

Studentská Vědecká Konference

2020

19. 11. 2020

SBORNÍK ANOTACÍ

Fakulta chemicko-inženýrská

Organizační tým

FAKULTNÍ KOORDINÁTOR

doc.Ing. Jitka Čejková, Ph.D.

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOŘI

[402](#) **Ústav analytické chemie**

Ing. Martin Člupek, Ph.D.

[403](#) **Ústav fyzikální chemie**

doc. Ing. Ondřej Vopička, Ph.D.

[409](#) **Ústav chemického inženýrství**

doc. Dr. Ing. Pavlína Basařová

[444](#) **Ústav fyziky a měřicí techniky**

RNDr. Pavel Galář, Ph.D.

[445](#) **Ústav počítačové a řídicí techniky**

Ing. Iva Nachtigalová, Ph.D.

SPONZOŘI FAKULTY CHEMICKO-INŽENÝRSKÉ

ZENTIVA



LONZA



Filip Kaltman
Petr Slaviček

Ústav analytické chemie (402)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Martin Člupek, Ph.D.

SEZNAM SEKČÍ

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

SPONZOŘI ÚSTAVU ANALYTICKÉ CHEMIE



NICOLET CZ
MOLECULAR SPECTROSCOPY



ZENTIVA

LECO



pragolab

SHIMADZU
Excellence in Science

OLYMPUS
Your Vision, Our Future

VWRTM
part of avantor

HPST

Analytická chemie I

KOMISE

doc. Dr. RNDr. David Sýkora (předseda)

doc. Ing. Ivan Víden, CSc.

Ing. Magda Vosmanská, CSc.

RNDr. Jiří Břicháč, Ph.D. (ZENTIVA k.s.)

PROGRAM

08:30 [Bc. Dominika Bezdeková](#) (M1, None)

MALDI MS zobrazování izomerů lipidů pomocí off-line ozonizace

08:50 [Bc. Eliška Hančová](#) (M1, None)

Mikrogradientová frakcionace lipidů

09:10 [Bc. Eliška Horáková](#) (M1, None)

Syntéza a chirální SFC/MS analýza glycerolipidů

09:30 [Bc. Jakub Jireš](#) (M2, doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.)

Objasnění vzniku N-nitrosodimethylaminu v produktech obsahujících metformin

09:50 [Bc. Kateřina Kroutilová](#) (M1, prof. RNDr. Štěpán Urban, CSc.)

Rozpoznání Vietnamců a Čechů podle pachové stopy

10:10 [Bc. Tereza Maříková](#) (M2, doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.)

Vývoj metody preparativní separace enantiomerů metadonu pomocí HPLC

MALDI MS zobrazování izomerů lipidů pomocí off-line ozonizace

Bc. Dominika Bezdeková (M1)

Masarykova univerzita, Brno

Školitel: Mgr. Antonín Bednařík, Ph.D.

Glycerofosfolipidy (GP) sa vyznačujú obrovským počtom existujúcich štruktúr, súvisiacim s dĺžkou acylového reťazca, typom polárnej hlavičky či stupňom a miestom nenasýtenosti. Klasické metódy hmotnostnej spektrometrie (MS) a tandemovej MS (MS²) nás informujú o triede GP, celkovom počte uhlíkov a počte dvojitych väzieb uhlík-uhlík (C=C). Nie sú schopné však rozpoznať izoméry líšiace sa polohou dvojitej väzby v reťazci. Jednou z metód, umožňujúcou zistenie polohy C=C, je reakcia s ozónom, ktorá špecificky v mieste nenasýtenosti tvorí tzv. ozonidy. Tie možno v MS² charakteristicky fragmentovať. Okrem štruktúry izomérov je dôležité poznať aj ich priestorové rozloženie v rámci biologických tkanív, keďže sa ukázalo, že ich výskyt je príznačný pre dané typy tkaniva a ich špecifická distribúcia môže byť použitá v diagnostike určitých chorôb. Naša práca sa zamerala na preskúmanie potenciálu off-line derivatizácie pomocou ozónu pri priestorovom zobrazovaní polohových izomérov GP pomocou techniky zobrazovacej hmotnostnej spektrometrie s laserovou desorpciou a ionizáciou za účasti matrice (MALDI MSI). Vizualizáciou rozdielnej distribúcie izomérov PC 34:1 ($\Delta 9$) a PC 34:1 ($\Delta 11$) sa nám v reze myšieho mozgu podarilo rozlíšiť bielu a sivú hmotu a v reze ľudského hrubého čreva sval a sliznicu.

Mikrogradientová frakcionace lipidů

Bc. Eliška Hančová (M1)

Univerzita Hradec Králové, Přírodovědecká fakulta

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

Lipidy jsou malé nepolární nebo amfipatické molekuly, které jsou nezbytnou součástí živých organismů. Na rozdíl od dalších důležitých biomolekul se skládají z velkého množství chemicky odlišných stavebních podjednotek. Z tohoto důvodu jsou jejich přírodní směsi značně složité a v rámci celého lipidomického extraktu je obtížná analýza lipidů s nízkou koncentrací, detailní analýza jednotlivých lipidů v rámci třídy nebo stanovení jednotlivých izomerů. Řešením tohoto problému je využití různých separačních technik k rozdělení celkového lipidového extraktu na jednotlivé třídy. V této práci byla pro rozdělení lipidů do tříd využita metoda mikrogradientové frakcionace, dříve aplikována pouze na separaci peptidů či proteinů. Cílem práce bylo optimalizovat tuto metodu pro úspěšnou frakcionaci lipidů obsažených v extraktu z prasečího mozku před SFC/MS a LC/MS analýzou. Samotná optimalizace zahrnovala výběr vhodné stacionární fáze, délku použité kolonky, složení mikrogradientu a jeho přípravu.

Syntéza a chirální SFC/MS analýza glycerolipidů

Bc. Eliška Horáková (M1)

Univerzita Hradec Králové, Přírodovědecká fakulta

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

Glycerolipidy jsou látky, které mají řadu nezastupitelných funkcí v organismu. Jedná se o estery vyšších mastných kyselin a glycerolu tedy o mono-, di-, nebo trisubstituované glyceroly. V závislosti na poloze acylu na glycerolovém skeletu mohou glycerolipidy existovat jako izomery. Znalost zastoupení jednotlivých izomerů ve vzorku je důležitá vzhledem k jejich odlišným biochemickým vlastnostem daných stereospecifickým prostředím v organismu. Cílem práce byla syntéza standardů izomerů acylglycerolů a optimalizace metody pro jejich chirální SFC/MS analýzu. Nejprve byla připravena směs izomerů acylglycerolů, pomocí které byla optimalizována metoda pro achirální a chirální SFC/MS analýzu acylglycerolů. Achirální separace byla použita pro separaci jednotlivých tříd acylglycerolů. Následně byly použity kolony s chirální stacionární fází, které jsou určeny pro separaci jednotlivých izomerů. Za účelem optimalizace SFC/MS bylo vyzkoušeno několik chirálních kolon, modifikátorů mobilní fáze a dalších podmínek separace. Po separaci směsi izomerů byla dalším úkolem syntéza standardů dvou enantiomerů monoacylglycerolů, bez nichž by identifikace izomerů nebyla možná. Standardy pomohly identifikovat jednotlivé izomery ve směsi na základě porovnání retenčních časů.

Objasnění vzniku N-nitrosodimethylaminu v produktech obsahujících metformin

Bc. Jakub Jireš (M2)

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

Účinná analytická metoda pro stanovení *N*-nitrosodimethylaminu (NDMA) v účinné látce metformin a v potahovaných tabletách metformin obsahujících (FCT) využívající kapalinovou chromatografii spřaženou s tandemovou hmotnostní spektrometrií byla aplikována v průběhu optimalizační studie s cílem snížení obsahu NDMA ve výsledném produktu. Metoda využívá lineární eluční gradient, kolonu Acquity UPLC HSS T3 a složky mobilní fáze: methanol a 0,1% kyselinu mravenčí ve vodě. Ionizace analytu byla provedena s použitím chemické ionizace za atmosférického tlaku, sledovány byly kladně nabitě ionty. Metoda byla kalibrována pomocí externí kalibrační řady a přídavku izotopově značeného interního standardu. Metoda byla částečně validována podle požadavků Mezinárodní rady pro harmonizaci. Výkonnost metody byla dále potvrzena v průběhu mezilaboratorního srovnání provedeného pomocí regresní analýzy. Na základě studie, při které bylo změřeno 469 vzorků účinné látky a FCT, byly zformulovány klíčové faktory ovlivňující tvorbu NDMA v produktech obsahujících metformin. Byla vyslovena hypotéza vysvětlující mechanismy za jednotlivými faktory, z čehož byla vyvozena nápravná opatření.

Rozpoznání Vietnamců a Čechů podle pachové stopy

Bc. Kateřina Kroutilová (M1)

Školitel: prof. RNDr. Štěpán Urban, CSc.

Forenzní kynologie předpokládá, že primární kožní pach každého jedince umožňuje individuální identifikaci stejně, jako např., otisk prstu. Dle dosavadních studií má kožní pach potenciál i při skupinové identifikaci, jako např. určení pohlaví či etnické příslušnosti jedince. Cílem této práce bylo otestování, zda lze chemickou analýzou pachové stopy (olfaktronicky) odlišit Čechy a Vietnamce, jakožto příslušníky různých etnik. Pro naměření dat byla použita metoda dvourozměrné plynové chromatografie (GCxGC-TOF). Pro studii byly odebírány pachové vzorky 5 dobrovolníků z vietnamské komunity a jejich chemické složení bylo porovnáno s pachy českých dobrovolníků. V chromatogramech vzorků byly hledány látky, které se lišily mezi jmenovanými skupinami v jejich četnosti nebo v koncentračních poměrech, a tak umožnily rozlišení obou etnik. Výsledky této práce by mohly být v budoucnu použity v kriminalistice jako materiál pro přiřazení zůstavitele pachu k příslušné etnické skupině lidí.

