje do nanočástic, čímž se snižuje adsorpční kapacita. Následné zvýšení teploty vede k oxidaci Pd a jeho redisperzi do iontově vázané formy. K reaktivaci dochází jednak přirozeně při běžném provozu vlivem nárůstu teploty spalin, ale je možné daný proces cíleně vyvolat i pomocí řídicí jednotky. Tato práce porovnává rychlosti těchto dějů v PNA typu Pd/SSZ-13 a Pd/SSZ-39, které se liší topologií zeolitového nosiče. Výsledky ukazují různé rychlosti deaktivace a reaktivace, které plynou z rozdílné difuzivity Pd v zeolitu. Na základě opakovaných deaktivačních a reaktivačních cyklů jsou navrženy vhodné strategie pro regeneraci katalyzátoru.



aktivovaný deaktivovaný reaktivovaný

Studium antibakteriálních vlastností fotokatalytických materiálů

Veronika Hornová (B3)

Školitel: Ing. Anna Vanluchene, Ph.D.

Antibakteriální povrchy jsou materiály, které díky svému chemickému složení nebo struktuře aktivně ničí mikroorganismy a brání jejich množení. Využívají se v nemocnicích a prostředcích MHD k prevenci šíření infekcí, ale také na površích bioreaktorů a mechanických součástek, kde zamezují tvorbě škodlivých biofilmů a korozi. Práce zkoumá antibakteriální účinek draselného poly(heptazinimidu) (K-PHI) a grafitického nitridu uhlíku (g-C_3N_4) při osvitu viditelným světlem. K inaktivaci mohou přispívat reaktivní formy kyslíku vznikající při fotokatalýze. Oba materiály jsou založeny na heptazinových jednotkách. V K-PHI jsou propojeny imidovými můstky a ve struktuře jsou draselné ionty; g-C_3N_4 má vrstevnaté uspořádání. K-PHI byl připraven tepelným zpracováním melaminu s chloridem draselným, g-C_3N_4 kondenzací komplexu melaminu a kyseliny kyanurové. Materiály byly charakterizovány metodami FT-IR, XRD a BET. Jejich aktivita byla porovnána při degradaci methylenové modři sledované UV-Vis spektrofotometrií. Kontroly bez katalyzátoru a bez osvitu pomohly odlišit fotolýzu a adsorpci od fotokatalýzy. Posoudí se i stabilita při opakovaném použití. Vyvíjí se aparatura pro rovnoměrný osvit vzorků. Test na Escherichia coli porovná vliv materiálu, osvitu i jejich kombinace na životaschopnost bakterií.

Vývoj aplikace pro vyhodnocení kinetických parametrů pevných materiálů během tepelného rozkladu

Bc. Jakub Hronza (M1)

Školitel: Ing. Vojtěch Šálek, Ph.D.

V posledních letech je na vzestupu využívání pokročilých matematických modelů k předpovídání šíření požárů. Tyto modely jsou založeny na fyzikálně-chemickém popisu tepelného rozkladu pevných látek (pyrolýzy), který vyžaduje zadání velkého množství kinetických a tepelných vstupních parametrů. Ani pro běžně používané materiály jako je dřevo však tyto parametry nejsou dostupné v literatuře, a proto je nutné je získávat experimentálně. Tato práce se zabývá vývojem aplikace a grafického rozhraní v programu Python k automatizovanému zpracování již naměřených experimentálních dat. Jedná se o data poskytnutá termogravimetrickou metodou (TGA), která hledané kinetické parametry neposkytuje přímo, ale vyžaduje volbu zjednodušeného rozkladného schématu tepelného rozkladu a následnou aplikaci metod matematické optimalizace. Bude představen páteřní rozhodovací algoritmus vyvíjeného kódu s důrazem především na uživatelsky přístupné možnosti volby tohoto schématu, kinetického modelu, optimalizačních metod a vhodné sady optimalizovaných parametrů.

Příprava krystalů síranu vápenatého z brakických vod

Matyáš Choc (B3)

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

Síran vápenatý je významná sloučenina v celé řadě odvětví průmyslu, jako například stavebnictví při výrobě cementu či sádrokartonu. Zároveň je to také velmi běžná složka odpadních vod z průmyslu. K jeho vzniku dochází například neutralizací kyseliny sírové hydroxidem vápenatým anebo při výrobě hnojiv. Jeho koncentrace často nejsou příliš vysoké, nicméně legislativní limity jsou nastaveny přísně a jsou připouštěny koncentrace maximálně 200 až 600 mg/l síranu vápenatého. Tyto limity jsou takto přísné zejména kvůli korozi betonu a následnému ničení kanalizace. Některé firmy toto řeší ředěním odpadních vod, což je nelegální, avšak za to velmi levné. Cílem této práce je lépe porozumět zakoncentrovávání a krystalizování síranu vápenatého pomocí průtočné cely. Ta se skládá z aniontově a kationtově výměnných membrán. Prostřední kanálek zde obsahuje zředěný roztok síranu vápenatého, sousední kanálek chlorid vápenatý a druhý sousední síran sodný. Výzkum se dále zabýval skutečností, jestli po připojení ke zdroji napětí bude vznikat koncentrát síranu vápenatého, za jakých podmínek a jestli je možné zahájit i krystalizaci takovéhoto roztoku.

Experimental study of filtration efficiency

Bermet Idinova (B3)

Školitel: Ing. Marie Plachá, Ph.D.

Solid and liquid airborne pollutants, collectively known as particulate matter (PM), pose significant threats to human health and the environment, and can compromise industrial processes that require high air purity. The most common method of removing PM is physical filtration, which relies on multiple mechanical and electrostatic capture mechanisms. Electrostatic forces have been shown to increase filtration efficiency with minimal effect on pressure drop. In this work, a laboratory filtration setup is used to generate aerosol particles consistently and reproducibly, with filtration efficiency determined by measuring particle concentration downstream of the filter. Volumetric flow rate, dilution and pressure drop are monitored to ensure stable and repeatable operating conditions. These baseline measurements can then later be used to investigate the influence of electrostatic charge on filtration efficiency and to identify the dominant capture mechanisms, supporting further experimental research and the optimisation of testing methodologies.

Charakterizace povrchu bublin ve vodných suspenzích organosolventního ligninu

Bc. Markéta Jamborová (M1)

Školitel: doc. Dr. Ing. Pavlína Basařová

Pro separaci minerálních rud se využívá proces flotace, který je založen na rozdílné smáčivosti povrchů složek. Pro zlepšení separace se ke směsi přidává kolektor. Běžnými kolektory pro získávání Cu, Ni a Zn ze sulfidických rud jsou xantháty, které jsou však toxické pro životní prostředí. Jako ekologická náhrada je studován biopolymer lignin extrahovaný organickým rozpouštědlem, tzv. organosolventní lignin. V rámci této práce byla připravena suspenze organosolventního ligninu a bylo zkoumáno chování bublin při různých koncentracích vodných roztoků ligninu. Rychlosti bublin a fyzikální vlastnosti byly měřeny pro různé koncentrace roztoků. Byl prokázán vliv ligninu na mobilitu povrchu bublin.

Poly(2-oxazoliny) ako polymérne nosiče venetoclaxu: skríning hydrofóbneho bloku B pomocou COSMO-RS a PC-SAFT

Viktória Klačková (B3)

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

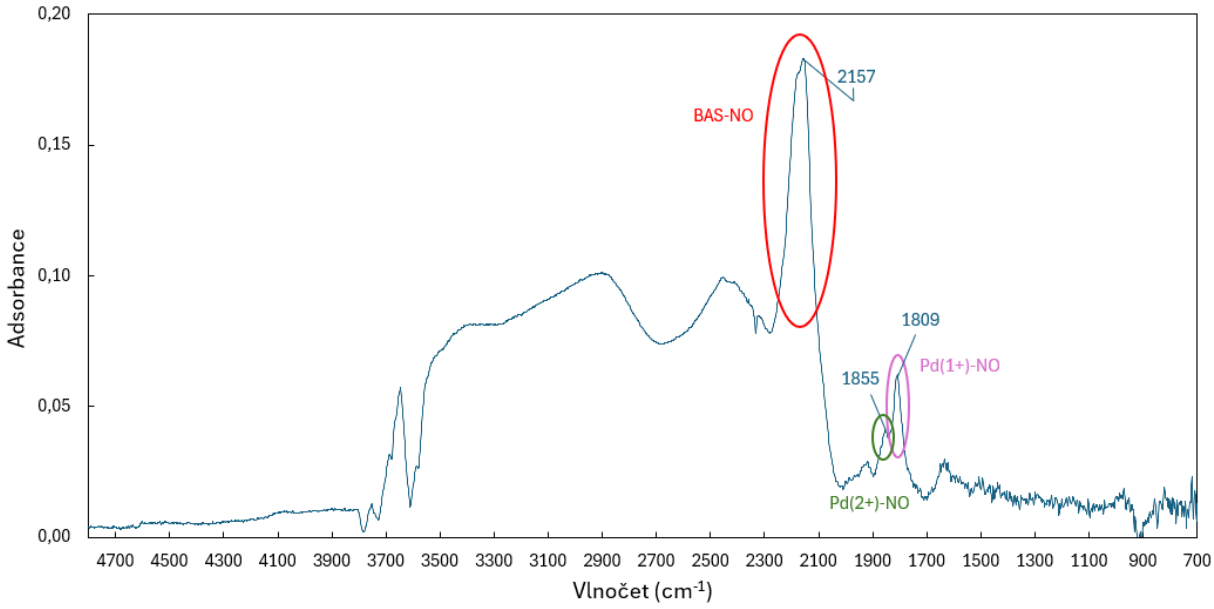
Venetoklax je inhibítor BCL-2 používaný pri liečbe chronickej lymfocytovej a akútnej myeloidnej leukémie. Ako liečivo IV. triedy podľa BCS vykazuje nízku rozpustnosť vo vode a nízku permeabilitu, čo obmedzuje jeho perorálnu biologickú dostupnosť. Cieľom výskumu je formulovať venetoklax do miciel tvorených amfifilnými ABA triblokovými poly(2-oxazolín) polymérmi s hydrofilným obalom (bloky A) a hydrofóbnym jadrom (blok B). Keďže účinnosť zapracovania liečiva závisí od kompatibility s jadrom, bola predikovaná rozpustnosť venetoklaxu pre šesť B blokov. Využité boli modely COSMO-RS a PC-SAFT. Oba modely predikujú vysokú rozpustnosť a konzistentné poradie. Najvhodnejšie sú propylové B bloky, zatiaľ čo fenylové a *n*-nonylové vykazujú najnižšiu predikovanú rozpustnosť napriek vyššej hydrofobicite, ktorá teda nie je spoľahlivým kritériom výberu polymérneho jadra. Štandardné metódy overenia výpočtov vyžadujú kryštalické liečivo, ale dostupný venetoklax je prevažne amorfný a je ho obmedzené množstvo. Miešateľnosť liečiva s polymérom sa preto skúma diferenčnou skenovacou kalorimetriou na základe teploty skelného prechodu (T_g). Jedna hodnota T_g indikuje miešateľnosť systému, zatiaľ čo dve odlišné hodnoty indikujú fázovú separáciu. Dve hodnoty T_g pozorované pri DSC však nemusia znamenať nemiešateľnosť systému, ale môžu súvisieť s nedokonalým premiešaním. Na objasnenie sa pripravujú vzorky metódou odparovania rozpúšťadla.

Analýza průběhu adsorpce a desorpce NO_x na povrchu katalyzátorů PNA pomocí DRIFT spektroskopie

Jan Koblic (B3)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Tlak na snižování emisí znečišťujících látek u spalovacích procesů neustále narůstá. Selektivní katalytická redukce (SCR) umožňuje efektivní přeměnu oxidů dusíku (NOx), které vznikají jako nežádoucí vedlejší produkt při spalování, na neškodný inertní dusík. Při použití se spalovacími motory však nastává problém při studeném startu. Teplota spalin zprvu není dostatečná k dosažení potřebné aktivity katalyzátoru, a tedy dochází k úniku NO_x do ovzduší. Pasivní absorbér oxidů dusíku (PNA), určený k zachytávání NO_x za nízkých teplot, je jedním z možných řešení tohoto problému. V této práci byl zkoumán průběh adsorpce a desorpce NO_x na dvou vzorcích PNA typu Pd/zeolit, které se však lišily zeolitickou strukturou: Pd/SSZ-13 a Pd/SSZ-39. K tomu byla využita difuzně-reflexní infračervená spektroskopie s Fourierovou transformací (DRIFTS). Cílem práce bylo změřit vývoj spekter povrchových složek v průběhu adsorpce a teplotně řízené desorpce NOx a z nich stanovit příspěvek jednotlivých forem Pd (iontově vyměněné Pd^{1+}, Pd^{2+} a nanočástice Pd) a Brønstedových kyselých center v zeolitu. Výsledky ukazují, že za typických podmínek je příspěvek nanočástic Pd pouze okrajový a pro funkci materiálu je klíčové iontově vyměněné Pd ve struktuře zeolitu.

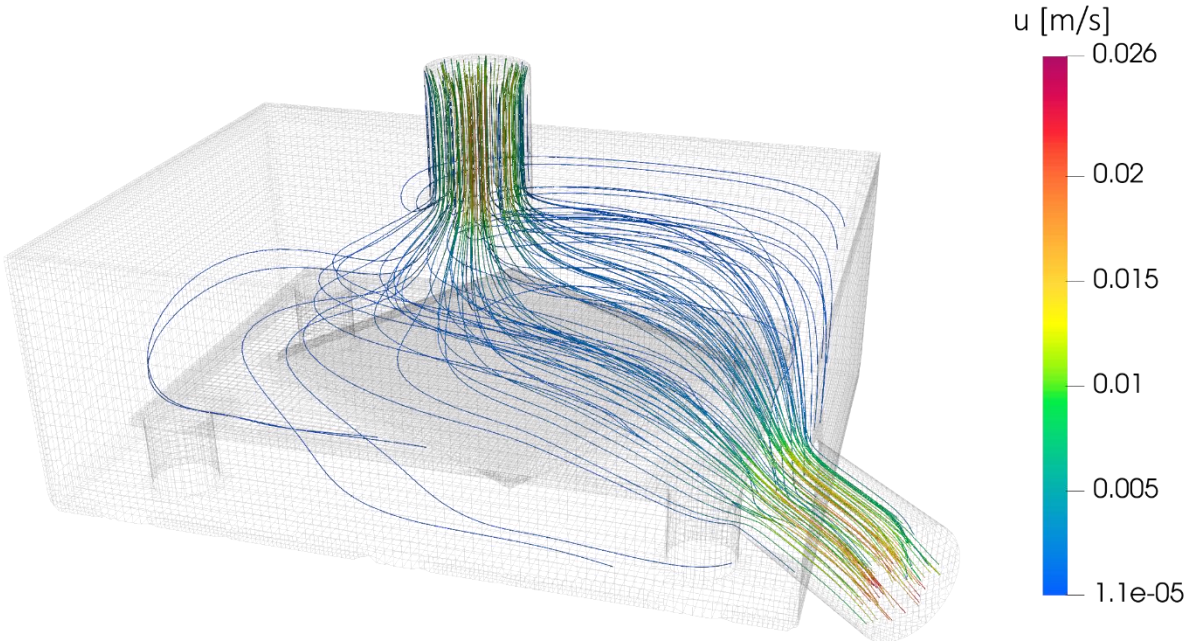


Matematické modelování reakčně-transportních procesů v cele pro testování nanokatalyzátorů

Adam Kovalčík (B3)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Oxidativní dehydrogenace cyklohexenu je heterogenně katalyzovaná reakce, jejíž konverze závisí na teplotě, tlaku, složení plynu, vlastnostech katalyzátoru a transportních jevech v systému. Omezený transport složek plynu v blízkosti povrchu katalyzátoru může ovlivňovat jejich lokální koncentrace, reakční rychlost a dosaženou konverzi. Při vyhodnocení naměřených dat je proto nutné zohlednit jak chemickou kinetiku, tak transportní omezení. Cílem této práce je vytvořit 3D matematický model reakční cely určené k testování nanokatalyzátorů, který popisuje profily tlaku, rychlosti, koncentrací složek plynu a jejich konverzi v závislosti na zvolených provozních parametrech (teplota, průtok a další). Daný systém je řešen metodou výpočetní dynamiky tekutin (CFD) ve výpočetním prostředí OpenFOAM s využitím skutečné geometrie cely. Vytvořený matematický model zohledňuje proudění plynu, konvekční a difuzní transport složek a realistický kinetický popis povrchové reakce při oxidativní dehydrogenaci cyklohexenu na aktivních CuPd pentamerech nanesených na destičku nosiče. Výsledky modelu jsou porovnány s experimentálními údaji a výsledky zjednodušeného modelu ideálně promíchávaného průtočného reaktoru.



Vývoj mikrofluidní platformy pro studium bakteriálního biofilmu

Bc. Filip Kříž (M2)

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

Tvorba bakteriálního biofilmu a s ním spojený biofouling představují závažný technologický i ekonomický problém. V potrubních systémech způsobuje mikrobiálně indukovanou korozi, nebezpečnou kontaminaci a postupné zanášení, což vede k nárůstu drsnosti a zvýšeným tlakovým ztrátám. Eradikaci biofilmu navíc radikálně ztěžuje jeho extrémní rezistence vůči antimikrobiálním látkám i mechanickému čištění, která může být až 10 000krát vyšší než u planktonních buněk. Tento projekt se zaměřuje na vývoj mikrofluidní platformy pro detailní *in vitro* studium dynamiky vzniku, růstu a odstraňování biofilmu za definovaných průtokových podmínek. Oproti tradičním statickým metodám přináší mikrofluidika zásadní výhody: umožňuje přesnou kontrolu toku i kontinuální dodávku živin, výrazně snižuje spotřebu chemikálií a nabízí monitorování růstu biofilmu v reálném čase pomocí mikroskopie. Klíčovým prvkem platformy je integrace mikrostruktur uvnitř kanálku pro zkoumání vlivu topografie povrchu na počáteční adhezi bakterií. Získaná data pomohou lépe pochopit mechanismy tvorby biofilmu a jeho rezistence za dynamických podmínek. Vyvinutý čip tak poslouží jako nástroj pro testování nových antifoulingových strategií a optimalizaci povrchových úprav s cílem zamezit usazování bakterií v průmyslové i medicínské praxi.

Nanokrystaly nintedanibu pro léčbu plicní fibrózy

Bc. Zuzana Krutinová (M1)

Školitel: Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.

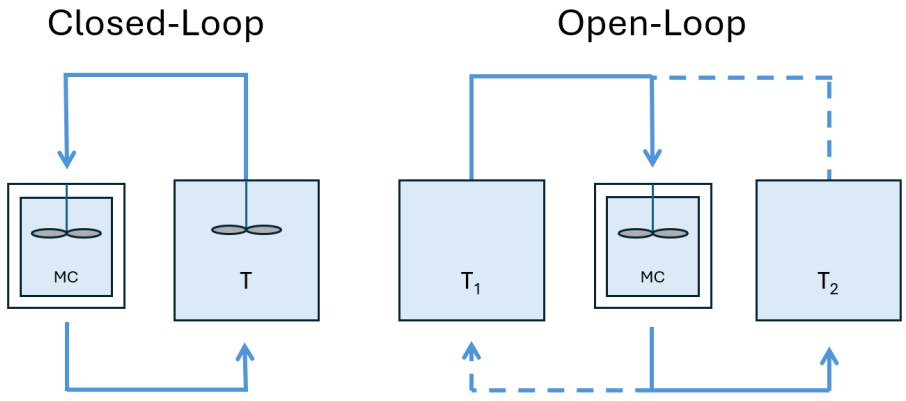
Idiopatická plicní fibróza je závažné progresivní onemocnění charakterizované zjizvením plicní tkáně, které vede ke zhoršení plicních funkcí. V současnosti schválená antifibrotika, nintedanib, pirfenidon a nerandomilast, dokáží progresi onemocnění pouze zpomalit. Tato léčiva jsou podávána perorálně, což je spojeno se systémovými nežádoucími účinky a ztrátami léčiva v důsledku nízké rozpustnosti a metabolismu při prvním průchodu játry (first-pass efekt). Jednou z možností, jak zvýšit množství léčiva v místě účinku a současně snížit systémovou zátěž organismu, je jeho inhalační podání. V této práci jsou studovány nanokrystaly nintedanibu připravené metodou mokrého mletí a stabilizované fosfolipidy, které jsou přirozenou součástí plicního surfaktantu. První část práce je zaměřena na hodnocení fyzikálně-chemické a koloidní stability nanokrystalů po šesti měsících skladování. Druhá část práce se zabývá zavedením *in vitro* modelu plicní fibrózy na lidských plicních fibroblastech linie MRC-5. Fibrotický fenotyp je indukován transformujícím růstovým faktorem beta 1 (TGF-β1). Cílem je optimalizovat podmínky indukce, zejména koncentraci TGF-β1 a dobu expozice a vytvořit reprodukovatelný model vhodný pro budoucí hodnocení antifibrotického účinku nanokrystalických formulací.

Nanomilling: Experimental Investigation and Breakage Rate Estimation

Alexandra Kryvošejeva (B2)

Supervisor: Ing. Miroslav Večeřa

Wet stirred-media milling offers a promising approach to improving the bioavailability of certain active pharmaceutical ingredients. Reducing particle size to the submicron range substantially increases the specific surface area and thereby enhances properties such as the dissolution rate. However, the process poses many challenges, particularly regarding scale-up and the development of predictive models. This project addresses some of these challenges. First, the composition of the milling suspension is optimized to suppress reagglomeration, thereby increasing nanoparticle yield and providing a suitable system for modelling milling kinetics. Second, the performance of two scale-up strategies, closed-loop and open-loop milling (see figure), is compared. The latter is expected to produce a narrower particle size distribution by preventing the recirculation of already milled particles into the milling chamber. Finally, since nanoparticles cannot be easily separated into individual size fractions for independent kinetic analysis, apparent breakage rates are estimated directly from experimental particle size distribution data. These estimates will provide a basis for developing a predictive model for selecting operating conditions and process configurations.



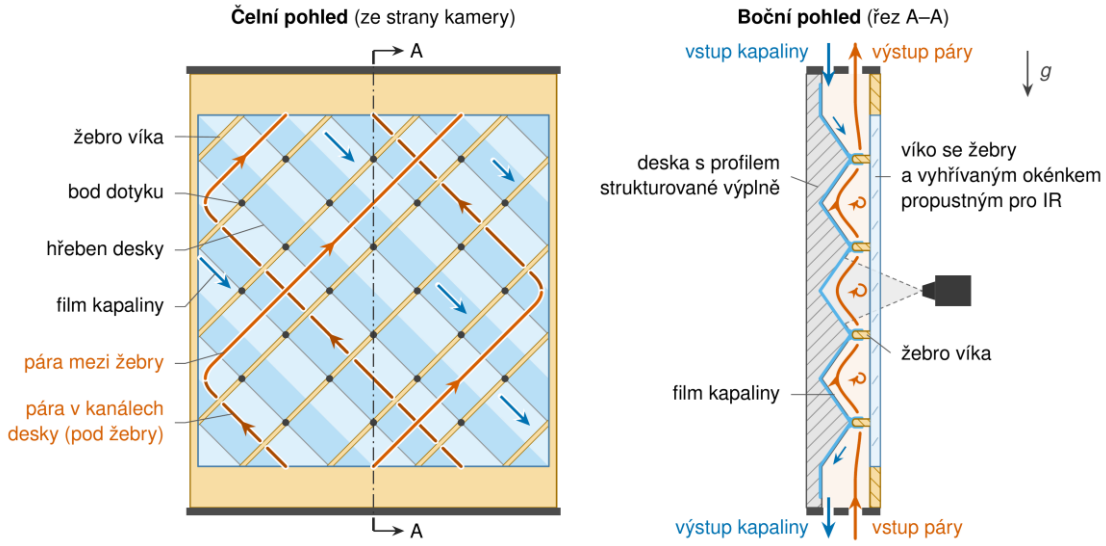
MC ... Milling Chamber, T... Reservoir Tanks

Návrh aparátu simulujícího styk kapaliny a páry na strukturované výplni pro IR termografii

Bc. Vojtěch Kudr (M1)

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

Destilace se podle často citovaných odhadů podílí přibližně 3 % na celosvětové spotřebě energie a přibližně 40 % na energetické spotřebě chemického průmyslu. I přes široké průmyslové použití strukturovaných výplní nejsou mechanismy přenosu hmoty mezi kapalnou a parní fází v plněných destilačních kolonách do detailu známy. Průmyslové kolony však nejsou pro jejich studium vhodné, protože neumožňují dostatečný optický přístup k povrchům plechů strukturovaných výplní. Navrhujeme aparát, ve kterém lze styk kapaliny a páry na výplni sledovat infračervenou kamerou, tedy pozorovat, jak kapalina smáčí povrch a jakou má teplotu. Jednu stěnu kanálu tvoří deska s profilem výplně Mellapak 250.Y, po které stéká film kapaliny. Druhou stěnou je víko se žebry a kamera snímá film mezerami mezi nimi. Žebra nahrazují druhý plech výplně tak, aby tok páry byl hydrodynamicky ekvivalentní situaci, kdy protikus je list strukturované výplně. Hydrodynamickou analogii obou geometrií ověřujeme simulacemi proudění v COMSOL Multiphysics a výsledky porovnáváme s měřeními tlakové ztráty z literatury. Do budoucna chceme simulace ověřit na experimentální aparatuře vyrobené 3D tiskem, díky kterému lze nové geometrie protikusu ve formě víka se žebry rychle vyrobit a vyzkoušet.



Vplyv priemeru Rushtonovej turbíny na hydrodynamiku a výmenu hmoty vo viacmiešadlovej nádobe

Bc. Adam Labach (M2)

Školitel: prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha

Táto práca sa zaoberá experimentálnym štúdiom hydrodynamiky a medzifázovej výmeny hmoty v miešanej nádobe s priemerom T = 0,29 m a celkovým objemom V = 55,02 dm^3, osadenej trojicou miešadiel na spoločnom hriadeli. Hlavným cieľom je posúdenie vplyvu priemeru D Rushtonovej turbíny (D/T = 0,25 až 0,46) na intenzitu axiálneho premiešavania hmoty medzi zónami jednotlivých miešadiel a celkový čas homogenizácie t_{95}. Merania boli vykonávané v rozsahu otáčok 250 až 850 RPM pre jednofázovy systém, tak aj pri dosýcovaní plynom z dávkovača s rôznymi mimovrstvovými rýchlosťami. Vyhodnotenie koncentračných profilov získaných z troch vodivostných sond umiestnených v rôznych výškových úrovniach nádoby bolo založené na nelineárnom fitovaní analytického riešenia sústavy diferenciálnych rovníc látkovej bilancie. Z nameraných dát boli určené výmenné prietoky Q_L, charakteristické časy miešania t_{95} a bezrozmerné prietokové čísla N_Q. Získané dáta poskytujú podklady pre optimalizáciu geometrie viacmiešadlových systémov s Rushtonovými turbínami.

Designing of heat pump using waste heat from recuperation in pulp and paper mill

Bc. Matej Lang (M2, Slovenská technická univerzita v Bratislave)

Školitel: Ing. Ivan Červeňanský, Ph.D.

Heat pumps are useful devices that transform low-energy sources into high-energy level mediums such as hot water/air or steam. Depending on the type of heat pump, either using electrical power to compress a refrigerant in the internal cycle (compression heat pumps) or by use of heat released during absorbtion (absorption heat pumps). When using compression heat pumps it is crucial to use suitable refrigerant. Disadvatage of using absorption heat pumps is, that a high-energy mediums like steam need to be used for desorption step of the heat pump cycle. To design the heat pump, it was necessary to find out the heat we need to produce. The heat source considered in this work was a saturated air from recuperation. The aim was to replace the energy given to the pulp via low-pressure steam, that is releasing its latent and sensible heat. The refrigerants were also chosen according to their physicochemical properties. Additionally, new piping dimensions and properties were designed including length, diameter, valves and fittings. A simple control logic for the process integration was also devised.

Syntéza, povrchová funkcionalizácia a štúdium cieleného transport antikoagulačných liečiv na mezopórovitej silike a "core-shell" nanočasticiach

Bc. Ester Liptáková (M1, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach)

Školitel: Mgr. Nikolas Király, Ph.D.

Mezopórovitá silika a magnetické nanočastice predstavujú perspektívne nosiče pre kontrolované uvoľňovanie liečiv. V práci bol syntetizovaný mezopórovitý materiál MSM-60 a jeho deriváty funkcionalizované chlorido-, amino- a tiolovými skupinami. Pripravené materiály boli charakterizované spektrom fyzikálno-chemických metód, ktoré potvrdili vhodné textúrne a chemické vlastnosti. Materiály boli impregnované antikoagulačnými liečivami apixabanom a rivaroxabanom a ich uvoľňovanie bolo sledované pomocou HPLC chromatografie pri rôznych hodnotách pH. Výsledky potvrdili vplyv povrchovej funkcionalizácie a pH na desorpciu liečiv. MSM-60-NH_2 vykazoval vysoký podiel uvoľneného apixabanu, zatiaľ čo MSM-60-SH umožňoval jeho efektívnejšie uvoľňovanie. Súčasťou práce bola aj príprava magnetických nanočastíc s kombinovanou vrstvou SiO_2 a štúdium ich adsorpčno-desorpčných vlastností. Cytotoxicita bola hodnotená MTT testom na fibroblastoch hrubého čreva po 24 a 48 hodinách.