Vývoj metody preparativní separace enantiomerů metadonu pomocí HPLC

Bc. Tereza Maříková (M2)

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

Metadon je lék, který se řadí mezi opioidní analgetika a používá se při léčbě závislostí na opiátech a bolestech při rakovině. Tato chirální látka se prodává jako racemická směs, avšak uvádí se, že *R*-metadon má až padesátkrát silnější analgetické účinky než *S*-metadon. Podávání pouze aktivnějšího *R*-enantiomeru by tedy vedlo ke snížení dávky daného léčiva a možnému omezení nežádoucích vedlejších účinků. Vývoj účinné metody preparativní enantioseparace metadonu je klíčovým krokem v této problematice. V této práci byly určeny optimální podmínky chirální separace metadonu s užitím polysacharidové kolony ChiralArt Amylose-SA, a to v analytickém i preparativním módu. Dále byla na základě teplotní studie určena závislost retenčního faktoru a enantioselektivity na teplotě kolony. Z termodynamických dat byla vypočtena teoretická teplota koeluze jednotlivých enantiomerů metadonu, jejíž znalost by mohla být užitečná k dosažení výměny elučního pořadí píků, a tedy k získání obou enantiomerů ve vysoké čistotě.

Analytická chemie II

KOMISE

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

Ing. Vadym Prokopec, Ph.D.

Ing. Jan Koucký, Ph.D.

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

PROGRAM

08:30 [Bc. Matúš Drexler](#) (M2, doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.)

Vývoj inhibitorov vírusovej metyltransferázy pomocou NMR

08:50 [Bc. Nina Habanová](#) (M2, Ing. Radek Pohl, Ph.D.)

Solvent-induced conformational changes in carbohydrates

09:10 [Bc. Eva Pospíšilová](#) (M2, doc. Mgr. Taťjana Šiškanova, CSc.)

Možnosti elektrochemické detekce aminoindanu

09:30 [Bc. Jakub Marián Páleš](#) (M1, doc. Mgr. Taťjana Šiškanova, CSc.)

Spectroscopic studies of anion binding by novel thiophene based receptors - precursors for the preparation of electrochemical sensors

09:50 [Bc. Annemarie Skálová](#) (M2, doc. Mgr. Taťjana Šiškanova, CSc.)

Vývoj potenciometrického elektronického jazyka pro monitorování farmaceutických přípravků na bázi bisfosfonátů

10:10 [Petra Šnobllová](#) (B3, Ing. Vilém Bartůněk, Ph.D.)

Výzkum chemisorpčních vlastností nanočástic oxidu ceričitého na vybraných organických barvivech

Vývoj inhibítorov vírusovej metyltransferázy pomocou NMR

Bc. Matúš Drexler (M2)

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

NMR je jedna z najbežnejšie používaných metód na hľadanie a analýzu vhodne interagujúcich molekúl. Kombinuje robustnosť, jednoduchosť a schopnosť analyzovať rôzne typy interakcií v prostredí blízkom in vivo. Často používanými experimentmi sú STD a 2D ^1H - ^{15}N HSQC, ktoré sa používajú na identifikáciu a charakterizáciu interakcií medzi fragmentmi a požadovaným proteínom. V tejto práci bola skúmaná interakcia medzi metyltransferázovou doménou proteínu (NS 5) z vírusu dengue a malými fragmentami. Z 1000 malých molekúl vykazovalo 72 molekúl STD NMR signál. Z nich 35 zvýšilo tepelnú stabilitu proteínu analyzovanú pomocou DSF. Ďalej bola zistená disociačná konštanta K_D a väzbové miesta pre natívne substráty a syntetické analógy natívnych substrátov (2D NMR titrácie). Taktiež bola úspešne priradená aminokyselinová sekvencia proteínu k jednotlivým signálom aminokyselín v NMR spektre. Tieto dáta boli následne využité na mapovanie interakcie molekúl na proteín. Bola nájdená séria molekúl, ktorá môže byť ďalej použitá pri vývoji nových liečiv proti ochoreniu dengue. Proteínové NMR priradenie tohto proteínu môže byť ďalej použité na analýzy rôznych typov interakcií medzi týmto proteínom a ďalším partnerom/i.

Solvent-induced conformational changes in carbohydrates

Bc. Nina Habanová (M2)

Školitel: Ing. Radek Pohl, Ph.D.

The aim of this study is to investigate the influence of environment simulated by solvent changes on conformational behavior of simple octyl d-gluco and d-galactopyranosides and to objectively evaluate the perceptiveness of NMR parameters to such changes by the combination of experimental NMR and molecular modelling. Hydroxyl groups in a carbohydrate molecule are involved in both intermolecular and intramolecular hydrogen bonding. Variation of polarity/proticity of a solvent should lead to changes in hydrogen bonding pattern. Since NMR spectroscopy is one of the main analytical tools in structural analysis of carbohydrates in solution, the consequences of this study are important for biologically relevant carbohydrate biomolecules where the conformation plays an important role in the molecular recognition process.

Možnosti elektrochemické detekce aminoindanu

Bc. Eva Pospíšilová (M2)

Školitel: doc. Mgr. Taťjana Šiškanova, CSc.

Tato práce provádí porovnání potenciometrické a voltametrické detekce 2-aminoindanu (2-AI), který patří do kategorie nových psychoaktivních látek (NPS). NPS svými účinky i strukturou napodobují již známé léky a drogy, ale na rozdíl od klasických drog, nejsou účinky NPS dostatečně prozkoumány, a proto představují značné nebezpečí pro lidské zdraví. Podstatou potenciometrické detekce byla interakce na fázovém rozhraní mezi protonovaným 2-AI a aktivní komponentou ion-selektivní membrány (ISM). Byla diskutována potenciometrická odezva ISM na bázi neutrálních nosičů (kalix[4]arenu a dibenzo-18-crown-6-etheru) a kationtoměniče (tetrafenylborátu sodného) vůči 2-AI a dalším kationtům (Na^+ , K^+ a NH_4^+). V průběhu potenciometrických měření bylo zjištěno, že citlivost a selektivita experimentálních ISM jsou ovlivněny původem aktivní komponenty. Na rozdíl od potenciometrické detekce, podstatou voltametrická detekce (metoda diferenční pulzní voltametrie, DPV) byla oxidace 2-AI na povrchu pevné elektrody na bázi skelného uhlíku. Na základě zpracování výsledků a požadavků, které musí splňovat analytická metoda (citlivost, pracovní rozsah, detekční limit, opakovatelnost signálu, selektivita) byla potenciometrická metoda vyhodnocená jako vhodnější pro stanovení 2-AI.

Spectroscopic studies of anion binding by novel thiophene based receptors - precursors for the preparation of electrochemical sensors

Bc. Jakub Marián Páleš (M1)

Školitel: doc. Mgr. Tatjana Šiškanova, CSc.

Electrochemical sensors using conducting polymers such as polypyrrole (PPy), polythiophene (PT) etc. are low-cost, portable and successful instruments generally adopted in clinical analysis. Potentiometric sensors like ion-selective electrodes (ISEs), using these conducting polymers, became a dynamically developing area of analysis. Following study deals with the novel receptors based on supramolecular- non-covalent bonding were proposed and synthesized for ion detection in connection with conducting polymers. Such a design could lead to higher specificity of detection. This research is focused on monomeric thiophene-based receptors with urea binding site for detection of anionic metabolites used as tumour markers of neuroblastoma such as homovanillic acid (HVA) and vanillylmandelic acid (VMA). New receptors were designed and synthesized according to required binding features. Complexation properties were then evaluated and association constants were determined using the NMR and UV-Vis titration experiments. Finally, receptor's selectivity to HVA and VMA among other biological anions was assessed.

Vývoj potenciometrického elektronického jazyka pro monitorování farmaceutických přípravků na bázi bisfosfonátů

Bc. Annemarie Skálová (M2)

Školitel: doc. Mgr. Taťjana Šiškanova, CSc.

Léčiva na bázi bisfosfonátů jsou organické molekuly, které se využívají pro léčbu osteoporózy, Pagetovy choroby či mnohočetného myelomu. V dnešní době se na trhu nachází mnoho druhů bisfosfonátů, které se liší svými vlastnostmi. Pro analýzu těchto látek se používá především vysokoúčinná kapalinová chromatografie. Cílem této práce bylo otestovat iontově-selektivní membrány (ISM) modifikované polyanilinovou (PANI) vrstvou k rozlišování bisfosfonátů. Rozlišování bylo provedeno na vzorcích sodných solí ibandronátu, risendronátu, alendronátu a klodronátu. Předpokládalo se, že podmínky, za kterých PANI vrstva bude deponovaná na povrch ISM (kyselost prostředí, přítomnost anorganických solí), budou přispívat k odlišné lipofilitě povrchů a následně i k rozdílné potenciometrické odezvě. V čase pozorované změny potenciometrické odezvy jednotlivých ISM jsou z velké pravděpodobnosti výsledkem změn vlastností deponované polymerní vrstvy. Bylo prokázáno, že elektronický jazyk na bázi ISM lišící se lipofilitou povrchů dokáže rozlišovat jednotlivé bisfosfonáty za podmínek provedení kalibrace na standardní roztocích před analýzou reálných vzorků.

Výzkum chemisorpčních vlastností nanočástic oxidu ceričitého na vybraných organických barvivech

Petra Šnoblová (B3)

Školitel: Ing. Vilém Bartůněk, Ph.D.

Cílem práce byla příprava a charakterizace nanočástic oxidu ceričitého a dále výzkum jeho chemisorpčních vlastností na vybraných látkách. Pro přípravu byla zvolena srážecí metoda a vzniklé nanočástice ve formě precipitátu byly po přečištění vodou a charakterizovány pomocí HR-TEM, XRD a SEM-EDS. Následně byla provedena sada základních experimentů, při nichž byla pozorována sorpční vlastnost připraveného materiálu u některých barviv. Pro vybrané látky byla poté měřena základní kinetika sorpce pomocí UV-Vis. Bylo zjištěno, že u některých látek vzniká relativně pevné spojení mezi pevnou fází a rozpuštěným barvivem, vzniklý materiál byl poté důkladně umyt vodou a pevná fáze separována centrifugací. Vysušený prášek byl poté analyzován pomocí Ramanovy spektroskopie. V případě fluoresceinu a alizarinu, byla prokázána chemisorpce těchto sloučenin na oxid ceričitý, navíc bylo pozorováno potlačení fluorescence u obou látek.