Development of K-PHI/Iron Oxide Composites for Visible-Light-Activated Antibacterial Applications

Bc. Ana Sofia Ferreira Loureiro (M2)

Supervisor: Ing. Anna Vanluchene, Ph.D.

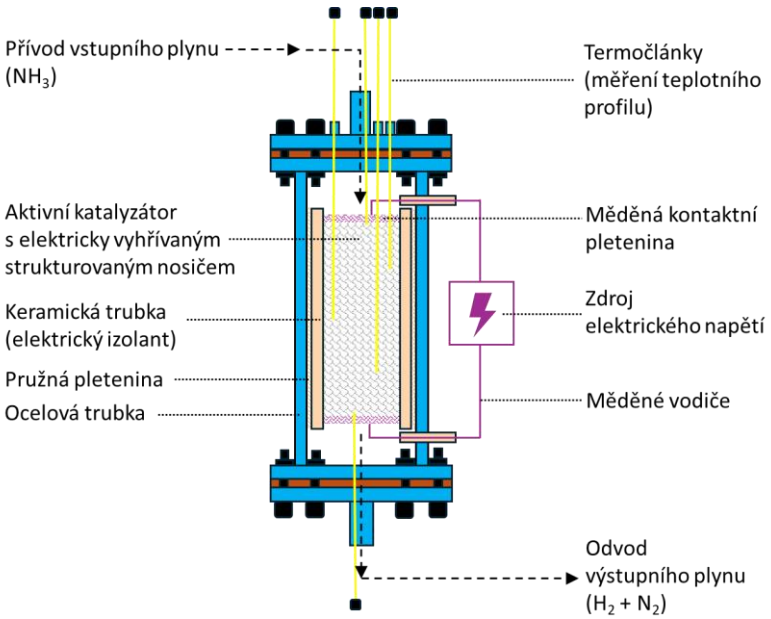
Water contamination by pathogens poses a severe environmental challenge. As bulk water treatment faces scalability limits, developing antibacterial surfaces is critical for water-contact systems (pipes, storage tanks or membranes) prone to resistant biofilms. Visible-light photocatalysis generates reactive oxygen species (ROS) in situ, avoiding conventional disinfectants like chlorine. Potassium poly(heptazine imide) (K-PHI) is a visible-light-active polymer, but its efficiency is restricted by rapid charge carrier recombination. To overcome this, a K-PHI/Fe_3O_4 composite was synthesized via in situ co-precipitation alongside controls: pristine K-PHI, treated K-PHI (subjected to identical synthesis conditions without magnetite), pure Fe_3O_4 and a physical mixture of both. The experimental approach comprises two phases. First, dark adsorption and visible-light-driven degradation of methylene blue will be assessed to characterize the material's preliminary adsorption and photocatalytic properties. Second, *Escherichia coli* inactivation will be evaluated under visible-light and dark conditions to investigate light-induced antibacterial activity. These assays will clarify whether interfacial coupling drives light-activated cell death, providing a foundation for self-disinfecting materials.

Návrh katalytického reaktoru s elektricky vyhřívaným substrátem

Petr Mádlík (B3)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Mnohé reakce v chemickém průmyslu jsou endotermní a pro jejich provozování je třeba dodávat do reaktoru teplo, které je často získáváno spalováním fosilních paliv. To se týká například výroby vodíku reformingem zemního plynu nebo rozkladem amoniaku. Tato práce se zabývá návrhem reaktoru s elektricky vyhřívaným substrátem. Tento přístup má dvě výhody: jednak se teplo generuje přímo uvnitř reaktoru, takže odpadají problémy s omezeným přestupem tepla přes plášť reaktoru, a může také v kombinaci s obnovitelnými zdroji elektrické energie přispět k dekarbonizaci chemických výrob. Jako modelový systém je zkoumán katalytický rozklad amoniaku na vodík s využitím katalyzátoru $Ni/La_2O_3/\gamma\text{-}Al_2O_3$, naneseného na elektricky vodivý strukturovaný substrát v podobě SiSiC pěny, která zároveň slouží k odporovému ohřevu pro kompenzaci spotřebovaného reakčního tepla. Katalyzátor je nanášen namáčením substrátu do suspenze, následným sušením a kalcinací. Mezi hlavní cíle práce patří nalezení vhodných konstrukčních řešení a sestavení reaktoru se zaměřením na elektrické kontakty, utěsnění, tepelnou i elektrickou izolaci a distribuci toku plynu. Sestavený reaktor slouží pro ověření celého konceptu a umožní další optimalizaci a úpravy návrhu pro průmyslové aplikace.



Validated electrochemical model of various lithium-ion batteries

Michaela Mašlániová (B3)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Electrochemical modeling of lithium-ion batteries is crucial for predicting cell performance and uncovering complex internal transport and degradation mechanisms. To address these challenges, the lithium-ion cell simulation model was built in a MATLAB-based numerical framework designed for high-fidelity evaluation of electrochemical behavior in various cell chemistries. To accurately capture steep concentration gradients near electrode interfaces, a non-uniform domain discretization utilizing a hyperbolic tangent transformation is implemented. The model incorporates transient ion transport phenomena via Nernst-Planck equations, coupled with Butler-Volmer electrode kinetics and dynamic concentration polarization limits. Furthermore, it features real-data comparative load curve analyses across prominent cell chemistries, including NMC/Graphite, LFP/Graphite, and NMC/LTO, alongside double-layer response simulations, power density evaluations, and cyclic voltage hysteresis modeling for capacity degradation tracking. This model represents a starting point for advanced modeling of electrode degradation and electrode regeneration phenomena.

Simulace a optimalizace procesu rektifikace v Orlen Unipetrol Kralupy nad Vltavou

Bc. Jan Mazák (M2)

Školitel: Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.

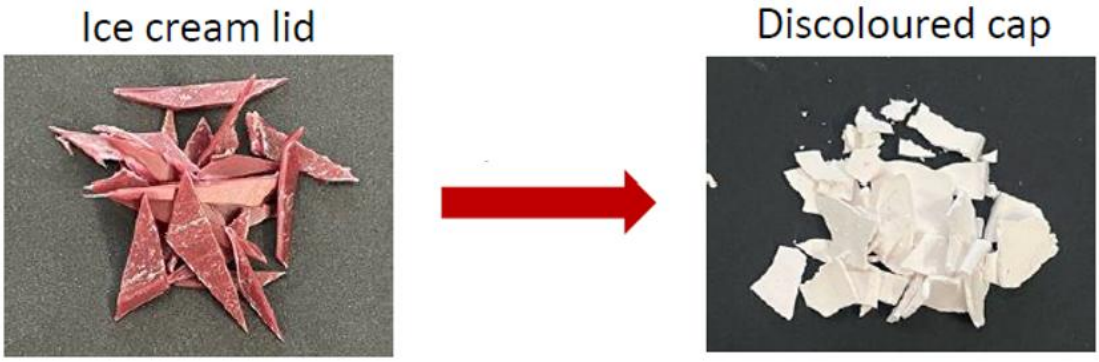
V rafinerii Orlen Unipetrol Kralupy nad Vltavou dochází na rektifikační koloně k dělení surového benzínu na lehký řez, střední řez (vedený do stripovací kolony k dodatečnému oddělení složek lehkého řezu) a těžký destilační zbytek. Nástřik benzínu je předehříván proudy středního a těžkého řezu a následně je dohříván ve 3. tepelném výměníku, v němž je topným médiem pára. Samotnou kolonu vyhřívá reboilovací pec, kde je palivem rafinérský plyn. Cílem práce je na základě dřívějšího seznámení se s celým procesem a osvojení si klíčových technologických limitů, které musí proces splňovat, vytvořit funkční simulaci stávajícího reálného stavu. Tuto simulaci je následně nutné optimalizovat pro dosažení maximální finanční úspory. Toho bude dosaženo úpravou provozních parametrů, mezi které patří změna teploty refluxního toku, změna nástřikového patra či úprava poměru dodaného tepla mezi předehřevem nástřiku a reboilovací pecí – například zvýšením tepelného výkonu v reboilovací peci za současného snížení spotřeby topné páry v předehřevu. Zásadním bodem je současné stanovení hydraulických limitů kolony, čímž se zaručí, že nalezené ekonomické optimum bude v praxi bezpečně provozovatelné.

Enhancing Solvent-Based Recycling for Efficient Removal of Additives from Polymers

Barbora Moravčíková (B2)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Plastic materials have become an essential part of everyday life; however, their increasing production is accompanied by growing amounts of plastic waste. One major challenge in polymer recycling is the presence of additives, which can negatively affect the quality and the potential reuse of recycled materials. Solvent-based polymer recycling is a promising approach to polymer purification, enabling additive removal while preserving the original polymer structure, and is currently being developed in our laboratory. This work investigates the purification of additive-containing polymer using various organic solvents and an adsorbent, with particular attention to the effects of solvent type and adsorbent loading. The experiments were performed in laboratory-built sealed apparatuses under controlled conditions. We subsequently analyzed the recovered polymers by spectroscopic methods and compared them with calibration samples. This work aims to identify suitable conditions for efficient removal of pigments, antioxidants, and flame retardants from polymers and to contribute to the further development of solvent-based recycling technologies.



Calculation of fragment flight range

Bc. Balázs Nagy (M2, Slovenská technická univerzita v Bratislave)

Supervisor: Ing. Matej Danko, Ph.D.

During an internship at the Research Institute for Petroleum and Hydrocarbon Gases (VÚRUP), a standalone Excel program was developed to calculate fragment flight ranges following pressure vessel failure. Existing software assessed toxic effects, fire and blast overpressure but omitted fragments, which can cause fatal injuries and equipment damage. The program considers cylindrical and spherical vessels, including boiling liquid expanding vapour explosion (BLEVE) scenarios. It uses vessel data and thermodynamic properties to estimate initial fragment velocity and flight range. Methods for the Calculation of Physical Effects (CPR 14E, Yellow Book) and an empirical approach from Guidelines for Chemical Process Quantitative Risk Analysis (CPQRA) were compared with two assessments from 2005. As shown in Figure 1, for reference ranges of 941 and 701 m, CPR 14E predicted 890 and 660 m, while CPQRA predicted 1172 and 1008 m, respectively. CPR 14E agreed more closely with earlier calculations.The program automates fragment range calculations within the limitations of simplified fragmentation and flight models.

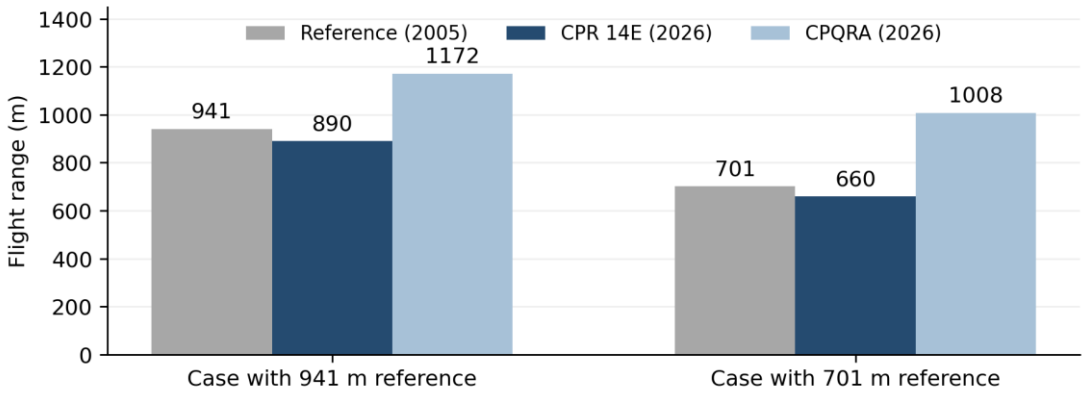


Figure 1. Comparison of reference ranges (2005) with calculated ranges (2026).

Význam a vlastnosti iontově-výměnných membrán v zinko-jodových průtočných bateriích

Denisa Olivová (B3)

Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

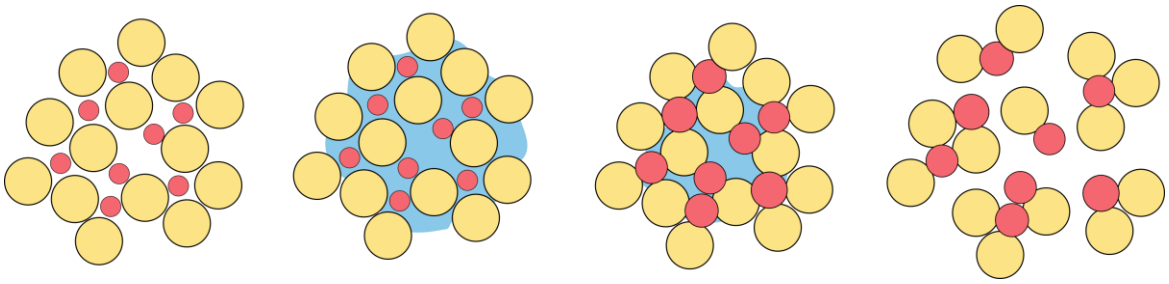
Průtočné baterie představují jednu z možností ukládání elektrické energie, zejména v souvislosti s rostoucím využíváním obnovitelných zdrojů. Jejich důležitou součástí je iontově-výměnná membrána, která umožňuje selektivní transport iontů mezi elektrodovými prostory článku a současně omezuje nežádoucí přechod aktivních látek. Její vlastnosti tak významně ovlivňují účinnost, výkon a stabilitu baterie. Mezi důležité parametry těchto membrán patří iontově-výměnná kapacita (IEC z angl. Ion-exchange caapcity) a míra zbobtnání ve zvoleném prostředí. IEC vyjadřuje látkové množství iontově-výměnných skupin vztažené na jednotku hmotnosti suché membrány. Bobtnání se projevuje změnou rozměrů a hmotnosti membrány v důsledku absorpce kapaliny. Cílem práce je vyvinout reprodukovatelnou metodiku stanovování zmíněných parametrů a tu následně využít k systematické charakterizaci série vybraných komerčních kationtově-výměnných membrán a diskutovat zjištěné parametry s ohledem na chování membrán v laboratorním článku zinko-jodové průtočné baterie.

Počítačová simulace dezintegrace tablety

Bc. Adam Opravil (M2)

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, zejména plniv a dezintegrantů. Mezi částicemi při lisování vznikají interpartikulární vazby, které se po proniknutí vody a bobtnání dezintegrantu postupně porušují. Rychlost a mechanismus dezintegrace závisejí na složení tablety a procesních parametrech, například lisovací síle. Cílem této práce je rozvíjet výpočetní model, který umožní sledovat vznik fragmentů a vyhodnotit vliv jednotlivých parametrů na průběh rozpadu tablety. Výchozí dvourozměrný model používá metodu diskrétních elementů (DEM) a popisuje pohyb částic i jejich vzájemné vazby. Do simulace byly doplněny axiální a torzní síly a identifikace fragmentů podle velikosti a doby vzniku. Pomocí parametrických studií byl vyhodnocen vliv modulu pružnosti, kritické délky vazby, délky integračního kroku a podílu dezintegrantu. Model byl dále rozšířen o zpětnou deformaci podlouhlých částic dezintegrantu a o časově závislé bobtnání řízené difuzí do kulových částic. V další fázi bude možné rozšířit difuzi na nesymetrické případy a doplnit model do 3D.



Preparation of silica-based porous material and their characterization

Bc. Uliana Ovchinnikova (M2)

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

Enzymes offer selective routes to chemical synthesis, but maintaining their activity and enabling repeated use remain challenging for application. This work addresses these challenges through the development of hierarchically porous silica beads for lipase immobilization. Their macro-mesoporous architecture combines a high surface area for enzyme attachment with interconnected pathways for substrate and product transport, while tunable particle size and modifiable surface chemistry allow the support to be adapted to process requirements. The beads were prepared using a co-micelle emulsion-templating approach and characterized to relate synthesis conditions to their structural properties. Surface functionalization and enzyme loading were investigated to achieve efficient immobilization while preserving lipase activity during repeated use. By linking support design to catalytic performance and reusability, this study provides a foundation for developing recoverable biocatalysts with the potential to green sustainable polymer synthesis.

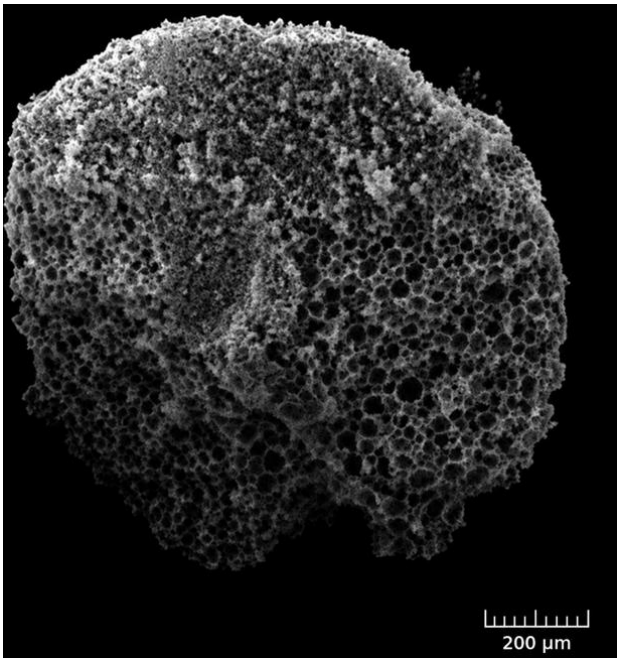


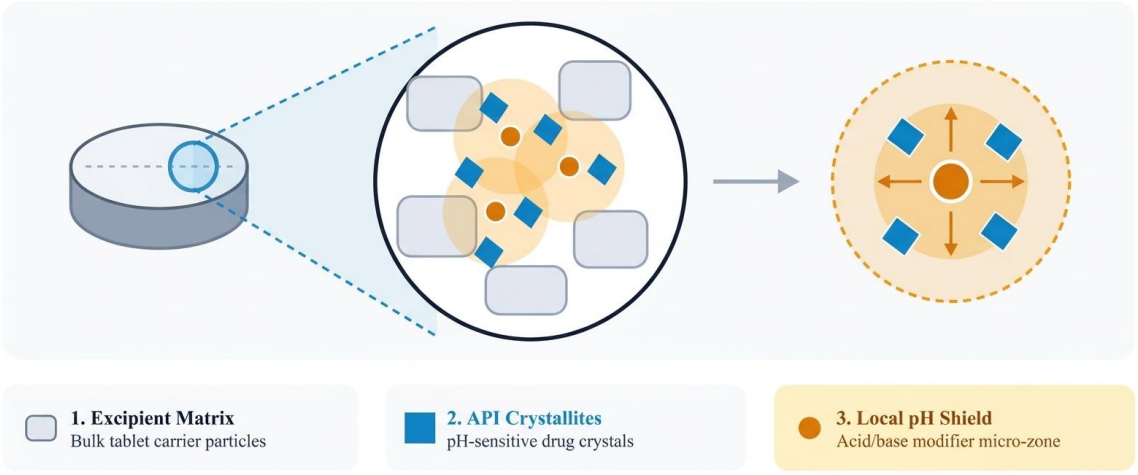
Figure 2: SEM image of macro-mesoporous silica bead

Functionalized Silica as Microenvironment Modifiers for Solid Dosage Forms

Zeynep Özturan (B3)

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

Rapid degradation of an active pharmaceutical ingredient (API) due to unfavorable pH or high humidity is a major formulation issue. To solve this, the microenvironment, which is the local pH zone right around the API crystals inside a tablet, can be modified. Modification can be done by adding acid or base particles. Due to large particle size and low surface area, direct addition of raw acid/base requires up to 35 wt% to sufficiently protect the API in the tablet, which is undesirable in a final formulation. Silica, with its small particles and large surface area, distributes the modifier more uniformly throughout the tablet, reducing the required amount to 5-9 wt%. In this study, silica was loaded with basic modifiers for Atorvastatin, and acidic modifiers for Ezetimibe. XRPD tests confirmed the loading was successful. After pressing the tablets, 14 day stress tests were run at 60 °C under both low and high humidity. Plain silica made the degradation worse, but the loaded silica successfully reduced it. Atorvastatin was best protected by Na_2CO_3 loaded silica, and Ezetimibe by 20% citric acid loaded silica. Ultimately, the aim of this work was to prove that building a custom microenvironment with functionalized silica protects fragile APIs and prolongs shelf life.



Vývoj inhalovatelných částic na bázi allicinu a vybraného antibiotika se synergickým antibakteriálním účinkem

Aneta Partlová (B3)

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

V současné době čelí medicína problému antimikrobiální rezistence, kdy řada antibiotik ztrácí účinnost a musí být vyřazována. Motivací je těmto léčivům navrátit původní sílu spojením s přírodními látkami, jako je thiosulfinát allicin. Allicin je látka z česneku, která výborně narušuje bakteriální biofilmy a zvyšuje propustnost buněčných membrán. Jeho synergický účinek s léčivy umožňuje snížit dávku antibiotika, a tím minimalizovat zátěž organismu a riziko vedlejších účinků. Na základě fyzikálně-chemických kritérií byl vybrán levofloxacin, jenž je schválený agenturou EMA pro inhalační podání. Hlavním cílem této práce je převést tyto účinné látky do formy suchého prášku pro inhalaci pomocí sprejového sušení. Úpravou podmínek sušení a složení dosáhneme ideální velikosti částic a zabráníme jejich nežádoucí aglomeraci. Tyto vlastnosti ovlivňují depozici v plících a jejich nedodržení by znemožnilo splnění kritérií Evropského lékopisu. Kvalita prášku bude ověřena elektronovou mikroskopií (SEM) a aerodynamické vlastnosti Andersenovým kaskádovým impaktorem. K prokázání synergie připravíme tři varianty vzorků: s antibiotikem, s prekurzory allicinu a společnou směs, jejichž porovnáním účinek potvrdíme. Výsledkem práce bude ověřený postup přípravy funkčního prášku a zhodnocení přínosu allicinu k léčbě plicních infekcí.

Investigation of Flow and Compaction Behaviour of Pharmaceutical Powder Mixtures

Bc. Niurka Gonçalves Patricio (M2)

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

The flow and compaction properties of pharmaceutical powders are essential for tablet manufacturing, influencing processing efficiency and product quality. Tablets contain Active Pharmaceutical Ingredients (APIs), which provide therapeutic effects, and excipients, which improve flowability and compressibility without directly contributing to therapeutic action. These properties depend on particle size, morphology, and mixture composition. However, excessive use of excipients may increase material consumption without additional benefits. To explore how excipient content can be optimised while maintaining tablet quality and reducing environmental impact, this study investigates the influence of mixture composition on the flow and compaction behaviour of pharmaceutical powders, using a model API and Lactose Supertab 14SD as an excipient. Powder mixtures containing different proportions of API and lactose were prepared. Flow properties were evaluated using the angle of repose method, while Scanning Electron Microscopy was used to examine particle morphology. Preliminary results showed variability in flow behaviour between formulations, highlighting the need for further investigation into how mixture composition and particle characteristics influence powder processing.

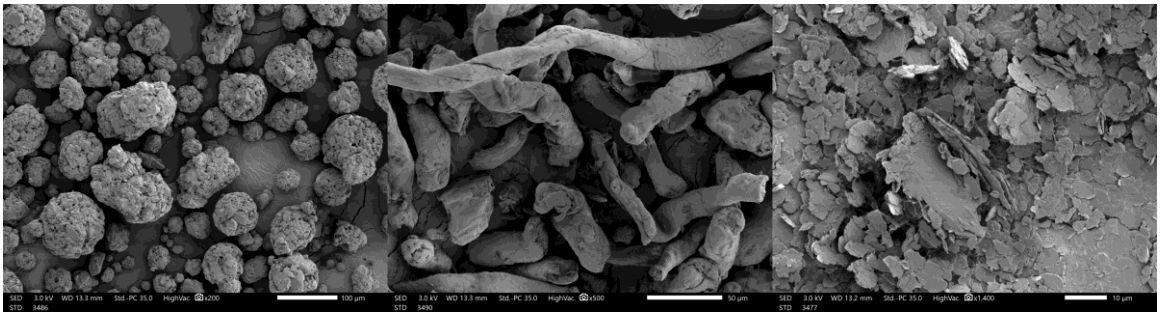


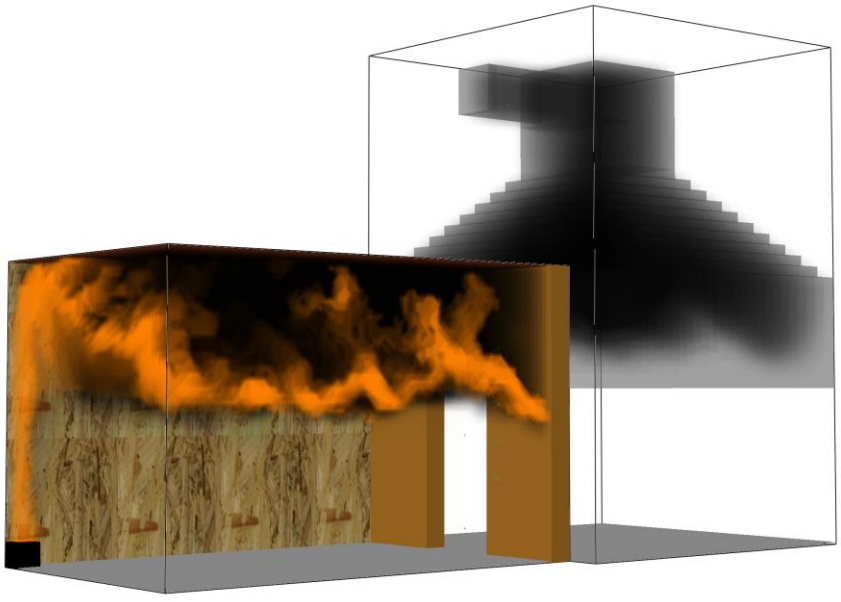
Figure 3 Different morphology and particle size of excipients.

Modelování požární zkoušky pomocí přístupu škálování pyrolýzy

Bc. Tomáš Pavlík (M1)

Školitel: Ing. Vojtěch Šálek, Ph.D.

Modelování šíření požárů má v oblasti požární ochrany stále větší význam. Čím dál častěji totiž nahrazuje experimentální zkoušky ve skutečném měřítku, které jsou finančně nákladné, environmentálně zatěžující a v některých případech technicky nerealizovatelné. Tato práce se zaměřuje na představení a otestování nového přístupu k modelování tepelného rozkladu založeného na principu škálování pyrolýzy (SPyro). Tento přístup rozšiřuje standardní definici hoření pevných látek pomocí jediné křivky rychlosti uvolňování tepla (HRR) o soubor HRR křivek odpovídajících různým tepelným zatížením. Díky tomu lze reagovat na měnící se tepelné podmínky v modelu při zachování snadno a efektivně získatelných vstupních dat pomocí metody kónické kalorimetrie. Hlavním cílem práce je představit teoretické principy přístupu SPyro a následně porovnat jeho predikce ve scénáři reálného požáru s výsledky modelů, u kterých byla tepelná degradace definována dosud běžně užívanými postupy.



Obr. 1: Vizualizace modelu požární komory v softwaru Smokeview.

Enkapsulace kurkuminových nanokrystalů do hydrogelů

Bc. Martina Pečivová (M1)

Školitel: Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.