Analytická chemie III

KOMISE

doc. Ing. Kamil Záruba, Ph.D. (předseda)

Ing. Lucie Habartová, Ph.D.

Ing. Antonín Kaňa, Ph.D.

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

PROGRAM

08:30 [Lenka Filipiaková](#) (B3, Ing. Marie Švecová)

Využití SERS a SEIRA spektroskopie pro detekci myricetínu

08:50 [Bc. Eliška Kantorová](#) (M2, Ing. Milan Jakubek, Ph.D.)

Aplikace pentametinů pro rozpoznání biologických významných aniontů

09:10 [Bc. Adéla Koryťáková](#) (M1, Ing. Marie Švecová)

Příprava SERS substrátů galvanickou depozicí a jejich využití pro studium vybraných aminokyselin

09:30 [Bc. Karolína Kubičková](#) (M2, doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.)

Využití kyseliny trifluoroctové ke zlepšení integrovatelnosti spekter NMR pro kvantitativní vyhodnocení

09:50 [Bc. Věra Schrenková](#) (M2, prof. RNDr. Petr Bouř, CSc.)

Raman Optical Activity of Nucleotides – Experimental and Theoretical Study

10:10 [Kateřina Veselá](#) (M2, Ing. Milan Jakubek, Ph.D.)

Studium interakce biologicky aktivních látek s ionty kovů

Využití SERS a SEIRA spektroskopie pro detekci myricetínu

Lenka Filipiaková (B3)

Školitel: Ing. Marie Švecová

Myricetín je přírodní flavonoid s antioxidačními vlastnostmi, který pomáhá v prevenci před některými druhy rakoviny, karcinogennými mutacemi či kardiovaskulárními onemocněními. Bežně se vyskytuje v brusnicích, goji či černých ríbezích. Za specifických podmínek má naopak aj nežádoucí účinky jako mutagenost nebo degradaci DNA po jejich vzájemné interakci. Myricetín se vyskytuje ve svém přirozeném prostředí v nízkých koncentracích, které můžeme sledovat např. technikami povrchově zesílené vibrační spektroskopie (SEVS - Surface-Enhanced Vibrational spectroscopy) vďaka zesílení optické odezvy v důsledku interakce analytu s plasmonickým kovem. Hlavním cílem této práce je vybrat správný typ zesilujícího substrátu (plasmonický kov, vhodná příprava povrchu, morfológie) a následně zvolit vhodné experimentální podmínky (především vlnová délka) pro identifikaci myricetínu. Okrem moderných vibračních spektroskopii (SERS - Surface Enhanced Raman Scattering a SEIRA - Surface Enhanced Infrared Absorption), které nám umožňují prokázat samotný analyt, jsou využité aj mikroskopické metody (AFM - atomic force microscopy, SEM - scanning electron microscopy) k mapování a získání informací o morfológii povrchu.

Aplikace pentametinů pro rozpoznání biologických významných aniontů

Bc. Eliška Kantorová (M2)

Školitel: Ing. Milan Jakubek, Ph.D.

Fluorescenční barviva jsou již dlouho předmětem zájmu v oblasti analytické chemie a biologie. Pro analytické aplikace v pokročilých zobrazovacích technikách (dvoufotonová či super rozlišená mikroskopie) jsou kladeny vyšší požadavky na fyzikálně-chemické vlastnosti těchto sloučenin. Dalším požadavkem je specifické intracelulární cílení (organely), které zůstává stále velkou výzvou. Kombinace těchto požadavků je aplikována v tzv. teranosticích. Práce se zabývá studiem vybraných cyklických derivátů pentamethiniových sloučenin pro možné využití v oblasti intracelulárních teranostik. V rámci práce byly provedeny spektroskopické experimenty s cílem studia chování látek a interakce s analyty v různě polárních rozpouštědlech. Pro studium byly zvoleny techniky fluorescenční a absorpční spektroskopie. Jako analyty byly vybrány biologicky aktivní látky například deriváty kyseliny cholové. Studované deriváty vykazovaly afinitu k biologicky aktivním iontům. Taktéž byly provedeny spektroskopické *in vitro* experimenty, které ukazují potenciál látek pro přípravu teranostik.

Příprava SERS substrátů galvanickou depozicí a jejich využití pro studium vybraných aminokyselin

Bc. Adéla Koryťáková (M1)

Školitel: Ing. Marie Švecová

Povrchem zesílená Ramanova spektroskopie (Surface-Enhanced Raman Scattering spectroscopy, SERS) je nedestruktivní technika, která se nejčastěji používá pro studium látek v malém až stopovém množství. Dochází zde ke znásobení optické odezvy analytů, jenž jsou adsorbovány na povrchu plasmonických nanostruktur kovu. Plasmonické vrstvy lze připravit např. elektrochemickými postupy a jednotlivé substráty umožňují rychlou a spolehlivou detekci širokého spektra látek. Jednou z takových skupin látek jsou například aminokyseliny, jež jsou zajímavé jak z pohledu své rozmanité struktury, tak z pohledu své biologické významnosti. Aminokyseliny lze nalézt ve všech formách života na Zemi, běžně jsou uspořádané do větších útvarů – makromolekul, které se nazývají peptidy. V této práci byly připraveny Ag, Au a Cu plasmonické substráty galvanickou depozicí na hliníkový povrch. Na takto připravené nosiče byly deponovány studované aminokyseliny (serin, cystein, histidin, tyrosin). SERS spektra byla měřena s využitím různých excitačních vlnových délek (785 a 1064 nm). Cílem této práce bylo nalezení vhodné kombinace plasmonického substrátu a excitační vlnové délky pro detekci a identifikaci vybraných aminokyselin.

Využití kyseliny trifluoroctové ke zlepšení integrovatelnosti spekter NMR pro kvantitativní vyhodnocení

Bc. Karolína Kubíčková (M2)

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

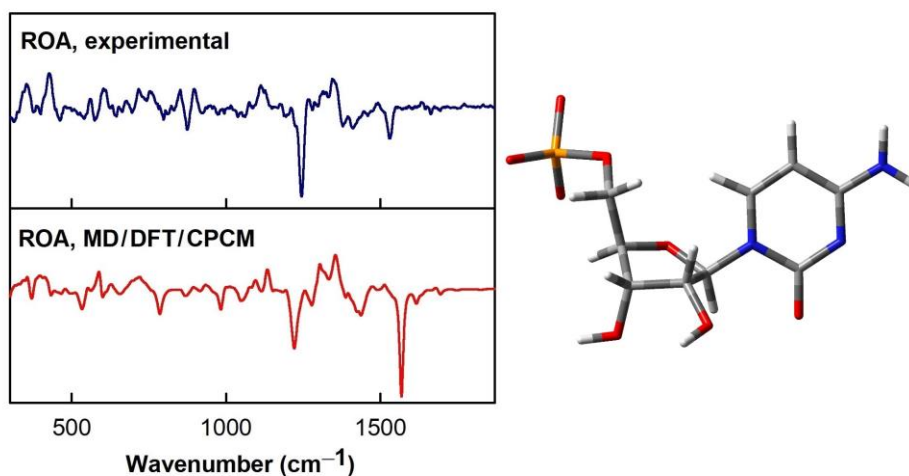
Úspěšné provedení kvantitativní analýzy spekter NMR je závislé na řadě parametrů např. relaxační době jádra, rozsahu spektra, fázování spektra nebo integraci signálů. Posledně jmenovaným faktorem se zabývá tato práce. Častým problémem kvantitativní NMR (qNMR) je, že spektra studovaných látek jsou komplikována přítomností protonů podléhajících chemické výměně. Tyto signály jsou poměrně široké, a proto v mnoha případech zasahují do integrační oblasti ostatních signálů, čímž ovlivňují výsledek kvantitativní analýzy. Další z vlastností těchto protonů je, že jejich chemický posun je závislý na pH. Cílem této práce je zvýšit chemický posun signálů protonů podléhajících chemické výměně do oblasti, ve které nejsou signály studovaných látek. Pro tento účel byla využita změna pH roztoku sledované látky přidávkem kyseliny trifluoroctové (TFA) do květy. V této práci je navržený postup aplikován na modelové vzorky monohydrátu laktosy, mannitolu a prokain hydrochloridu.

Raman Optical Activity of Nucleotides – Experimental and Theoretical Study

Bc. Věra Schrenková (M2)

Školitel: prof. RNDr. Petr Bouř, CSc.

Nucleotides are organic molecules composed of a purine or pyrimidine base, a five-carbon sugar (deoxyribose or ribose), and one or more phosphoric acid residues. Uncondensed nucleotides may carry various biological functions as they can adopt a range of conformations in solution. It is advantageous to use polarized analogue of conventional Raman spectroscopy called Raman optical activity (ROA), because it provides unique stereochemical information. However, this information needs to be obtained through relatively complicated computer simulations. In the present work, experimental Raman and ROA spectra of adenosine, guanosine, deoxythymidine and cytidine 5'-monophosphate were interpreted using molecular dynamics (MD) coupled with density functional theory (DFT). MD itself provided precious information about the sugar puckering and other coordinates affecting the ROA signal of nucleotides. For example, the phosphate group strongly influences the sugar conformation due to the internal hydrogen-bond formation. The simulated spectra relatively faithfully reproduce most of the experimental features and may be thus used to determine or verify the conformation.



Studium interakce biologicky aktivních látek s ionty kovů

Kateřina Veselá (M2)

Školitel: Ing. Milan Jakubek, Ph.D.

Zvýšená koncentrace iontů přechodných kovů (např. mědi, zinku a železa) je spojena s řadou vážných patologií např. onkologických a neurodegenerativních onemocnění. Naše práce se zabývá studiem dusíkatých syntetických receptorů (strukturní motiv: tryptanthriny a prazoly) jako chelátorů iontů přechodných kovů ve vodných systémech. Strukturní motiv tryptanthrinů a prazolů je spojován s antimikrobiálními, protinádorovými a protizánětlivými účinky. V rámci práce byly studovány nově připravené deriváty tryptanthrinů (T8H-TSC, PAA-TSC) a již známe strukturní motivy prazolů (omeprazol, lansporazol, pantoprazol). Studované látky byly charakterizovány pomocí technik molekulové spektroskopie jako např. UV/Vis, NMR, IR, a Ramanovy spektroskopie. Následně byla provedena vazebná studie pomocí absorpční spektrometrie s ionty přechodných kovů a nukleovými kyselinami (DNA a RNA). Výsledky ukazují silnou afinitu v případě tryptanthrinů k měďnatým iontům a v případě prazolů k železitým iontům. Dosažené výsledky byly již z části publikovány v mezinárodním recenzovaném časopise s impakt faktorem.