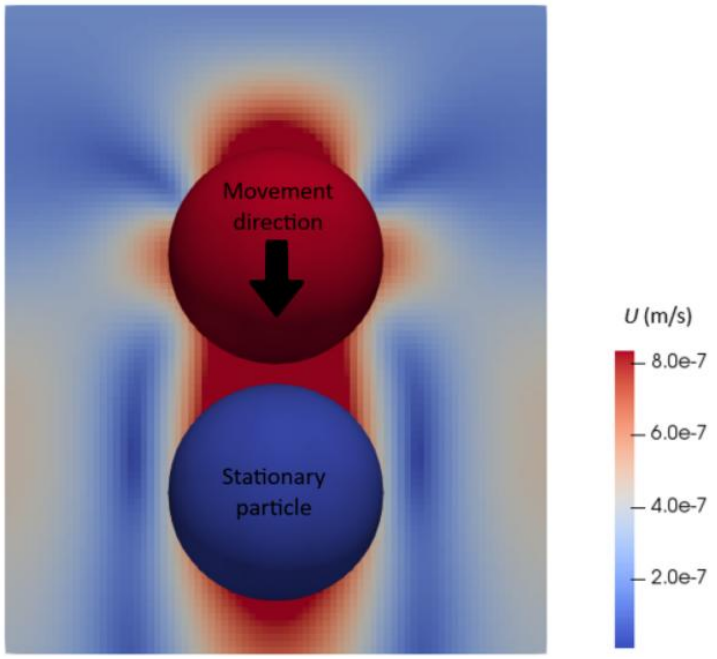
Hydrogely představují trojrozměrné zesíťované polymerní řetězce, které jsou schopné absorbovat velké množství vody či vodných roztoků. Tato zesíťovaná struktura vzniká především díky kovalentním vazbám, které hydrogelu propůjčují vysokou mechanickou pevnost, odolnost a dlouhodobou stabilitu. Tyto systémy jsou určené pro dlouhodobé a pozvolné uvolňování účinné látky, což lze využít pro udržování stabilní terapeutické hladiny léčiva v plazmě a minimalizaci nutnosti opakovaného dávkování. Jako účinná látka pro vložení do hydrogelu byl zvolen kurkumin. Kurkumin je špatně rozpustná lipofilní látka, ze které lze připravit stabilní nanokrystaly. Díky svým výrazným fluorescenčním vlastnostem je ideální pro přesné sledování chování a uvolňování nanočástic z hydrogelové matrice. Cílem této práce bylo navrhnout a charakterizovat depotní systém založený na modifikovaném želatinovém hydrogelu s enkapsulovanými nanokrystaly kurkuminu. Byly připraveny hydrogely o různé koncentraci želatiny, u nichž se ověřovala stabilita ve fyziologickém roztoku, roztoku kolagenázy a zkoumala se disoluce připravených hydrogelů v plazmě. Současně bylo analyzováno uvolňování kurkuminu metodou kalibrační přímky, kdy u prvního vzorku hydrogelu bylo díky jeho stabilitě uvolněno po týdnu pouze 1 % kurkuminu.

Mathematical modeling of particle interactions in microscopic suspension

Štěpán Peroutík (B3)

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

Microscopic suspensions are encountered in a wide range of industrial processes such as catalytic reactors or semiconductor manufacturing. Prediction of their properties is challenging due to the complexity of physical phenomena, yet it is essential for describing the macroscopic behavior of suspensions. The particles are primarily affected by viscous interactions with the liquid (drag force), gravitational and buoyancy forces, Brownian motion, and interparticle interactions described by the DLVO (Derjaguin–Landau–Verwey–Overbeek) theory. The core components of the DLVO theory are the van der Waals attraction and the electrical double-layer repulsion forces affecting particles with a surface charge. The presented model combines computational fluid dynamics (CFD) and the discrete element method (DEM) to calculate fluid flow and particles motion, respectively, including the relevant forces. The numerical solver is implemented in the OpenFOAM framework. Parametric simulation studies are performed to investigate the effects of key DLVO parameters such as the Hamaker constant and zeta potential. The model accurately predicts particle-fluid as well as particle-particle interactions.



Vliv stabilizátorů na strukturu a vlastnosti TiO_2 s vysokým obsahem defektů pro fotokatalytickou degradaci farmaceutických znečišťujících látek

Adam Richard Pešek (B3)

Školitel: Ing. Edith Mawunya Kutorglo, Ph.D.

Rozsáhlá spotřeba léčiv vede k jejich hromadění v životním prostředí, což má negativní dopady na ekosystémy i lidské zdraví. Konvenční čištění vody tyto znečišťující látky účinně neodstraní, a proto je zapotřebí pokročilých procesů. Fotokatalýza s využitím TiO_2 je slibným přístupem, její účinnost však závisí na vlastnostech materiálu. Tato studie zkoumá, jak typ stabilizátoru ovlivňuje vlastnosti TiO_2 s vysokým obsahem defektů pro rozklad těchto látek. Nanočástice TiO_2 byly syntetizovány za použití dodecylsíranu sodného (SDS), bromidu cetyltrimethylamonného (CTAB), polyvinylalkoholu (PVA) a Brij 93, dále byl připraven referenční vzorek bez stabilizátoru. Materiály byly hodnoceny na základě adsorpce propranololu před kalcinací a po ní. Počáteční experimenty ukázaly, že materiál připravený s CTAB vykazoval nejvyšší adsorpční kapacitu 47,20 mg/g a zajistil odstranění 92,55 % propranololu. Kalcinace snížila adsorpci oproti čerstvě připraveným vzorkům. Budoucí experimenty budou zkoumat fotokatalytickou degradaci propranololu na stejných materiálech, což umožní přímé srovnání. Tyto poznatky přispějí k vývoji účinnějších materiálů na bázi TiO_2 pro odstraňování farmaceutických znečišťujících látek z vody.

Vývoj lineárního dávkovacího systému pro přesné počítání zrnitých látek

Bc. Daniel Petrok (M1)

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

Populárním trendem v moderní farmakologii je takzvaná personalizovaná medicína, tedy snaha připravit pro pacienta medicínu na míru dle jeho specifických potřeb určených lékařem. Tato snaha personalizaci ale naráží na limitace fixních kombinací léčiv. Ty není ekonomické vyrábět ve všech kombinacích kvůli limitacím v minimální velikosti šarží. Tento problém lze řešit úpravou stroje pro plnění kapslí. Mnou navrhovaná koncepce je založena na pohybu řady otevřených kapslí pod řadou dávkovačů, které do kapslí dávkují léčivo ve formě minitabletek. Jelikož každý z dávkovačů je ovládán nezávisle na ostatních a dávkuje jiné léčivo, je možné obsah kapslí libovolně měnit. Dále je možné také modulárně přidávat další řady kapslí a dávkovačů vedle sebe a tím navýšit propustnost. Cílem mého současného výzkumu je vyvinout přesný dávkovač, který by umožnil tuto koncepci realizovat. V dříve provedeném výzkumu jsem sestavil prototyp mechanického kolového dávkovače a dokázal, že je možné tímto dávkovačem při nižších rychlostech přesně dávkovat léčivo. V současnosti se zaměřuji na možnosti jak zvýšit rychlost dávkování a dále zlepšovat vlastnosti dávkovače.

Scale-up a optimalizace výroby glukanových částic

Bc. Jan Pchálek (M2)

Školitel: Ing. Vojtěch Klimša, Ph.D.

Kvasinky nejsou jen tradiční surovinou pro výrobu piva či pečiva, ale jejich buněčné stěny jsou i bohatým zdrojem β-glukanů. Z kvasinek lze izolovat duté a porézní β-glukanové částice s vysokým potenciálem ve farmacii. Stimulují imunitu, umožňují cílené doručování léčiv a zvyšují biodostupnost špatně rozpustných léčiv. Jejich využití však brání zdlouhavá příprava v otevřeném laboratorním systému s nízkou kapacitou. Proces zahrnuje opakované extrakce a promývací kroky, přičemž každý krok navíc brzdí časově náročná centrifugace. Tato práce proto transformuje přípravu do uzavřeného vyhřívaného reaktoru s integrovanou tlakovou koláčovou filtrací. Ten slučuje reakční i separační kroky do jediného zařízení. Kvůli agresivnímu prostředí a malým rozměrům částic byla otestována řada filtračních přepážek a typů míchadel. Nejlépe se osvědčil PTFE filtr. Sestavený reaktor umožňuje sedminásobný *scale-up* výroby a kontrolní šarže ze 150 g kvasinek poskytla 11,72 g glukanových částic (množství srovnatelné s původním laboratorním procesem). Shoda produktu s laboratorní výrobou byla potvrzena pomocí FTIR měření. Optimalizace nyní cílí na snížení počtu kroků i spotřeby rozpouštědel a naváže automatizace s *online* analýzou filtrátu.

Fotokatalytická oxidace ve dvoufázovém Taylorově toku v mikrofluidním čipu

Bc. Adam Plšek (M1)

Školitel: Ing. Anna Vanluchene, Ph.D.

Tradiční oxidace vyžadují ekologicky zatěžující stechiometrická činidla (např. sloučeniny Cr(VI) či manganistany). Udržitelnou alternativou je fotokatalytická oxidace přeměňující vzdušný kyslík na vysoce reaktivní, a přitom selektivní singletový kyslík $^1O_2$. Ten umožňuje oxidační reakce jako [4+2] cykloadice na dieny či ene reakce, využívané v syntéze farmaceutik (např. antimalarika artemisininu). Vsádkové fotoreaktory však omezuje pomalý přenos hmoty kyslíku z plynné fáze do kapaliny a omezený průnik světla. Tyto limity překonává kontinuální mikrofluidní reaktor s dvoufázovým Taylorovým tokem (plyn–kapalina), který intenzifikuje mezifázový přenos hmoty, promíchávání i homogenní ozáření směsi. Taylorův tok byl studován v PDMS čipu vyrobeném fotolitografií (SU-8) a měkkou litografií s hydrofilní úpravou povrchu (PVA). V systému vzduch–ethanol bylo dosaženo stabilního toku s řízenou velikostí bublin. Při fotokatalytické oxidaci s ftalocyaninem jako fotokatalyzátorem byl Rhodamin B (RhB) nahrazen 9,10-dimethylanthracenem (DMA), který s $^1O_2$ reaguje selektivně a výrazně lépe (konverze DMA 90,5 % oproti 3,1 % u RhB). Současný výzkum se zaměřuje na stabilizaci Taylorova toku reakční směsi v čipu a navazující kinetická měření za různých hydrodynamických podmínek, doplněná o CFD model.

Návrh experimentálního uspořádání pro vysokokapacitní screening fotokatalytických reakcí

Bc. Jiří Polách (M1)

Školitel: Ing. Anna Vanluchene, Ph.D.

Fotokatalýza představuje zajímavý přístup k chemickým reakcím, protože umožňuje provádět některé reakce za mírnějších podmínek a nabízí nové možnosti jejich využití například ve farmaceutickém průmyslu. Pro rychlejší výzkum fotokatalytických reakcí lze využít vysokokapacitní experimentální zařízení založená na průtočných reaktorech. Účinnost těchto reakcí však nezávisí pouze na vlastnostech použitého katalyzátoru, ale také na často opomíjených reaktorových a procesních faktorech, jako jsou konstrukce reaktoru, proudění kapaliny, promíchávání a osvětlení. Jednou z možností, jak zlepšit průběh reakcí, je využití dvoufázového toku plyn–kapalina. Při tomto způsobu proudění se v kanálku střídají úseky plynu a kapaliny, což může zlepšovat promíchávání a přenos látek ke katalyzátoru. Tato práce se zaměřuje na počítačové modelování dvoufázového proudění v kanálcích průtočného fotoreaktoru. Cílem je pomocí simulací zjistit, jak rozměry a tvar kanálku spolu s průtoky plynu a kapaliny ovlivňují charakter proudění, vznik a velikost jednotlivých segmentů, promíchávání kapaliny a tlakovou ztrátu. Získané výsledky pomohou lépe pochopit proudění uvnitř reaktoru a poslouží jako podklad pro návrh vhodné geometrie a provozních podmínek experimentálního zařízení.

Thermodynamic analysis of a transcritical CO_2 cycle for heat pumps

Tomáš David Pranda (B3, Slovenská technická univerzita v Bratislave)

Školitel: doc. Ing. Miroslav Variny, Ph.D.

Many older industrial processes still rely on fossil fuels for producing industrial heat, resulting in far lower thermodynamic efficiency compared to heat pumps using electricity to upgrade low-temperature waste heat into useful process heat. Industrial processes are transitioning away from older refrigerants and moving towards using natural refrigerants including CO_2, offering a low global warming potential and ozone-depleting potential of zero. The upcoming research will focus on a parametric sensitivity study tailored to district heating applications. The analysis will include an investigation on the impact of district heating return water temperatures. Furthermore, we will quantify how evaporation temperature affects heating coefficient of performance and use the results to map the optimum gas cooler pressure. A preliminary techno-economic assessment will be conducted using standard cost-engineering methodology to determine the simple payback period. Further cycle modifications, such as the inclusion of an internal heat exchanger, may be considered to evaluate potential throttling loss mitigation, based on the results of the baseline configuration.

Vývoj depotního systému mikročástic pro řízené uvolňování peptidového léčiva

Bc. Matěj Řeháček (M1)

Školitel: Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.

Práce pojednává o vývoji depotního systému mikročástic pro peptidové léčivo. Taková léčiva jsou v organismu často rychle eliminována (mají krátký biologický poločas), a proto musí být často podávána. Z tohoto důvodu jsou vytvářeny depotní systémy, ze kterých se účinná látka uvolňuje po dobu několika týdnů až měsíců a výrazně se sníží frekvence dávkování. Cílem práce je připravit biodegradabilní mikročástice z kopolymeru kyseliny mléčné a glykolové – PLGA, do kterých se inkorporuje peptid. Léčivo se následně řízeně uvolňuje v závislosti na složení polymerní matrice. Poměrem jednotlivých monomerních jednotek polymeru, molekulovou hmotností nebo koncovými skupinami řetězců lze ovlivnit rychlost degradace částice a tím pádem rychlost uvolnění peptidu. Částice jsou připravovány metodou dvojité emulze ($W_1/O/W_2$), kdy se vodný roztok s peptidem emulguje do organické fáze s polymerem a následně disperguje ve vnější vodné fázi se stabilizátorem. Po odpaření organického rozpouštědla vznikají částice a léčivo zůstává uzavřeno uvnitř. Sledován bude *in vitro* průběh uvolňování peptidového léčiva z mikročástic. Výsledkem by měl být šetrný postup přípravy, který zachová stabilitu peptidu a umožní nastavit profil uvolňování bez zásahu do jeho struktury.

Vývoj a optimalizácia dutovláknového membránového kryštalizátora

Bc. Andrea Rothová (M2, Slovenská technická univerzita v Bratislave)

Školitel: Ing. Ivan Červeňanský, Ph.D.

Táto práca sa zaoberá vývojom a testovaním dutovláknového membránového kryštalizačného modulu s cieľom separácie horčíka zo soľanky. Princíp procesu spočíva v transporte hydroxidových iónov cez aniónovýmenné membrány a ich následnej reakcii s horečnatými iónmi, pričom na povrchu membrán vznikajú kryštály $Mg(OH)_2$. V rámci výskumu bolo skonštruovaných viacero modulov, ktorých etáže boli vyrobené 3D tlačou. Na tieto etáže boli následne natavené dutovláknové aniónvýmenné membrány. Pri experimentoch bol celý membránový modul ponorený v roztoku $MgCl_2$ s koncentráciou 0,1 mol/L pričom vo vnútri vlákien cirkuloval roztok NaOH s koncentráciou 0,5 mol/L. Experimenty boli vykonané pri prietokoch 80 mL/min a 120 mL/min na moduloch s dvoma a štyrmi etážami. Počas celého priebehu experimentov sa zaznamenávala hodnota pH, počas prvých 2 hodín sa zaznamenávala hodnota vodivosti a v polhodinových intervaloch sa odoberali vzorky na stanovenie koncentrácie horčíka. Výskum sa bude ďalej zaoberať možnosťou priebežného odstraňovania kryštálov z povrchu vlákien s cieľom zabezpečiť kontinuálnu prevádzku zariadenia.



Obr. 1. Štvoretážový dutovláknový membránový kryštalizačný modul.

Příprava elektrochromatografické jednotky s ložem částic pro kontinuální dělení chemických látek

Adam Rychnovský (B3)

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

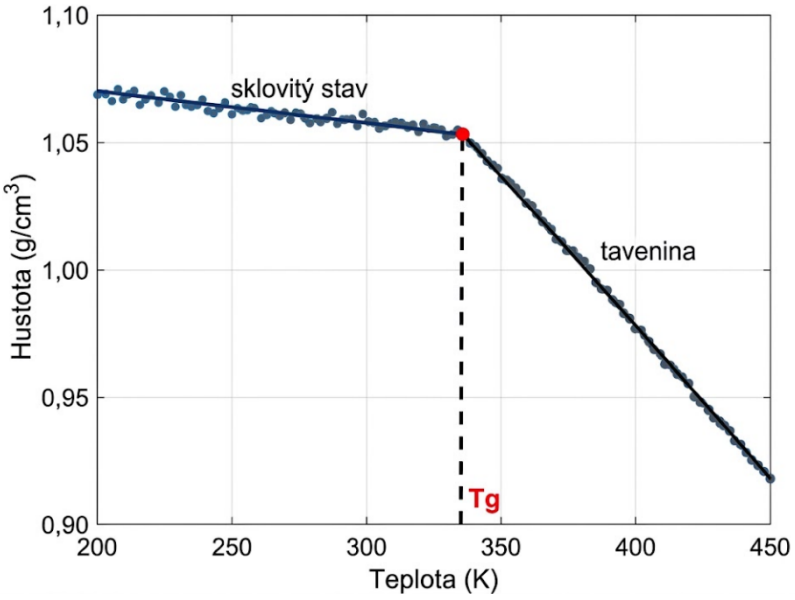
Separace enantiomerů je náročný proces, protože jejich fyzikálně-chemické vlastnosti jsou v achirálním prostředí identické. Pokud je možno připravit látku, chirální selektor, která jeden z enantiomerů váže přednostně, je separace enantiomerů realizovatelná. Separaci v přítomnosti chirálního selektoru lze provést různými způsoby v různě konstruovaných zařízeních. Při separaci enantiomerů lze například využít elektrického pole působícího ve směru kolmém k toku roztoku racemátu v loži s částicemi stacionární fáze, ve které je zakotven chirální selektor. Výroba elektrochromatografického zařízení pracujícího na uvedeném principu vyžaduje řešení široké skupiny inženýrských problémů, jako jsou například vysoká mechanická odolnost zařízení spojená s těsností zařízení nebo způsob plnění elektrochromatografické jednotky mikročásticemi stacionární fáze. Cílem předložené práce je tedy překonání těchto specifických problémů, a zejména nalezení vhodné konstrukce elektrochromatografické jednotky.

Modelování vitrifikace směsi polystyrenu s nadouvadlem pomocí molekulární dynamiky

Daniel Šafránek (B2)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Cílem práce je modelování teploty skelného přechodu (T_g) systému polystyren-pentan a sledování její závislosti na rostoucí koncentraci pentanu. Skelný přechod se projevuje podobně jako fázový přechod II. typu, při němž se výrazně mění mechanické vlastnosti daného materiálu. Nad teplotou skelného přechodu je polymer výrazně tvárnější a chová se téměř jako tavenina, kdežto pod T_g je tvrdší a křehčí, tudíž připomíná spíše sklo. Při výrobě polymerních pěn, v tomto případě expandovaného polystyrenu, je jako nadouvadlo používán nejčastěji právě pentan, který ovšem zároveň slouží jako změkčovadlo - hodnotu T_g celého systému tedy znatelně snižuje. Pochopení závislosti T_g na koncentraci pentanu je z průmyslového hlediska klíčové pro optimalizaci výrobního procesu. Na modelování celého procesu byla využita molekulární dynamika. Topologie systému a silové pole OPLS byly vygenerovány programem EMC (Enhanced Monte Carlo). V budoucnu bude výpočet rozšířen o modelování difúze, pohyblivosti polystyrenu a pentanu a budou uvažována také alternativní nadouvadla.



Obrázek: Schéma teploty skelného přechodu v systému polystyren-pentan.

Elektrochemické generování H_2O_2 na elektrodách z grafitové plsti a překážky s tím spojené

Bc. Antonín Saifrt (M2)

Školitel: Ing. Jan Haidl, Ph.D.

Lidskou činností se do vody dostávají pro přírodu toxické látky (např. zbytky léků), které jsou tradičně používanými procesy v čistírnách odpadních vod odstranitelné pouze částečně. K odstranění těchto látek je třeba využít metod kvarterního čištění, které bude nezbytné od roku 2033 postupně implementovat kvůli legislativě EU. Potenciálně velmi efektivní metodou kvarterního čištění je oxidace s využitím peroxidu vodíku. Ten je v procesu rozkládán např. pomocí UV záření za vzniku hydroxylových radikálů – silného oxidačního činidla. Aktuálně je použití H_2O_2 limitováno nebezpečností koncentrovaných roztoků a s tím spojenými vysokými náklady na přepravu a skladování. Řešením by bylo elektrochemické generování H_2O_2, protože by mohl být peroxid vyráběn lokálně v potřebných koncentracích, a navíc okamžitě spotřebován. Z literatury vyplývá, že peroxid je možné generovat s vysokou efektivitou, a to v relativně vysokých koncentracích. Cílem této práce bylo ověření možností kontinuálního generování H_2O_2 na elektrodách z grafitové plsti. Ukazuje se ale, že výsledky publikované v literatuře se výrazně liší od praxe, a to v proudové efektivitě i v koncentraci vygenerovaného peroxidu. Navíc se tyto sledované veličiny v průběhu jednotlivých experimentů výrazně mění, a to značně nepředvídatelně.

Glukanové částice coby nosič nukleových kyselin

Bc. Barbora Šašková (M2)

Školitel: Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D.

Nukleové kyseliny (NK) umožňují cíleně ovlivňovat biologické procesy, jejich využití však omezuje nízká stabilita a obtížné doručování do buněk. Zajímavé nosiče NK představují β-glukanové částice (GPs), které jsou rozpoznávány a pohlcovány fagocytujícími buňkami imunitního systému organismů. Jejich využití se zkoumá mimo jiné i v oblasti orální vakcinace. Porézní struktura GPs však způsobuje předčasný únik nukleových kyselin. Cílem práce bylo proto navrhnout a ověřit nosič spojující potenciál GPs se schopností zadržovat a uvolňovat NK se zachováním jejich biologické funkčnosti. Navrhli jsme koncept lipid-glukanových kompozitů nesoucích NK (LGPs–NK). U připravených kompozitů jsme experimentálně ověřili inkorporaci lipidů a NK do GPs i pomalejší uvolňování modelové DNA i dsRNA oproti samotným GPs. Navíc jsme byli díky řízenému zmrazení a lyofylizaci schopni získat suchou a redispergovatelnou formu kompozitů. Pro první biologické ověření funkčnosti jsme místo savců zvolili octomilku (*Drosophila melanogaster*). Jedná se jednodušší modelový organismu, u nějž již bylo doručování pomocí GPs do imunitních buněk prokázáno. Imunitní ochrana octomilek při infekci virem byla prokazatelně posílena "vakcinací" pomocí LGPs–NK s fragmentem virální NK. V současnosti zkoumáme možnost použít LGPs–NK pro antivirovou ochranu včel před např. virem deformovaných křídel (DWV).

Stanoveni hodnot k_Ga na strukturované výplni MellapakPlus 452. Y a MellapakPlus 350. Y v absorpční koloně za sníženého povrchového napětí

Bc. Nastassia Shautsova (M2)

Školitel: Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.

V chemickém průmyslu patří absorpce mezi nejdůležitější separační operace. Při návrhu absorpčních zařízení se 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 potřebné parametry experimentálně určit u všech, a proto se využívají modely, které je předpovídají. Při aplikaci na systémy odlišné od těch, na nichž byly ověřeny, však tyto modely často selhávají. Pro jejich zpřesnění je nutné vyhodnotit objemový koeficient přestupu hmoty v plynné fázi k_Ga na více různých systémech a za různých podmínek. Tato práce se zaměřuje na studium vztahu mezi k_Ga a difúzním koeficientem. Měření probíhalo na strukturované výplni Mellapak 452. Y a Mellapak 350. Y pro systémy NH_3-vzduch/H_2SO_4-voda a SO_2-vzduch/NaOH-voda v kolonách o průměru 300 mm a 295 mm, a to za sníženého povrchového napětí. Získané hodnoty k_Ga byly porovnány s výsledky dřívějších měření stejných systémů za běžného povrchového napětí. Cílem práce bylo zjistit, jak snížení povrchového napětí ovlivní závislosti k_Ga na průtocích plynné a kapalné fáze.

Optimalizace softwaru pro vyhodnocení destilačních dat

Bc. Tereza Šolarová (M1)

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

Práce se zabývá zefektivněním numerického výpočtu jednorozměrného konvekčně-difuzního modelu spojitého lože destilační kolony, který vede k vyhodnocení koeficientů přestupu hmoty v obou fázích a Bodensteinova čísla v kapalné fázi. Tyto parametry se určují jejich optimalizací vedoucí k nejlepšímu souhlasu profilů složení fází podél lože destilační kolony vypočtených modelem s experimentálními daty. Model tvoří obyčejná diferenciální rovnice druhého řádu s okrajovými podmínkami, jejíž pravá strana je explicitně nevyjádřitelnou funkcí řešení a sama o sobě musí být řešena numericky. Diferenciální rovnice je řešena převedením na soustavu rovnic pomocí diferenčních náhrad derivací v uzlových bodech. Jádrem této práce je nahrazení procedury řešící tuto soustavu Gaussovou eliminací rychlejší procedurou založenou na Newtonově metodě. Procedura využívá externě vypočtené parciální derivace pravé strany podle složení nejen v uzlovém bodě, ale i v jeho sousedství, a tím se do Jacobiho matice promítá fyzikální vazba mezi sousedními uzly. Hodnota toku přes fázové rozhraní je nově počítána metodou sečen místo původně použité metody prosté iterace. Pomocí nových numerických postupů se podařilo snížit celkový počet iterací, a tím i výpočetní čas, z několika hodin na desítky minut, a to bez ztráty přesnosti a při zachování konvergence při hodnotách parametrů odpovídajících hraničním fyzikálním stavům.

Charakterizace chování polymerní taveniny při kontinuální výrobě filmu

Bc. Marek Štěpánek (M1)

Školitel: Ing. Dan Trunov, Ph.D.

Orodispergovatelné filmy (ODF) představují inovativní způsob podání léčiv ve formě tenkých polymerových plátků o tloušťce desítek až stovek mikrometrů. Vhodné složení a výsledné rozměry filmu umožňují jeho rychlý rozpad v ústní dutině a snadné následné polykání, k čemuž významně přispívá vysoký specifický povrch zajišťující rozsáhlý kontakt se slinami. Díky těmto vlastnostem mohou ODF představovat vhodnou alternativu zejména pro seniory a malé děti, kteří mohou mít potíže s polykáním běžných lékových forem. ODF lze vyrábět vsádkovými i kontinuálními postupy. Jednou z metod kontinuální výroby je taveninová extruze (HME), jejíž významnou výhodou je možnost nepřetržité produkce velkého množství dávkových jednotek. Výzvou však zůstává volba a optimalizace výrobních parametrů, pro jejichž stanovení nejsou dosud k dispozici obecně použitelné postupy. Cílem tohoto projektu je optimalizace výrobních parametrů HME na základě poznatků získaných taveninovou reologií. Ta umožňuje charakterizovat reologické vlastnosti materiálů, zejména jejich viskoelastické chování při tavení. Získané poznatky budou spolu s vybranými charakteristikami extruderu využity k popisu výrobního procesu pomocí bezrozměrných kritérií, která by měla umožnit predikci optimálních podmínek extruze.

Štúdium redoxne mediovanej reakcie vývoja kyslíka pre zinkovo-kyslíkovú prietokovú batériu

Bc. Michal Števuliak (M2)

Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

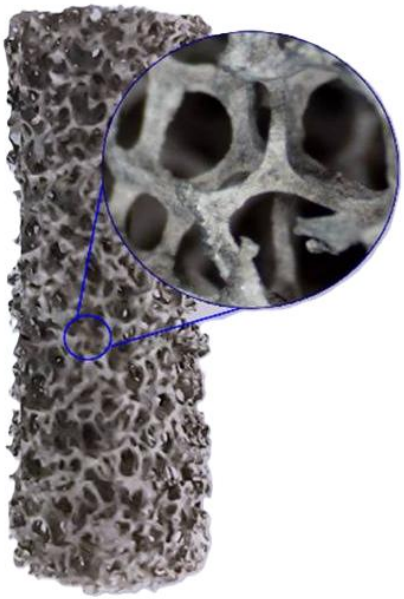
S narastajúcim podielom výroby elektrickej energie z obnoviteľných zdrojov, ktorých dodávky sú premenlivé, rastie dopyt po vysokokapacitných úložiskách energie. Redoxné prietokové batérie (RPB) predstavujú potenciálne riešenie tohto problému vďaka jednoduchej škálovateľnosti a potenciálne dlhej životnosti v porovnaní so súčasne využívanými vysokokapacitnými akumulátormi. Komerčne overenú vanádiovú RPB však limituje vyššia cena a toxicita elektrolytu, čo motivuje vývoj lacnejších a bezpečnejších alternatív. V tomto príspevku je navrhnutý a testovaný koncept hybridnej prietokovej batérie (HPB) na báze zinku a kyslíka s dvojzložkovým kladným elektrolytom, ktorý umožňuje redoxne mediované reakcie vývoja a redukcie kyslíka. Tento prístup by mohol znížiť energetickú náročnosť procesov, a tým zvýšiť účinnosť technológie v porovnaní so štandardným usporiadaním batérie s priamym vývojom a redukciou kyslíka na kladnej elektróde. Táto práca zahŕňa možnosť vývoja kyslíka pomocou mediátora hexakyanoželezitanového komplexu na katalytickom lôžku. Boli skúmané vplyvy zloženia elektrolytu a prevádzkových podmienok s využitím vybraných katalyzátorov na báze uhlíku a niklu na reakčnú rýchlosť redukcie mediátora.