Ústav fyzikální chemie (403)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

doc. Ing. Ondřej Vopička, Ph.D.

SEZNAM SEKČÍ

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

SPONZOŘI ÚSTAVU FYZIKÁLNÍ CHEMIE



ZENTIVA



CHROMSPEC

pragolab



prof. RNDr. Bc. Petr Slaviček, Ph.D.

Fyzikální chemie I

KOMISE

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

Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.

Ing. Štěpán Hovorka, Ph.D.

PROGRAM

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

Kvantitativní predikce fyzikálních vlastností izolačních plynů

09:20 [Lukáš Jiříšně](#) (B3, Ing. Martin Klajmon, Ph.D.)

Modelování termodynamiky iontových kapalin: Vliv rozložení náboje v rovnici PC-SAFT

09:40 [Zuzana Kočiščáková](#) (B3, Ing. Adéla Jenišťová)

Detekce vůní na kůži pomocí vibrační spektrometrie

10:00 [Veronika Kostková](#) (B2, Ing. Ctirad Červinka, Ph. D.)

Teoretické výpočty termodynamických vlastností vybraných farmaceuticky aktivních látek ve stavu ideálního plynu

10:20 [Ivana Malá](#) (B3, doc. Ing. Ondřej Vopička, Ph.D.)

Adsorpční rovnováhy simulantů bojových chemických látek - vývoj vysoce adsorbujících ochranných pomůcek

10:40 [Jan Svoboda](#) (B3, prof. RNDr. Jiří Ludvík, CSc.)

Spektro-foto-elektrochemické studium vybraných derivátů flavinu pro využití ve fotokatalýze

11:00 [Adam Zalčík](#) (B3, Ing. Vojtěch Štejfá, Ph.D.)

Thermodynamic study of selected terpenoids

Kvantitativní predikce fyzikálních vlastností izolačních plynů

Martin Jež (B3)

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

Fluorid sírový je jedním z šestice plynů, jež jsou regulovány Kjótským protokolem. I přes to se od podepsání tohoto dokumentu roku 1997 jeho koncentrace v ovzduší více než zdvojnásobila. Používá se zejména ve vysokonapěťové elektrotechnice jako izolační plyn, vzhledem k jeho výjimečné schopnosti zhaset elektrické oblouky. Pro toto využití se nyní hledají možní nástupci. Hlavními kritérii pro jejich výběr je dielektrická pevnost a plynné skupenství za běžných teplot a tlaků. Naším cílem je využít strojového učení a sestavovat pokročilejší regresní modely závislosti těchto makrofyzikálních vlastností na vlastnostech molekul získaných z kvantových výpočtů, přesněji za aplikace teorie funkcionálu hustoty. Chceme navázat na výzkum v této oblasti a pokusit se nalézt další deskriptory, abychom mohli spolehlivěji predikovat dané vlastnosti.

Modelování termodynamiky iontových kapalin: Vliv rozložení náboje v rovnici PC-SAFT

Lukáš Jiříšně (B3)

Školitel: Ing. Martin Klajmon, Ph.D.

PC-SAFT je rodinou stavových rovnic založených na termodynamické perturbační teorii. K popisu molekul využívá parametry, které mají fyzikální význam, a poskytuje tak alespoň přibližnou vazbu mezi vlastnostmi molekul a makroskopickými termodynamickými vlastnostmi. Tyto rovnice se aplikují mimo jiné i na iontové kapaliny (IK), jejichž neobvyklé chování testuje prediktivní schopnosti tohoto modelu. V rámci PC-SAFT se přitom k popisu iontového páru IK používají dva odlišné přístupy, které se liší v popisu náboje IK. Jeden na iontový pár pohlíží přirozeně jako na dvě opačně nabitě částice vázané Coulombickou interakcí, kdežto ve druhém se pár popisuje jako elektroneutrální celek. Tyto dvě metody však nejsou v literatuře příliš srovnávány. Ve své připravované bakalářské práci si proto kladu za cíl výpočetně otestovat tyto dva přístupy a určit jejich přednosti a slabiny, a to na základě porovnání modelových a experimentálních dat. V tomto příspěvku budu prezentovat dosavadní dílčí výsledky pro elektroneutrální variantu, a také nastíním plán dalšího postupu.

Detekce vůní na kůži pomocí vibrační spektrometrie

Zuzana Kočiščáková (B3)

Školitel: Ing. Adéla Jenišťová

Koža ako najväčší ľudský orgán vytvára hranicu medzi vnútorným a vonkajším prostredím. Chráni nás pred fyzikálnymi, chemickými a mikrobiálnymi vplyvmi, či slnečným žiarením. Hlavnú úlohu tejto ochrany plní vrchná vrstva kože – pokožka, ktorá je tvorená ďalšími štyrmi vrstvami, líšiace sa štruktúrou a polohou. *Stratum corneum*, najvrchnejšia časť pokožky, predstavuje hlavnú prekážku pri prestupe látok kožou, a to vďaka štruktúrnemu usporiadaniu korneocytov obklopených lipidovým matrixom, ktorý pozostáva najmä z ceramidov, voľných mastných kyselín a cholesterolu. Aplikovaním látok na kožu dochádza k ich penetrácii do rôznych hĺbok, v závislosti od svojho zloženia. Práca sa zaoberá interakciou vrstvy *stratum corneum* so vzorkami vôní na prasacej koži detegovanou pomocou infračervenej spektroskopie. Touto neinvazívnou technikou je možné sledovať štruktúrne zmeny vyvolané vôňou v priebehu časového intervalu, počas ktorého dochádza k postupnému uvoľňovaniu zložiek vône. Kinetika vstrebávania je spracovaná predovšetkým pomocou viacrozmerných štatistických metód.

Teoretické výpočty termodynamických vlastností vybraných farmaceuticky aktivních látek ve stavu ideálního plynu

Veronika Kostková (B2)

Školitel: Ing. Ctirad Červinka, Ph. D.

Charakteristiky léčiv, jako jsou stabilita, rozpustnost, rychlost rozpouštění nebo tvorba polymorfů, souvisí s termodynamickými vlastnostmi daných sloučenin a je důležité je znát a případně optimalizovat pro správný účinek farmaceutického produktu. Tyto charakteristiky se čím dál častěji určují pomocí teoretických výpočtů na místo experimentů. Tato práce popisuje postup při výpočtech entalpie a tepelné kapacity tří vybraných farmaceuticky aktivních látek, 1,8-dihydroxyanthrachinonu, sulfathiazolu a flufenamové kyseliny, ve stavu ideálního plynu. Pro nalezení stabilní geometrie a výpočet energií molekuly byla použita metoda teorie funkcionálu hustoty (DFT). Pomocí modelu tuhého rotoru-harmonického oscilátoru (RRHO) byly získané momenty setrvačnosti a vibrační frekvence molekuly a následně s použitím vztahů statistické termodynamiky byly spočtené již řečené termodynamické vlastnosti, které budou v další práci využity pro popis sublimace.

Adsorpční rovnováhy simulantů bojových chemických látek - vývoj vysoce adsorbujících ochranných pomůcek

Ivana Malá (B3)

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

Vývoj vysoce adsorbujících ochranných pomůcek je podmíněn vývojem adsorbentů a jejich charakterizací. Předmětem práce je charakterizace čtyř adsorbentů, potenciálně vhodných pro výrobu textilních kompozitů: aktivní uhlí, přírodní vermikulit nasycený sodnými ionty (Na - VMT), vermikulit modifikovaný surfaktantem HDTMA (hexadecyltrimethylamonium bromid) a textilní kompozit s vermikulitem (Na-VMT), dodanými spolupracujícím pracovištěm (Mgr. Ph.D. Jakubem Vaňkem, SÚJCHBO). Byla studována adsorpce par cyklohexanu, který je adsorptivem umožňujícím určení specifického povrchu, a dimethylmethylfosfonátu (DMMP), který je simulantem bojových chemických látek sarin a soman. Adsorpce par byla měřena gravimetrickou metodou při 30 °C. Adsorpční izotermy byly typu II a III podle charakterizace IUPAC a byly parametrizovány pomocí modelu GAB (model dle Guggenheima, Andersona a de Boera). Vermikulit modifikovaný HDTMA vykazoval izotermu typu III pro cyklohexan a typu II pro DMMP, což potenciálně umožňuje vývoj pomůcek specificky adsorbujících DMMP a nervově paralytické látky a prakticky neadsorbující běžné látky (cyklohexan). Dále byla pro látku DMMP vypočtena hodnota plochy adsorbované molekuly (angl. cross-sectional area), která není v literatuře dostupná.

Spektro-foto-elektrochemické studium vybraných derivátů flavinu pro využití ve fotokatalýze

Jan Svoboda (B3)

Školitel: prof. RNDr. Jiří Ludvík, CSc.

Deriváty flavinu jsou přírodní látky, které vystupují v řadě fotokatalytických procesů, zřejmě nejznámějším příkladem je riboflavin, známý též jako vitamin B2. Redukcí a následnou excitací světlem viditelných vlnových délek vznikají z derivátů flavinu „long-lived“ excitované stavy, které se chovají jako extrémně silná redukční činidla (redukční potenciál na úrovni sodíku). Těchto vlastností bychom mohli potenciálně využít pro provedení řady, jinak těžko uskutečnitelných, reakcí. Cílem dlouhodobějšího projektu je charakteristika vybraných derivátů flavinu pomocí elektrochemických a spektroskopických metod, využití těchto poznatků pro generování extrémně silných redukčních činidel *in situ* a následně provedení modelových reakcí. Spojením elektrochemické redukce a fotochemické excitace s následným získáním produktů v jedné reakční cele by došlo k výraznému ušetření času, množství rozpouštědel a celkových nákladů na provedení těchto reakcí. V tomto příspěvku jsou shrnuty dosavadní výsledky elektrochemické charakteristiky látek a provedení zkušebních modelových reakcí (redukce arylhalogenidů). Jako modelové látky byly vybrány deriváty isoalloxazinu a alloxazinu, které mohou mít, díky této metodě, potenciál účastnit se takových reakcí jako je např. „Birchova redukce.“

Thermodynamic study of selected terpenoids

Adam Zalčák (B3)

Školitel: Ing. Vojtěch Štejf, Ph.D.

Aim of this work was to obtain reliable thermodynamic and phase-behaviour data for selected terpenoids in order to enable development of complex environmental models describing evaporation and fate of terpenes and terpenoids in the atmosphere. The following three derivatives of α -pinene were selected: myrtenol, myrtenal, and *trans*-sobrerol, for which the mentioned data are scarce in the literature. The liquid samples were dried by molecular sieves, stored in fridge, and manipulated under a dry nitrogen atmosphere. Vapour pressures of the selected terpenoids were determined using two static apparatus in a combined temperature range from 238 to 363 K. Purity of the compounds was determined using gas chromatography before and after the thermodynamic measurements to evaluate sample contamination or possible decomposition occurring during the experiments. Heat capacities of the samples were determined by Tian-Calvet calorimetry in the temperature range from 261 to 353 K. Phase change data (melting temperature, fusion enthalpy, crystallization temperature, and potential polymorphic behaviour) were obtained by Heat-flux calorimetry. Finally, the influence of the number and polarity of functional groups on the thermodynamic properties of the substances is discussed.

Fyzikální chemie II

KOMISE

doc. Mgr. Alexandr Malijevský, Ph.D. DSc. (předseda)

Ing. Martin Klajmon, Ph.D.

RNDr. Eva Muchová Ph.D.

PROGRAM

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

Chemie a fotochemie aminokyselin na ledových částicích

09:20 [Martin Crhán](#) (B3, prof. Mgr. Pavel Jungwirth, CSc., DSc.)

Computational investigation of optical spectrum of solvated electron in liquid ammonia

09:40 [Karolína Fárníková](#) (B1, Mgr. Ing. Eva Krupičková Pluhařová, Ph.D.)

Molekulové simulace pohybu víčka mutantů lipázy CALB

10:00 [Petr Linhart](#) (B2, RNDr. Michal Kolář, Ph.D.)

Analýza molekulové dynamiky pomocí jazyka Python

10:20 [Lukáš Marek](#) (B2, prof. RNDr. Jiří Kolafa, CSc.)

Zahřívání roztoku solanky v mikrovlnném záření

10:40 [Hugo Mc Grath](#) (B3, RNDr. Michal Kolář, Ph.D.)

Studium interakce peptidové deformylázy s povrchem ribozomu metodami výpočetní biochemie

11:00 [Tomáš Ovad](#) (B3, prof. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.)

Electron-impact decomposition of SF₆-replacement dielectric gas: C₄F₇N

Chemie a fotochemie aminokyselin na ledových částicích

Marie Berešová (B3)

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

Práce se zabývá teoretickým modelováním stability a fotochemie aminokyselin, především glycinu, na astrochemických ledových částicích. Práce je motivována novými daty získaných kosmickými sondami na kometách; pro interpretaci těchto dat je důležité porozumět fotochemii a stabilitě aminokyselin na ledových částicích a ve vodě. Ve své práci v první fázi studuji pomocí kvantově chemických metod stabilitu aminokyselin glycinu a alaninu v různě protonovaných formách v závislosti na stupni hydratace. Dále bude práce pokračovat fotochemií aminokyselin a studiem vlivu solvatace na fotochemii. Poté budou simulovány fotochemické procesy na ledových částicích, pro jejich studium předpokládám model typu QM/MM, který ale bude nutné navrhnout a testovat.

Computational investigation of optical spectrum of solvated electron in liquid ammonia

Martin Crhán (B3)

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

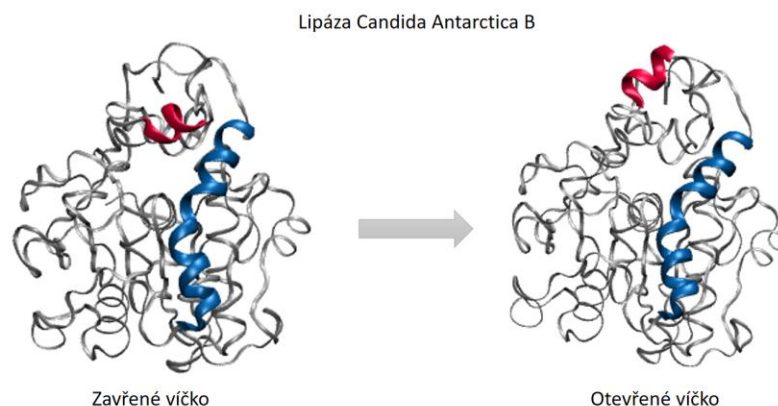
One of the most interesting properties of liquid ammonia is its ability to dissolve alkali metals, producing solutions of a fine blue color. This blue color has been ascribed to excitations of free solvated electrons, which reside in solvent cavities. These solutions, due to their highly unorthodox nature - containing a solute of purely quantum-mechanical nature, have historically been a target of great scientific interest. We sought to obtain a quantitative description of the optical spectrum using calculations employing the time-dependent density functional theory. First, we considered cluster systems in implicit solvent, which we previously used to quantitatively reproduce vertical detachment energies of solvated electrons. We found that these systems were insufficient to properly describe the spectrum, due to the highly diffuse nature of the excited states. We solved this by considering larger numbers of explicit molecules, and replacing the implicit solvent by additional classical mechanical molecules, described by a force field. Conventional approximate hybrid exchange-correlation functionals were also found to be unsuitable for calculating the optical spectrum. We explored a possible solution to this - employing non-empirically tuned range-separated hybrid functionals.

Molekulové simulace pohybu víčka mutantů lipázy CALB

Karolína Fárníková (B1)

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

Lipáza je enzym ze skupiny hydrodláz, jehož přirozenou funkcí je rozklad tuků. Kromě toho ale nachází i využití v průmyslových procesech jako katalyzátor, a to nejen ve vodném prostředí, ale i v organických rozpouštědlech. Nejvyšší aktivitu vykazují lipázy na fázovém rozhraní tuku a vody, což se vysvětluje přítomností amfifilní smyčky – tzv. víčka v blízkosti aktivního místa. Na fázovém rozhraní dojde působením hydrofóbních interakcí ke změně konformace víčka, které následně odkryje aktivní místo s katalytickou triádou aspartát-histidin-serin. Víčko různých lipáz se liší velikostí i primární strukturou. Mutacemi lze ovlivňovat různé vlastnosti daného enzymu, např.: termostabilitu nebo aktivitu. Otvírání víčka je mimo jeho strukturu dané i rozpouštědlem, ve kterém se nachází. Tato práce se zaměřuje na lipázu *Candida Antarctica B* (CALB), její přírodní formu a mutanta CALB-*G.zeae*. Pohyb víčka u těchto dvou systémů byl studován v třech rozpouštědlech, a to vodě, toluenu a acetonitrilu, pomocí metod klasické molekulové dynamiky. Výsledkem práce je kvantifikování kontaktů aminokyselin helixů $\alpha 5$ a $\alpha 10$, které tvoří víčko, a předběžný profil volné energie otevírání víčka.



Analýza molekulové dynamiky pomocí jazyka Python

Petr Linhart (B2)

Školitel: RNDr. Michal Kolář, Ph.D.

Molekulové simulace jsou rozsáhlý obor fyzikální chemie zabývající se pohybem atomů a molekul v daném silovém poli. Možnosti využití tohoto oboru jsou velice široké. Samotné simulace nám ale neposkytnou odpovědi, k tomu potřebujeme umět interpretovat výsledek: to je úkolem analýzy dat. Výborným nástrojem pro analýzu simulací je jazyk Python, který nabízí specializované knihovny jako MDAnalysis. V této práci se zabývám využitím této knihovny na analýzu a interpretaci výsledků simulací dvou peptidů: dekaalaninu a dekaglutaminu.

Zahřívání roztoku solanky v mikrovlnném záření

Lukáš Marek (B2)

Školitel: prof. RNDr. Jiří Kolafa, CSc.

Zahřívání pomocí mikrovlnného záření v mikrovlnné troubě se běžně vysvětluje pomocí dielektrických ztrát způsobených rotací molekul vody. Méně se mluví o vlivu iontů. V této práci studuji rozdíl rychlosti zahřívání mezi čistou vodou a roztoky NaCl (1M a 2M) pomocí molekulové simulace. Proměnné elektrostatické pole mělo frekvenci 2.45 GHz používanou v mikrovlnných troubách a amplitudy intenzity v rozsahu 30 MV/m až 70 MV/m. Zjištěná rychlost zahřívání závisí na koncentraci soli, což jsem potvrdil i skutečným experimentem, který zahrnoval zahřívání vody a roztoků o stejných koncentracích v mikrovlnné troubě.

Studium interakce peptidové deformylázy s povrchem ribozomu metodami výpočetní biochemie

Hugo Mc Grath (B3)

Školitel: RNDr. Michal Kolář, Ph.D.

Proteiny jsou zásadními stavebními kameny všech živých organismů. Rodící se proteiny musí zpravidla projít řadou kotranslačních a posttranslačních modifikací, aby mohly zaujmout správnou prostorovou konformaci a správně plnit svou funkci. U eubakterií je jednou z těchto modifikací odštěpení N-formylmethioninu z nascentního proteinu a prvním krokem této modifikace je odštěpení formylu. To umožňuje enzym peptidová deformyláza (PDF). Katalytické místo PDF je předmětem zájmu pro výzkum nové třídy antibiotik, protože PDF hraje zásadní roli v metabolismu eubakterií. Méně prozkoumaná je však interakce PDF s povrchem ribozomu. PDF s ribozomem interaguje přes svůj C-terminální α -helix. Interaguje převážně s ribozomálním proteinem uL22, který zasahuje dlouhou fibrilární částí až do ribozomálního tunelu. Jedním z cílů této práce je pomocí atomistických počítačových simulací prozkoumat, zda-li interakce uL22 s C-terminálním helixem PDF způsobí přenos allosterického signálu do ribozomálního tunelu. Dalším cílem je porovnat stabilitu C-terminálního helixu samotného a na povrchu ribozomu. Analýza hlavních komponent a RMSF naznačuje, že rozdíl v chování uL22 je velmi malý. RMSF a Ramachandranovy diagramy naznačují, že C-terminální helix je interakcí s ribozomem mírně stabilizován.