Měření reologických vlastností suspenzí γ-Al_2O_3 pro nanášení na strukturované nosiče

Ondřej Štoček (B3)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Strukturované katalyzátory představují klíčové řešení pro průmyslové aplikace vyžadující zpracování vysokých objemových průtoků reakčních směsí. Jejich zásadní výhodou oproti klasickým sypaným ložím je minimální tlaková ztráta při zachování intenzivního přenosu hmoty a tepla. Hlavním krokem jejich přípravy je nanášení katalytické vrstvy na stěny substrátu ve formě suspenze. Dosažení rovnoměrné tloušťky vrstvy a mechanické stability je přímo podmíněno reologickými vlastnostmi suspenze. Tato práce se věnuje charakterizaci mikroskopických suspenzí γ-Al_2O_3 určených pro nanášení na voštinové monolity či pevné pěny. V rámci experimentální části byla nejprve změřena mlecí křivka a analyzována závislost distribuce velikosti částic katalyzátoru na době mletí. Dalším zásadním krokem bylo ověření přesnosti a opakovatelnosti měření na rotačním reometru pomocí kalibračních standardů. Důležitou vlastností suspenze γ-Al_2O_3 ovlivňující viskozitu je také závislost elektrokinetického potenciálu na pH. Pro experiment byly zvoleny dvě odlišné velikosti částic, u kterých byl identifikován izoelektrický bod. Získaná data poskytují základ pro racionální a dobře definované úpravy viskozity a stability suspenze, které jsou klíčové pro dosažení definované tloušťky a rovnoměrného nanesení aktivní vrstvy.



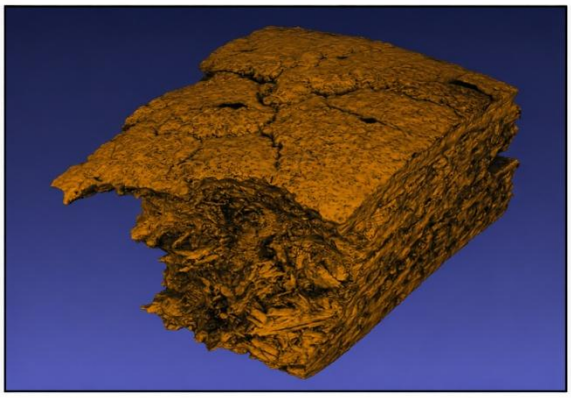
Měření objemové hustoty zuhelnatělých zbytků pomocí fotogrammetrie

Bc. Jan Svoboda (M1)

Školitel: Ing. Vojtěch Šálek, Ph.D.

Pro předpovídání šíření požárů se stále častěji uplatňuje matematické modelování požárů, které umožňuje simulovat průběh tepelného rozkladu materiálů a tím i rozvoj požáru za různých podmínek. Přesnost těchto modelů je však závislá na kvalitě vstupních materiálových parametrů získaných experimentálním měřením. Mezi nejdůležitější vstupní parametry materiálů patří objemová hustota, tepelná vodivost a měrná tepelná kapacita, které významně ovlivňují přenos tepla v materiálu a průběh jeho tepelného rozkladu, z tohoto důvodu je cílem práce stanovit v literatuře nedostupnou objemovou hustotu zuhelnatělých zbytků jako vstupní parametr pro matematické modelování požárů. Zuhelnatělé zbytky nevyhnutelně vznikají při tepelném rozkladu dřeva a díky svým izolačním vlastnostem významně ovlivňují jeho průběh. Součástí práce je také optimalizace fotogrammetrické aparatury, která umožní přesnější rekonstrukci malých a křehkých zuhelnatělých zbytků.



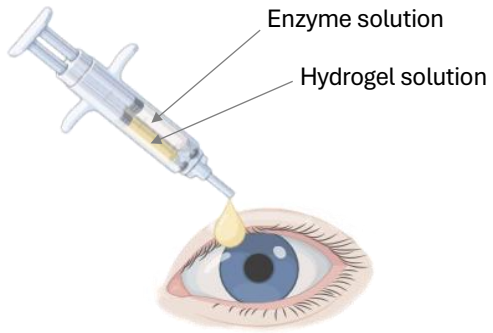


Controlled drug release from hydrogels based on in situ crosslinked natural polymers

Bc. Barbora Švomová (M1)

Supervisor: Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.

Hydrogels are polymer networks with the ability to hold large amounts of water. Due to their high biocompatibility and biodegradability, hydrogels are used as depot systems for sustained drug release. This project aims to formulate an alginate hydrogel for controlled local drug delivery with a focus on ocular applications, with curcumin as the model compound. Alginate, which is a polymer that forms strong interactions with the mucus on the human eye, was first modified with tyramine to enable enzymatic crosslinking. A double-syringe system was then utilised to mix the tyramine-alginate with horseradish peroxidase enzyme and H_2O_2, successfully forming a hydrogel *in situ*. Alternatively, enzymatic crosslinking using transglutaminase was tested, however, no gelation occurred. The stability of the prepared hydrogels (c = 2 & 4% w/v) was evaluated in phosphate buffer saline and rat plasma, showing good stability within the first 24 hours. To overcome the poor water solubility of curcumin and facilitate its uptake into the human eye, liposomes carrying curcumin were prepared and evaluated for size distribution. Finally, these liposomes were encapsulated in the alginate hydrogel and observed using confocal microscopy.



In situ crosslinking

Návrh a výroba mikrofluidního čipu s integrovanými míchacími strukturami pro heterogenní fotokatalýzu

Vojtěch Urban (B3)

Školitel: Ing. Anna Vanluchene, Ph.D.

Heterogenní fotokatalýza využívá světelnou energii absorbovanou pevným fotokatalyzátorem k iniciaci oxidačně-redukčních reakcí na jeho povrchu, které vedou k degradaci látek rozpuštěných v kapalné fázi. Průtočné mikrofluidní čipy umožňují dobrý průnik světla ke katalyzátoru a přesné řízení průtoku i doby zdržení kapaliny. Při laminárním proudění může být transport rozpuštěných látek k povrchu imobilizovaného fotokatalyzátoru omezený. Tato práce se zaměřuje na návrh a výrobu mikrofluidního čipu s integrovanými pasivními míchacími strukturami typu rybí kost (herringbone). Jako fotokatalyzátor je použit poly(heptazinimid) draselný (K-PHI). Úkolem míchacích struktur je podpořit příčné proudění kapaliny, a tím zlepšit transport látek k imobilizované vrstvě K-PHI. Geometrie mikrokanálu byla navržena v programu AutoCAD a forma následně vytvořena dvouvrstvou fotolitografií s fotorezistem SU-8, ze které byl metodou měkké litografie odlit čip z PDMS. Funkčnost byla ověřena fotokatalytickou degradací Rhodaminu B, modelového organického barviva, při ozařování viditelným světlem. Účinnost čipu s mísiči bude porovnána s účinností referenčního čipu bez míchacích struktur. Cílem je posoudit vliv pasivního míchání na účinnost fotokatalytické degradace.

Possibilities of Separating Silica from Saturated Solutions Using Electrodialysis

Bc. Matěj Valta (M2)

Supervisor: Ing. Libor Šeda, Ph.D.

This work investigates the possibilities of separating silica from saturated solutions using electrodialysis (ED). The main motivation is the problem of silica scaling in concentrates from water treatment processes, especially after reverse osmosis, which reduces overall efficiency and increases operating costs. The experimental part was performed on a laboratory ED unit with RALEX membranes. Two model solutions were tested: a simple salt solution and a complex solution with the addition of Ca^{2+} and Mg^{2+}. The results showed that reducing the diluate conductivity to 1–2 mS/cm removed approximately 90% of the main salts, but a significant amount of silica still remained in the liquid phase. Significant silica separation directly by ED requires deep desalination, with the process becoming highly effective only when the conductivity drops below 0.4 mS/cm. The apparent silica losses in the mass balance were likely caused by delayed precipitation in the sample bottles due to slow kinetics, as no scaling was observed on the membranes after 16 tests. The ED process also successfully concentrated Ca^{2+} and Mg^{2+}. Increasing the pH of this concentrate to ~12 triggered a strong precipitation, which effectively removed the remaining silica. For industrial applications, it is therefore most suitable to use ED as a step for concentrating ions before subsequent co-precipitation.

Study of Trazodone Synthesis under Continuous-Flow Conditions

Lukáš Váňa (B3)

Supervisor: Ing. Anna Vanluchene, Ph.D.

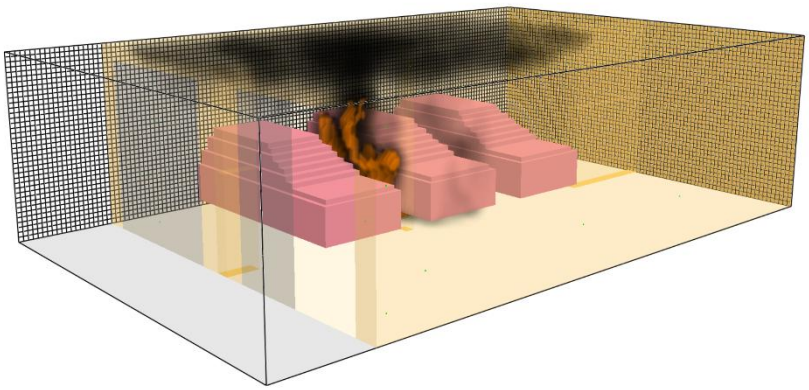
Trazodone is a triazolopyridine derivative developed in the 1960s as an antidepressant; today, however, it is also used at lower doses to treat insomnia and anxiety. Like most active pharmaceutical ingredients, it has traditionally been manufactured in batch reactors. Since current batch synthesis is constrained by long reaction times, continuous-flow synthesis has been studied to resolve this issue and improve scalability. The main objective of this work was to investigate the kinetics of the N-alkylation reaction, which represents the final step of trazodone synthesis. The reaction was conducted in a biphasic system using a continuous-flow capillary reactor and phase-transfer catalysis. The influence of temperature and residence time on reaction conversion was assessed. The samples were analyzed using HPLC. In future work, the experimental data will be used to develop and evaluate a kinetic model describing the final N-alkylation step, which could serve as a basis for optimizing reaction conditions for industrial applications.

Modelování požáru elektromobilu v garážovém prostoru a parametrická analýza paliv

Bc. Ondřej Vaněček (M2)

Školitel: Ing. Vojtěch Šálek, Ph.D.

Požáry elektromobilů (EV) v uzavřených prostorech představují velké bezpečnostní riziko. K predikci jejich chování se využívá pokročilých modelů založených na výpočetní dynamice tekutin (CFD), jejichž přesnost kriticky závisí na správné definici vstupních fyzikálně-chemických parametrů. Tato práce se zaměřuje na vytvoření fyzikálně věrohodného a robustního modelu požáru EV v garážovém prostoru pomocí specializovaného požárního řešiče FDS (Fire Dynamics Simulator). Důraz je kladen na detailní zpracování geometrie vozidel a vystižení šíření požáru rozdělením vozu na sekce s definovanými tepelnými podmínkami pro iniciaci a vznícení. Dále je analyzována problematika nedostatku kyslíku a s tím spojené chování požáru při omezeném přívodu vzduchu. Tímto přístupem je dosaženo vysoké shody simulace s experimentálními daty. Na tento fyzikální základ navazuje parametrická studie vlivu reprezentativních paliv. Vzhledem k materiálové složitosti EV je analyzováno, jak volba souhrnného chemického vzorce, výtěžku sazí a spalného tepla mění dynamiku simulace. Studie porovnává optimalizované „best-fit“ modely s přístupy zaměřenými primárně na plasty a specifické bateriové plyny. Cílem je poskytnout komplexní srovnání vhodnosti volby paliva pro konkrétní cíle požárně-inženýrských studií.



Sprevádzkovanie vsádzkovej konvekčnej sušiarne pre potreby laboratórneho cvičenia z chemického inžinierstva.

Bc. Mark Vashchenchuk (M1)

Školitel: Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.

Sušenie predstavuje dôležitý proces v mnohých odvetviach chemického a potravinárskeho priemyslu. S cieľom zlepšiť prehľad študentov bakalárskeho štúdia o zariadeniach tohto typu bolo navrhnuté vytvoriť laboratórnu úlohu zameranú na tento proces. Na tento účel bola do poslucháreńského laboratória chemického inžinierstva zakúpená a nainštalovaná vsádzková konvekčná sušiareň. Počas jej prevádzky sa zistilo, že zariadenie v pôvodnom stave nespĺňa požiadavky na laboratórne cvičenie, pretože z údajov zaznamenaných pôvodným vybavením sušiarne nie je možné s dostatočnou presnosťou vypočítať materiálovú a entalpickú bilanciu. Po inštalácii doplnkových meracích členov sa navyše ukázalo, že viaceré z meraných hodnôt sú nespoľahlivé, a bolo preto nevyhnutné overiť reprezentatívnosť a správnosť každého merania. Na základe overených údajov bude následne vytvorený matematický model sušiarne a vypracovaný laboratórny postup pre študentov.

Towards Geometry Optimization of a Die-casting Cooling Insert via the Immersed Boundary Method

Bc. Vít Večerník (M1)

Školitel: Ing. Martin Isoz, Ph.D.

In high-pressure die-casting, reusable moulds require rapid cooling between cycles to maintain process efficiency and part quality. Die cooling relies on circulating liquid coolant through the internal cavities of the die, where flow-guiding inserts enhance convective heat transfer. However, designing optimal insert shapes via numerical simulations can be problematic due to the complex geometries that require costly remeshing for each design iteration. To overcome this limitation, this work establishes the foundation for automated geometry optimization using the immersed boundary method (IBM). The approach combines an automated projection of arbitrary geometries onto the computational domain with an in-house IBM solver, as demonstrated on the representative insert in Figure 1. Using this setup, a numerical flow analysis was conducted to establish a working simulation workflow for subsequent optimization of the insert.