Electron-impact decomposition of SF₆-replacement dielectric gas: C₄F₇N

Tomáš Ovad (B3)

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

Since 1960s, SF₆ has been extensively used as an insulation medium in switchgears and transmission lines. However, the global warming potential of SF₆ is 22,500 higher than that of CO₂. The worst case scenario predicts SF₆ emissions to account for a 0.03 °C global average temperature rise by 2100. Therefore, there is an urgent need to replace it by more environmentally-friendly media. Perfluoroisobutyronitrile (C₄F₇N, Novec 4710) is one of the most promising candidates, thanks to a high dielectric strength as well as a low boiling point. For a wider implementation, a detailed knowledge of its interaction with free electrons is crucial. In this project, we focus on electron-induced decomposition of C₄F₇N yielding neutral fragments. Firstly, we studied the minimal geometry excitations with *ab initio* methods and TDDFT. Secondly, we simulated electron energy loss spectra, using the nuclear ensemble approach. Finally, we aim to study potential fragmentation pathways using methods of nonadiabatic dynamics, based on electronic structure methods (TDDFT, CASSCF, OM3, FOMO–CASCI). Having obtained preliminary results, we are now planning an analysis with a higher number of trajectories at the FOMO–CASCI level, in order to obtain probability distribution of the electron excitation outcomes.

Fyzikální chemie III

KOMISE

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

Ing. Marek Lanč, Ph.D.

Dr. Ing. Pavel Vrbka

Ing. Martin Růžička (ÚFCH, UNIPETROL RPA)

Ing. Marcela Tkadlecová, CSc. (ÚFCH, Zentiva)

PROGRAM

09:00 [Bc. Dominik Bubák](#) (M1, RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.)

Competitive and cooperative interactions in aqueous urea-betaine solutions

09:20 [Bc. Vojtěch Jeřábek](#) (M1, doc. Ing. Karel Řehák, CSc.)

Fázové rovnováhy v systémech obsahujících organické karbonáty

09:40 [Bc. Barbora Kocábková](#) (M1, Dr. Ing. Pavel Vrbka)

Re-examination of Limiting Activity Coefficients of Ethyl tert-Butyl Ether in Aqueous Sodium Nitrate

10:00 [Bc. Štefan Kocian](#) (M1, Ing. Vojtěch Štejf, Ph.D.)

Termodynamické vlastnosti a fázové chování iontových kapalin založených na přírodních látkách

10:20 [Bc. Ivan Kopal](#) (M1, Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.)

*Studium vlivu experimentálních podmínek na fotochemické reakce
4-aminobenzothioliu pomocí SERS spektroskopie*

10:40 [Bc. Jan Polena](#) (M1, doc. Ing. Ondřej Vopička, Ph.D.)

*Polychloropren jako materiál potenciálně vhodný pro pervaporační dělení obtížně
separovatelných směsí*

11:00 [Bc. Petr Touš](#) (M1, Ing. Ctirad Červinka, Ph. D.)

Theoretical study of local disorder in crystals of carboxylic acids

Competitive and cooperative interactions in aqueous urea-betaine solutions

Bc. Dominik Bubák (M1)

Školitel: RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.

Osmolytes, small molecules, are used by living organisms to control the solubility and structure of complex biomolecules e.g. proteins. Two groups of osmolytes are available, denaturing agents, such as urea or small alcohols, and protecting agents, e.g. TMAO, betaine etc. Naturally the cell environment is a complex mixture of various osmolytes. TMAO, the strongest natural osmoprotectant is employed by deep sea fish to compensate for the enormous hydrostatic pressure (Yancey, Gearing et al. 2014). Interestingly, TMAO is able to counteract the denaturing ability of urea, and their mixtures attracted recently joint experimental and theoretical research (Ganguly, Polák et al. 2020), aiming the understanding of origins and mechanism of this counteraction. Betaine, chemically similar to TMAO, is more abundant in plants (Giri 2011) and is also able to counteract denaturing effect of urea, yet the mechanism of action is unknown. In this work, we have employed the apparatus of Kirkwood-Buff inversion to perform thermodynamic analysis of urea-betaine-water mixtures. We quantified the true pair interactions in the mixed solution, so called Kirkwood-Buff integrals, which will be used by our collaborators for force-field calibration and microscopic insight.

Fázové rovnováhy v systémech obsahujících organické karbonáty

Bc. Vojtěch Jeřábek (M1)

Školitel: doc. Ing. Karel Řehák, CSc.

Organické karbonáty v současné době nacházejí různé praktické uplatnění. Používají se při organických syntézách, v elektrotechnice nebo jako tzv. zelená rozpouštědla. Z důvodu jejich širokého použití je žádoucí znát jejich chování ve směsích. V rámci této práce byla experimentálně stanovena rovnováha kapalina–kapalina v systému propylen karbonát + voda a kapalina–pevná fáze v systému ethylen karbonát + voda. Pro získání experimentálních dat bylo použito kombinace přímé analytické metody a zákalové metody. Získané výsledky objasnily doposud sporná literární data a posloužily k vytvoření termodynamického popisu uvedených binárních systémů. Pro oba systémy byly vyhodnoceny parametry NRTL rovnice. U systému propylen karbonát + voda byla provedena regrese experimentálních dat rovnováhy kapalina–kapalina rozšířenou škálovací rovnicí (ESL). Tím byl získán věrohodný popis binodální křivky v okolí kritického bodu a jeho souřadnice. Pro systém ethylen karbonát + voda byla rovněž experimentálně stanovena závislost dodatkového objemu na složení. Ta byla následně popsána Redlichovým-Kisterovým rozvojem.

Re-examination of Limiting Activity Coefficients of Ethyl tert-Butyl Ether in Aqueous Sodium Nitrate

Bc. Barbora Kocábková (M1)

Školitel: Dr. Ing. Pavel Vrbka

Based on a huge deviation from other solubility data measured in our laboratory, the dependency of limiting activity coefficients of ethyl *tert*-butyl ether in aqueous sodium nitrate solutions was re-measured. All experiments were conducted at 298 K, values of limiting activity coefficients were obtained through Inert gas stripping method. The Setchenow constant was evaluated from the dependency and compared with values gained for different salts. New results exhibit significantly better accordance with the rest of the data for solubility of ETBE and other volatile compounds in various salts solutions.

Termodynamické vlastnosti a fázové chování iontových kapalin založených na přírodních látkách

Bc. Štefan Kocian (M1)

Školitel: Ing. Vojtěch Štejfa, Ph.D.

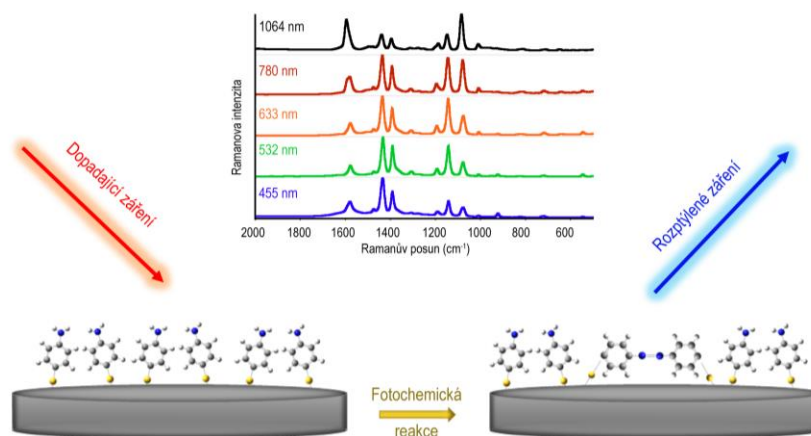
Iontové kapaliny mají široké potenciální uplatnění, což jim v dnešní době zaručuje značnou popularitu. Primárně jsou používány jako rozpouštědla s téměř nulovými tlaky nasycených par. Většina běžně průmyslově používaných iontových kapalin obsahuje ekologicky nepříliš šetrné perfluorované anionty. V této práci byly studovány termodynamické vlastnosti látek, které by mohly sloužit jako náhrada k průmyslově používaným iontovým kapalinám a zároveň byly přírodně nezávadné. Studovanými látkami byly čtyři komerční vzorky obsahující cholin a syntetizované vzorky: cholin nitrát, sedm nitrátů aminokyselin a pět vzorků kombinujících cholin s aminokyselinami jako anionty. Pro všechny látky byly v rozsahu 270–350 K pomocí kalorimetru typu Tian-Calvet naměřeny tepelné kapacity, pro které v literatuře neexistují žádná data. Výsledky fázového chování, studovaného pomocí diferenčního skenovacího kalorimetru, byly porovnány s dostupnou literaturou, která je pro zpracovávané látky velmi vzácná. Zároveň byly z kalorimetrických experimentů stanoveny čistoty studovaných látek a termální stabilita většiny vzorků. Pro lepší porozumění polymorfismu studovaných látek byla studie doplněna o externě provedená teplotně závislá měření rentgenové práškové difrakce.

Studium vlivu experimentálních podmínek na fotochemické reakce 4-aminobenzenthionu pomocí SERS spektroskopie

Bc. Ivan Kopal (M1)

Školitel: Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.

Stále dynamičtější rozvoj povrchem zesílených spektroskopí je nutně doprovázen potřebou přípravy inovativních substrátů, jejichž použitelnost je testována za užití vhodného modelového analytu. Hojně využívanou látkou je 4-aminobenzenthionol (4-ABT), a to především z důvodu svých dobrých optických vlastností a adsorpčním schopnostem na povrch plasmonických substrátů. Vlivem dopadajícího záření může ovšem docházet k fotochemické dimerizaci 4-ABT, což je jistou komplikací právě při testování nových substrátů. Dosud však nebylo publikováno mnoho studií, které by se zaměřovaly na důsledné porovnání hlavních reakčních proměnných. Proto je jistě žádoucí posoudit, v jaké míře k této reakci dochází při aplikaci nejčastěji používaných plasmonických kovů a jakou roli v reakční kinetice zastává použitá excitační vlnová délka. V rámci této práce byly za účelem sledování fotochemické reakce připraveny velkoplošné substráty, na které byl deponován 4-ABT. Tyto substráty byly následně charakterizovány za pomoci optické a elektronové mikroskopie. Dále byla měřena povrchem zesílená Ramanova spektra deponovaného analytu na připravených Ag, Au a Cu površích s využitím různých excitačních vlnových délek (455, 532, 633, 780 a 1064 nm), na jejichž základě byla zhodnocena tendence 4-ABT dimerizovat.



Polychloropren jako materiál potenciálně vhodný pro pervaporační dělení obtížně separovatelných směsí

Bc. Jan Polena (M1)

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

Předmětem práce je studium pervaporačních charakteristik membrán na bázi síťovaného polychloroprenu v souvislosti s pervaporačním dělením klasickými metodami obtížně dělitelných směsí látek, tj. směsí látek blízko-vroucích a tvořících azeotropické směsi. Součástí práce jsou vývoj metodiky měření pervaporace velmi těžkavých látek, kalibrace analyzátoru a optimalizace membránových materiálů na bázi síťovaného polychloroprenu s použitím síťovadel v běžné práškové formě a ve formě nanočástic. K základní charakterizaci membrán bylo použito zejména měření tepelných, mechanických a strukturních vlastností materiálů (DMA, TGA, SEM, FTIR-ATR). Separační vlastnosti membrán byly studovány pro dvojice látek s nízkým dipólovým momentem, dichlormethan-cyklopentan a methylal-cyklopentan, a pro dvojice látek s vysokým, dipólovým momentem, methanol-acetonitril, které tvoří těžké azeotropy. První tři uvedené látky jsou v průmyslu používány při zpěňování polymerů a jako chladiva, methylal je potenciální náhradou ekologicky problematického dichlormethanu; směsi methanolu a acetonitrilu jsou používány v kapalinové chromatografii. Připravené membrány umožňovaly dělení azeotropů. Použitá metodika dále umožňuje detailní studium transportu průmyslově relevantních nadouvadel v polymerech.

Theoretical study of local disorder in crystals of carboxylic acids

Bc. Petr Touš (M1)

Školitel: Ing. Ctirad Červinka, Ph. D.

Routine X-ray diffraction crystallographic studies of solid compounds often fail to determine the exact positions of certain light atoms (e. g. hydrogen). As a result, positions of these atoms within a crystal structure, labelled experimental, can be more-or-less guessed. In certain crystals, there is a possibility of a proton transfer reaction, which can take place even at low temperatures due to quantum tunnelling. In these systems, the local disorder of such protons becomes even more of an issue. One such group of compounds are carboxylic acids, where carboxyl groups form hydrogen-bonded dimers (or more complex chain structures) with correlated proton positions. In the crystalline phase, some configurations of hydrogen atoms can be more favorable in terms of energy than others, which may (not) be reflected in the available experimental data. The aim of this paper is to explore the energy aspects and the dynamics of the local proton disorder in crystals of four organic compounds (benzoic acid, terephthalic acid, cubanecarboxylic acid and 1,4-cubanedicarboxylic acid) using quantum-chemical calculations. These calculations use the improved dimer method and utilize the density functional theory with the PBE-D3/PAW level of theory for evaluations of crystal structure energies.

Fyzikální chemie IV

KOMISE

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

Ing. Ctirad Červinka, Ph.D.

RNDr. Michal Kolář, Ph.D.

PROGRAM

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

Teoretický popis ionizace aromatických aminokyselin

09:20 [Bc. Josef Filgas](#) (M1, prof. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.)

Fotochemie hypervalentních sloučenin jodu

09:40 [Bc. Jiří Janoš](#) (M1, prof. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.)

Ultrafast Photodynamics of Bilirubin Dipyrrinone Subunit: Non-adiabatic Simulations of Isomerization and Cyclization

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

Excitované stavy za vysokého tlaku: QM/MM modelování

10:20 [Bc. Vojtěch Košťál](#) (M2, prof. Mgr. Pavel Jungwirth, CSc., DSc.)

Stable Benzene Radical Anion as an Intermediate in the Birch Reduction

10:40 [Bc. Adam Šrut](#) (M2, RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.)

Computational insight into intersystem crossing of rhenium complex at sub-ps timescale

Teoretický popis ionizace aromatických aminokyselin

Bc. Monika Brožíková (M2)

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

V biologických systémech hrají aminokyseliny důležitou roli jakožto stavební prvky proteinů a dalších peptidických látek. Aromatické aminokyseliny navíc poskytují díky specifickým redoxním vlastnostem přirozenou obranu proti poškození DNA vlivem ionizujícího záření. Experimentálně lze ionizaci molekul velmi dobře zkoumat s využitím fotoelektronové spektroskopie. Tato metoda tradičně poskytuje data pro molekuly v plynné fázi za vysokého vakua. S rozvojem metod kapalných mikrotrysek se však otevřela cesta i k fotoemisním měřením ve vodných roztocích. K detailnímu pochopení a interpretaci získaných dat je však nezbytné experiment kombinovat s teoretickým popisem. Ve své práci se zaměřuji na výpočet ionizačních energií aromatických aminokyselin fenylalaninu, tryptofanu a tyrosinu v plynné fázi i ve vodném roztoku. Zkoumám také specifické změny v ionizaci vlivem solvatace. Získané výsledky využívám k interpretaci experimentálních dat.

Fotochemie hypervalentních sloučenin jodu

Bc. Josef Filgas (M1)

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

Značení proteinů je velmi užitečným nástrojem pro studium jejich funkce a metabolických osudů v živých systémech. Jednou ze skupin látek, které lze k tomuto účelu použít, jsou sloučeniny hypervalentního jodu, zejména pak rodina látek zvaná Togniho činidla. Tato elektrofilní fluoralkylační činidla tvoří efektivní nástroj pro zavádění značek na nukleofilní a aromatické zbytky aminokyselin způsobem, který vykazuje ve fyziologickém prostředí vysokou stabilitu. Pro provedení reakce je ale potřeba reduktant, což činí překážku k aplikaci přímo v živých systémech. Nedávno však bylo zjištěno, že pro reakci Togniho činidla s některými aromatickými aminokyselinami, jako je např. tryptofan, není reduktant nutný – stačí modré světlo o vlnové délce 455 nm. Současně s tímto objevem pak vyvstala otázka: „Jakým mechanismem reakce probíhá?“, na kteroužto v této práci odpovídám. Obsahem předkládané práce je tedy studium fotochemie hypervalentních sloučenin jodu a popis mechanismu fluoralkylace tryptofanu Togniho činidlem. Mechanismus reakce zahrnuje excitaci Togniho činidla do disociativního excitovaného stavu a následnou reakci fluoralkylového radikálu s molekulou tryptofanu, přičemž se následnými procesy uvolní další molekula fluoralkylového radikálu uzavírající cyklus radikálového mechanismu.

Ultrafast Photodynamics of Bilirubin Dipyrrinone Subunit: Non-adiabatic Simulations of Isomerization and Cyclization

Bc. Jiří Janoš (M1)

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

Yellow pigment bilirubin appears in the body as the major product of the heme catabolic pathway. During the neonatal period, high concentrations of bilirubin may cause neonatal jaundice, which accounts for significant neonatal morbidity and mortality. Currently, blue-green light phototherapy is applied to transform bilirubin to more soluble products that are easily excreted from the body, e.g. lumirubin. The presented research was motivated by a series of experiments on bilirubin subunit measuring photoisomerization and photocyclization responsible for the formation of lumirubin. The goal of this work is to reveal the mechanism and timescales of transformations of bilirubin in the excited state and rationalize the wavelength dependence of quantum yields. The conformational space of the bilirubin subunit is carefully studied. Timescales of processes in the excited state are estimated by non-adiabatic molecular dynamics combining the newly reformulated Landau-Zener approach with semiempirical methods. The wavelength dependence is explained via the Non-Equilibration of Excited Rotamers principle.

Excitované stavy za vysokého tlaku: QM/MM modelování

Bc. Vojtěch Kopecký (M1)

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

Jednou z perspektivních oblastí chemie je chemie velmi vysokých tlaků. Významnou roli v rozvoji chemie vysokých tlaků hrají diamantové kovádky. Diamantové kovádky jsou přístrojem, který je schopný aplikovat na vzorek tlak obvykle kolem 100-200 GPa a studovat chování vzorku pomocí např. Mossbauerovy spektroskopie, Ramanovy spektroskopie případně jiných optických metod. Empiricky získané výsledky je často třeba vysvětlit teoreticky, což je metodicky značně náročné. V této práci se věnuji studiu modelového systému ethenu obaleného argonem při teplotě 85K. Tento systém simuluji metodou molekulové dynamiky k ustanovení rovnováhy na úrovni QM/MM. Na rovnovážném systému je dále studován vliv zvyšování tlaku. Díky metodám QM/MM je možno rozdělit systém na části simulované ve vysoké přesnosti kvantovou mechanikou a na části simulované nenáročnou molekulovou mechanikou, což je velmi efektivní zejména v systémech kde je zkoumaná molekula obalena rozpouštědlem. Na závěr se věnuji modelování takzvané electron spillout chyby. Ta je způsobena tím, že výpočet vzájemné interakce subsystémů zanedbává Pauliho repulzi a disperzní interakce. Práce je výhledem k dalšímu teoretickému studiu systémů za vysokých tlacích.

Stable Benzene Radical Anion as an Intermediate in the Birch Reduction

Bc. Vojtěch Košťál (M2)

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

The radical anion of benzene, an important organic intermediate in the Birch reduction in liquid ammonia, is found to be an unbound metastable resonance in the gas phase. On the other hand, spectroscopic measurements in solution and the high experimental yields of the Birch reduction both suggest a certain degree of stability of the solvated species. At the same time, our *ab initio* molecular dynamics simulations of the species in liquid ammonia show a localization of the excess electron on the aromatic solute which is a feature typically associated with bound electronic states. Here, we follow our previous investigation and provide direct insight into the stabilizing effect of the solvent by evaluating the electron binding energy in microsolvated cluster at the DFT level. We show a strong influence of the cluster size on the electron binding energy value that decreases below zero as soon as roughly ten solvent molecules are present. Converged binding energy in the bulk is initially accessed by employing implicit solvation and then alternatively by using the G_0W_0 approximation that also provides an insight into the complete electronic structure. Here, we discuss the resulting thermal density of states and its implications for potential photoelectron spectroscopy measurements.