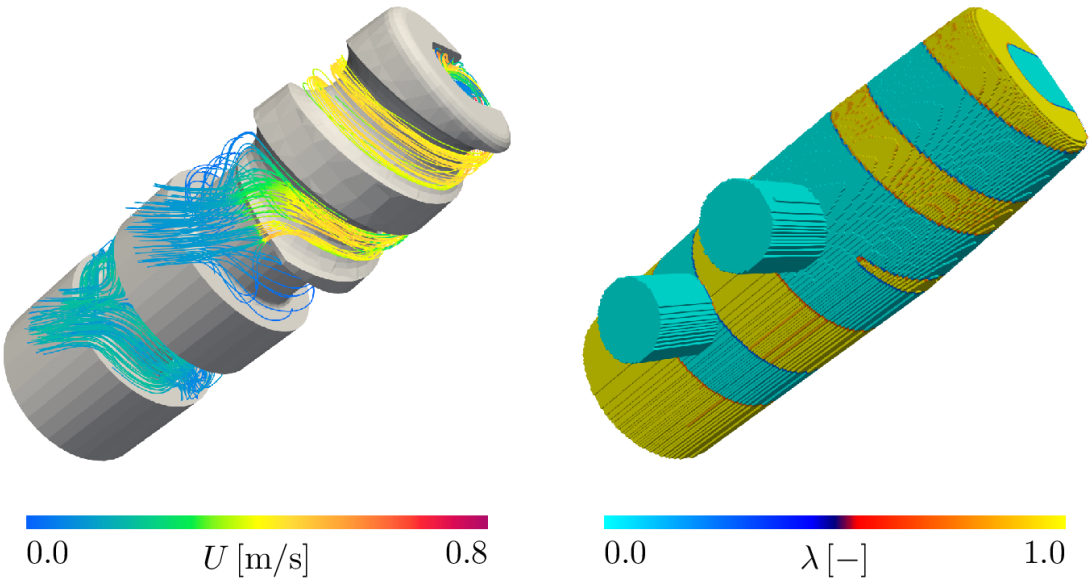


Figure 4: Cooling insert shown as an STL mesh with velocity magnitude streamlines (left) and its immersed boundary λ-field representation in the computational domain (right).

Hydrogelové nosiče pro enkapsulaci půdních bakterií

Petra Větrovská (B3)

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

Hydrogelové nosiče umožňují vytvářet zjednodušené modely mikrobiálního prostředí, ve kterém jsou bakterie uzavřeny v prostorově ohraničené matrici s omezeným transportem látek, čímž lze částečně napodobit podmínky přirozené půdnímu prostředí. Tyto systémy umožňují za kontrolovaných podmínek sledovat růst a viabilitu bakterií a hodnotit vliv složení hydrogelové matrice na jejich chování. Práce se zaměřuje na přípravu a modifikaci alginátových hydrogelových kapslí, s přídavkem polyethylenglykolu (PEG4000) a polyvinylalkoholu (PVA) s cílem ovlivnit vlastnosti hydrogelové sítě. Dvě nejvhodnější formulace budou vybrány pro enkapsulaci půdních bakterií a následné hodnocení jejich růstu, viability a metabolické aktivity. Cílem práce je zjistit, jak složení nosiče ovlivňuje chování bakterií uvnitř hydrogelu, a kde leží vhodný kompromis mezi jejich ochranou a schopností uvolňovat potřebné látky.

Stanovení hodnot k_Ga na sypané výplni NeXRing 1.2 v absorpční koloně za sníženého povrchového napětí

Bc. Yuliia Viktosenko (M2)

Školitel: Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.

Rate-based návrh absorpčních kolon vychází ze znalosti transportních charakteristik výplní, zejména objemového koeficientu přestupu hmoty v plynné fázi k_Ga. Ten se odhaduje pomocí kriteriálních rovnic, v nichž je vyjádřen jako mocninná funkce rychlosti plynné fáze, hustoty zkrápění a difuzního koeficientu. Exponent u difuzního koeficientu přitom umožňuje přenášet data naměřená na jednom systému na systémy jiné. V předchozí etapě této práce byly na sypané výplni NeXRing 1.2 stanoveny hodnoty k_Ga pro systém vzduch–SO_2/voda–NaOH a porovnány se systémem vzduch–NH_3/voda–H_2SO_4. Exponenty popisující vliv průtoků fází však pro oba systémy nevycházejí shodně, a závislost k_Ga na difuzním koeficientu proto nelze spolehlivě určit. Možnou cestou je snížení povrchového napětí kapaliny, které ovlivňuje smáčení výplně a velikost efektivní mezifázové plochy. Cílem této práce je stanovit k_Ga na výplni NeXRing 1.2 za sníženého povrchového napětí při zachování podmínek předchozích měření (kolona o průměru 300 mm, B = 5–40 $m^3 \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$, u_G = 0,5–2,5 $m \cdot s^{-1}$). Porovnáním s daty bez tenzidu bude posouzeno, zda přídavek tenzidu sjednotí závislosti k_Ga na průtocích fází pro různé systémy a umožní přesnější vyhodnocení závislosti k_Ga na difuzním koeficientu.

The 100-Hour Challenge: From Concept to NIR-Based Gas Diffusion Measurements in Polyolefins

Bc. Vanesa Virsiková (M2)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Understanding gas transport properties in polymers is important for applications such as pre- and post-consumer polymer processing. Fourier Transform near-infrared (FT-NIR) spectroscopy enables the concentration of dissolved gas to be monitored directly through its characteristic absorption bands. Furthermore, changes in the polymer spectrum may provide additional information about gas–polymer interactions and swelling, offering a more detailed understanding of the sorption process. We have designed and assembled cell to conduct FT-NIR measurements at elevated temperatures and pressures. The FT-NIR-diffusion apparatus withstand up to 100 °C and up to 20 bar of penetrant pressure. Building on previous work using the pressure-decay method, NIR spectroscopy provides a complementary approach to investigating gas sorption and desorption in polyolefins. While pressure-decay measurements determine gas uptake indirectly from changes in pressure, NIR spectroscopy allows direct spectroscopic monitoring of dissolved gas concentrations.

Oxygen-Promoted Dehydrogenation of Cyclohexene on ZrO_2 Supported CuPd Pentamer Clusters

Bc. Petr Vítek (M1)

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

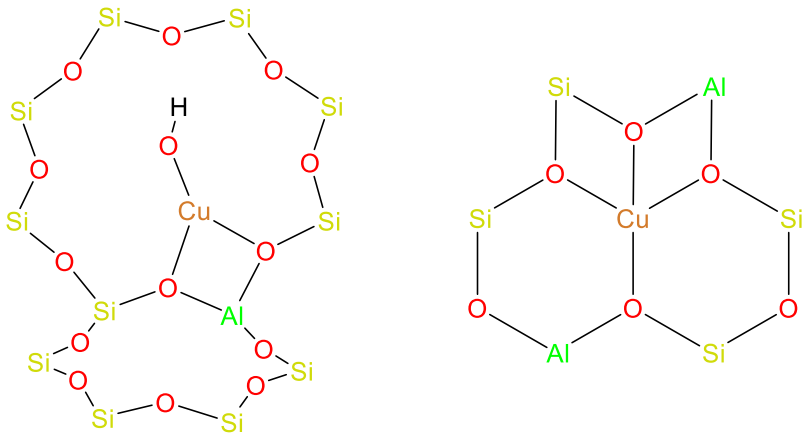
Subnanometer clusters represent a unique class of materials. Due to their size, their properties drastically differ from those of the bulk material owing to quantum effects, which become pronounced at this scale. The subnanometer size makes most of the atoms in the cluster undercoordinated, poised to increase the catalytic activity. This makes even minor changes in the cluster composition or size more pronounced. Often, the change of only one atom can lead to an abrupt change in catalyst performance. In addition, the support influences clusters through cluster-support interactions, which alter the electronic structure of clusters, providing an additional parameter enabling us to fine tune the properties and function of the clusters.In this study, we focused on CuPd pentamer clusters of variable composition (i.e., Cu to Pd ratio) supported on ultra-thin film of ZrO_2 prepared by atomic layer deposition (ALD). Those clusters were tested during the oxidative dehydrogenation (ODH) of cyclohexene. To investigate the sole effect of composition on the activity and selectivity of the nanocatalyst, we kept the cluster size and metal loading exactly the same for each sample. The Pd-containing clusters showed activity with non-monotonic dependence on the Pd content, but monometallic Cu_5 was inactive. The selectivity was 100% towards benzene production. Clusters supported on pre-annealed ZrO_2 showed higher stability over time than those on non-annealed ZrO_2. The clusters produced H_2 even under conditions for oxidative dehydrogenation (C_6H_{10}:O_2 in 1:1 ratio), and the selectivity toward hydrogen depended on the temperature and partial pressure of oxygen in the reaction mixture. This reaction pathway can be interesting for liquid organic hydrogen carriers (LOHC), which offer a potentially energy efficient hydrogen storage solution.

Příprava a charakterizace SCR katalyzátoru Cu/SSZ-13

Bc. Matěj Vlček (M1)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Vyšší obsah oxidů dusíku (NO_x) v ovzduší je spojen s řadou zdravotních komplikací. K emisím NO_x dochází u všech spalovacích procesů, nebo například při výrobě kyseliny dusičné. Metody používané pro redukci těchto škodlivin jsou často založené na selektivní katalytické redukci (SCR), při které dochází k reakci NO_x s přivedeným redukčním činidlem, kterým je obvykle amoniak. V této práci byl studován SCR katalyzátor na bázi mědi iontově vyměněné v zeolitovém substrátu (Cu/SSZ-13). Ten je schopen katalyzovat redoxní reakci mezi oxidem dusnatým a amoniakem za přítomnosti kyslíku a vody. Cílem této práce je příprava SCR katalyzátoru a jeho charakterizace. Měřením redukční části katalytického cyklu na předoxidovaném katalyzátoru je zjištěno celkové množství aktivních center v použitém katalyzátoru. Dále je provedena teplotně programovaná desorpce NO_2, při které je upřesněn poměr mezi centry Z_2Cu a ZCuOH, kde Z značí záporně nabité místo, související s atomem hliníku ve struktuře zeolitu. Nakonec je ověřena aktivita připraveného katalyzátoru při samotné selektivní katalytické redukci oxidů dusíku. Připravený katalyzátor dosahuje vysoké konverze NO_x při provozních teplotách již nad 180 °C.



a) b)

Obrázek 1. Struktura aktivních center v katalyzátoru Cu/SSZ-13: a) ZCuOH, b) Z_2Cu

Studium interakcí molekul stabilizátoru a účinné látky v nanokrystalických formulacích léčiv

Bc. Lenka Vyhlídalová (M1)

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

Mnoho účinných léčivých látek vykazuje nízkou rozpustnost, která vede ke snížení jejich biologické dostupnosti a vyžaduje podávání vyšších dávek pro dosažení požadovaného terapeutického účinku. Z tohoto důvodu je snaha vyvíjet lékové formulace, které umožňují účinnější dodání a vstřebávání léčivé látky v organismu. Jedním z možných přístupů je podávat léčiva ve formě nanokrystalů stabilizovaných surfaktanty nebo jinými povrchově aktivními látkami. Výhodou těchto formulací je vysoký obsah účinné látky. Jak se však ukázalo v naší předchozí experimentální práci, ze které vycházíme, teoreticky vypočtené množství stabilizátoru potřebné k pokrytí povrchu nanokrystalů monovrstvou pro jejich stabilizaci nestačí. Jedním z důvodů může být tvorba složitějších struktur stabilizátoru na povrchu nanokrystalů. Projekt se proto zaměřuje na studium molekulárních interakcí mezi léčivou látkou a stabilizátory pomocí simulací molekulové dynamiky s cílem objasnit jejich uspořádání na povrchu nanokrystalů a příčiny potřeby vyššího množství stabilizátoru. Pro porovnání simulací s experimetny bylo pak provedeno i experimentální studium, kde byly metodou mokrého mletí připraveny nanokrystaly kurkuminu s různými poměry fosfolipidových stabilizátorů, dipalmitoylfosfatidylcholinu (DPPC) a dipalmitoylfosfatidylglycerolu (DPPG) vůči účinné látce. Cílem obou přístupů je přesně určit, kde leží absolutní minimum stabilizátoru, a charakterizovat stavy nad tímto minimem i pod ním.

Duální centrifugace jako škálovatelná metoda přípravy liposomálních formulací

Bc. Hubert Waněk (M1)

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

Liposomy jsou vezikuly tvořené jednou nebo více fosfolipidovými dvojvrstvami. Díky své biokompatibilitě a schopnosti přenášet hydrofilní i lipofilní látky se ve farmacii široce využívají jako nosiče léčiv. Konvenční metody přípravy, jako je hydratace tenkého lipidového filmu s následnou extruzí, jsou však vícekrokové, často vyžadují organická rozpouštědla a obtížně se převádějí do většího měřítka. Slibnou alternativou je duální centrifugace (DC). V duální centrifuze rotuje vialka se vzorkem kolem vlastní osy a současně obíhá kolem centrální osy přístroje. Tím dochází k intenzivnímu promíchávání a působení vysokých smykových sil, které umožňují vznik liposomů přímo ze směsi lipidů a vodné fáze v jediném kroku, v uzavřené vialce a bez použití organických rozpouštědel. Tato práce se zabývá tvorbou liposomů metodou duální centrifugace a hodnotí ji jako potenciální metodu pro výrobu liposomů ve větším měřítku.

Enkapsulace a analýza stability lipidových nanočástic metodou rozprašovacího sušení

Iva Zábranská (B3)

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

Vakcíny založené na enkapsulaci messenger RNA (mRNA) do lipidových nanočástic (LNPs) představují moderní přístup k prevenci infekčních onemocnění. Nutnost udržování nízkých teplot během skladování a transportu ovšem představuje značný logistický problém (cold chain logistics), zejména v oblastech se slabou infrastrukturou. Jako možná cesta k překonání tohoto problému se nabízí stabilizace LNPs v suchém stavu pomocí rozprašovacího sušení. Zásadní výzvou přitom zůstává zachování vlastností částic během sušení a následného skladování. Hlavním předmětem této práce je proto optimalizace složení ochranné matice tak, aby byla minimalizována destabilizace LNPs. Za tímto účelem jsou LNPs připravovány pomocí mikrofluidiky a následně enkapsulovány do stabilní formulace mikročástic metodou rozprašovacího sušení. Cílem je, aby si LNPs po opětovném rozpuštění výsledné práškové formulace ve vhodném roztoku zachovaly svou původní velikost a vlastnosti, přičemž změny jejich velikostí a velikostní distribuce částic budou hodnoceny metodou dynamického rozptylu světla (DLS).

Matematický model nukleace a růstu částic šťavelanu vápenatého v elektrickém poli

Bc. Kateřina Zedníčková (M2)

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

Elektrické pole umožňuje řízenou interakci elektricky opačně nabitých reaktantů a jejich následnou reakci za vzniku definovaných produktů, například krystalických či amorfních nano- a mikročástic. Tohoto principu využívá zcela nový typ elektrokrystalizéru, jenž má velký aplikační potenciál například ve farmacii. 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 amorfní 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 matematický model nukleace šťavelanu vápenatého ve vnějším elektrickém poli, v němž se nejprve v roztoku tvoří iontové páry a při dostatečném přesycení dochází k nukleaci. V samostatné dvourozměrné doméně, reprezentující jednak polohu podél vnější souřadnice, a jednak velikost krystalů, byla řešena populační bilance rostoucích krystalů šťavelanu vápenatého. Byly provedeny parametrické studie a výsledky matematického modelu byly srovnány s daty z experimentů.