Computational insight into intersystem crossing of rhenium complex at sub-ps timescale

Bc. Adam Šrut (M2)

Školitel: RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.

Ultrafast relaxation upon excitation of the singlet state of tris-carbonyl rhenium complex [Re(bpy)(CO)₃Cl] (bpy = bipyridine) was studied. Time-resolved experiments already described the dynamics of the relaxation processes, characters of the involved electronic states and suggested the role of solvent in the dynamical behavior of the system. Employing ab-initio molecular dynamics, which accounted for non-adiabatic effects, as implemented in the SHARC suite we have provided deeper insight into the photophysical processes in such an experiment. Despite a strong spin-orbit coupling (present in our simulation), we discuss the simulation results in terms of spin-free states. We present a kinetic model for the intersystem crossing and determine characters of involved states using an objective quantitative analysis of the wavefunction.

Ústav chemického inženýrství (409)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

doc. Dr. Ing. Pavlína Basařová

SEZNAM SEKČÍ

1. [Chemické inženýrství 1](#)
2. [Chemické inženýrství 2](#)
3. [Chemické inženýrství 3](#)
4. [Chemické inženýrství 4](#)
5. [Chemické inženýrství 5](#)
6. [Chemické inženýrství 6](#)
7. [Chemické inženýrství 7](#)
8. [Chemické inženýrství 8](#)

SPONZOŘI ÚSTAVU CHEMICKÉHO INŽENÝRSTVÍ I

ZeNTIVA



Lonza

Kapaji
3 Independent
Guys

synthos
chemical innovations



LOVOCHEMIE a.s.
LOVOSICE 




CHEMOPROJEKT

VWRTM
part of avantor

Chemické inženýrství 1

KOMISE

prof. Ing. Igor Schreiber, CSc. (předseda)

Ing. Zdeněk Grof, Ph.D.

Ing. Jakub Crha

Ing., Dr. rer. nat. Jiří Svoboda, Ph.D. (Kapaji)

PROGRAM

08:30 [Terezie Císařová](#) (B2, Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D.)

Modifikované liposomy jako nový potenciální nosič léčiv

08:50 [Kryštof Majer](#) (B2, doc. Dr. Ing. Milan Jahoda)

Aplikace fotogrammetrie v bezpečnostním inženýrství za účelem získání 3D modelů zkoumaných objektů

09:10 [Islam Baigaliyev](#) (B3, Ing. Viola Tokárová, Ph.D.)

Příprava nanostrukturovaných povrchů přímou replikací povrchů přírodních materiálů

09:30 [Jan Duras](#) (B3, RNDr. Ivan Řehoř, Ph.D.)

Modular Hydrogel Microrobots

09:50 [Jan Halberštát](#) (B3, Ing. Viola Tokárová, Ph.D.)

Non-enzymatic detachment of mammalian cells using structured surface

10:30 [Zuzana Hlavačková](#) (B3, Ing. David Zůza)

Manufacturing of personalised medicines by impregnation of mesoporous silica tablets

10:50 [David Horký](#) (B3, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)

Effect of polymer surface inhomogeneities on charge transfer

11:10 [Michal Jankovský](#) (B3, Ing. Petr Stavárek, Ph.D.)

Selektivní katalytická oxidace v mikroreaktoru s meandrujícím kanálkem

11:30 [Kateřina Kleinová](#) (B3, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)

Preparation of alginate micro particles by electrospraying

Modifikované liposomy jako nový potenciální nosič léčiv

Terezie Císařová (B2)

Školitel: Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D.

Liposomy jsou jednou z užívaných forem transportu látky v organismu. Jedná se o kulovité váčky tvořené fosfolipidovou membránou. Membrána liposomů je zcela biokompatibilní, což je jednou z výhod tohoto způsobu přepravy látek. Membrány s dosud užívaným složením jsou však schopny v liposomech udržet jen některé z účinných látek. Lipidickou membránu je tudíž vhodné modifikovat například přidáním některých vzácnějších fosfolipidů, které se objevují například u některých bakterií, jejichž membrány fungují i v extrémnějších podmínkách. To může slibovat i nižší propustnost vůči některým látkám. Cílem práce je připravit a charakterizovat liposomy obsahující vzácnější fosfolipidy z přírodně získaného materiálu. Jelikož je biotechnologický proces získávání takovýchto fosfolipidů zdlouhavý a obecně poskytuje malé výtěžky, byla v rámci projektu nejprve provedena studie vlivu koncentrace standardních fosfolipidů na tvorbu liposomů. Výsledky budou použity pro design dalších experimentů už s dalšími fosfolipidy. Také byly provedeny pilotní experimenty s přírodními fosfolipidy pro pokus o získání vesicul, výsledné útvary byly charakterizovány pomocí TEM, DLS a optické mikroskopie.

Aplikace fotogrammetrie v bezpečnostním inženýrství za účelem získání 3D modelů zkoumaných objektů

Kryštof Majer (B2)

Školitel: doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

Velmi důležitou součástí bezpečnostního inženýrství je modelování šíření plynů (mnohdy hořlavých nebo toxický) kolem zkoumaného objektu. Pro simulace šíření je podstatné vytvořit geometrii daného objektu v dostatečně přesné míře pro věrohodný výsledek. Bohužel se stává, že získat takovýto model objektu není zcela triviální. Objektem může být například vozidlo v podzemní garáži nebo výrobní zařízení v provozu. K účelům získání geometrie těchto modelů byla prozkoumána možnost užití fotogrammetrie. Fotogrammetrie je metoda, která umožňuje pomocí fotografií objektu z různých úhlů zpětně zjistit hloubku jednotlivých pixelů a následně triangulací sestavit mračno bodů, které reprezentuje model. Mezi výhody této techniky patří její dostupnost a nedestruktivnost. Jelikož fotogrammetrie pracuje pouze na základě rozlišení barev z fotografií, její zásadním nedostatkem je rozlišení jednotvárných ploch a lesklých povrchů. Pro účel ověření použitelnosti za ztížených podmínek bylo modelováno osobní auto, které představuje velice obtížný objekt k zachycení. Nakonec je výsledný model porovnán s ručně vypracovanou verzí z hlediska náročnosti vypracování.

Příprava nanostrukturovaných povrchů přímou replikací povrchů přírodních materiálů

Islam Baigaliyev (B3)

Školitel: Ing. Viola Tokárová, Ph.D.

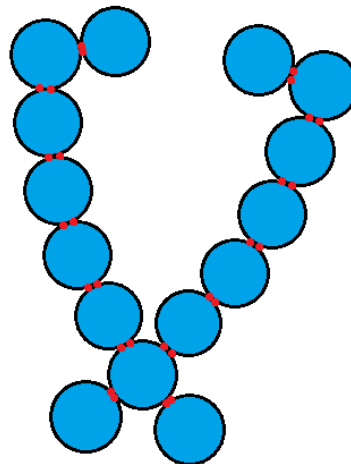
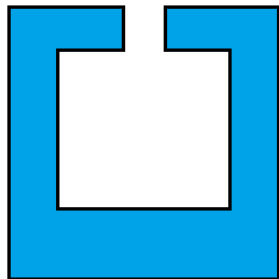
Příroda je šikovný inženýr, která vždy byla předobrazem vědeckých vynálezů. Příroda měla dost času na to, aby si mohla promyslet a provést úpravy ve svých technologiích. To, co vidíme teď, přešlo 4 miliardy let evoluce. Lidi se snaží využívat těchto principů a vědní obor, který se tím zabývá je známý jako biomimetika. Mnohé přírodní povrchy mají antibakteriální nebo samočisticí efekt, např. křídla hmyzů nebo povrchy listů některých rostlin. Známý je lotosový efekt - jev, který spočívá v hydrofobním povrchu lotosových listů, který odpuzuje vodu. Nečistoty se rozpouští ve vodě a opouští povrch. Dalším příkladem jsou křídla vážek a cikád, které mají antibakteriální efekt. Díky nanopilíčkům na jejich povrchu narušují bakteriální stěnu, a tím dochází k buněčné lýze. Tato práce se zabývá těmito povrchy a snaží se je replikovat do polymerní matrice. Cílem práce je vytvořit nanostrukturované repliky přírodních povrchů, zvolit nejvhodnější materiál pro replikace a nejvhodnější parametry pro přípravu. Dalším cílem bude analýza fyzikálních vlastností vytvořené kopie, zejména úhel smáčení a hystereze kontaktního úhlu. Měření budu provádět pomocí optického tenziometru a následně porovnávat výsledky s původním biologickým vzorkem.

Modular Hydrogel Microrobots

Jan Duras (B3)

Školitel: RNDr. Ivan Řehoř, Ph.D.

In my project I aim to make modular robots that could operate on a scale of just few micrometers. Conventional robotics use mainly electronics and programming to create robots that nowadays are able to do wide variety of tasks. However their designs are too complicated and thus are completely unsuitable for miniaturization. Our research group has already established that hydrogels, soft, squishy materials, are suitable candidates as the main building blocks for these microrobots. Recently a prototype of such microrobot has been introduced. It can do simple tasks like moving objects from one place to another. However so far a specific microrobot design is required for every single desired task. I aim to change that by exploring the idea of having one universal microrobot that could be used as a building block for basically any design we desire. This would greatly improve their overall modularity where instead of designing a specific microrobot we could just quickly assemble one on sight. In my experiments I use circular discs as a universal shape for creating larger structures. I also developed a method to chemically attach them to each other which works very similarly to a sewing machine or welding.



Non-enzymatic detachment of mammalian cells using structured surface

Jan Halberštát (B3)

Školitel: Ing. Viola Tokárová, Ph.D.

The presentation on topic “Non-enzymatic detachment of mammalian cells using structured surface” provides theoretical introduction into problematics of cell harvesting. In last decades, the utilization of stem cells in modern regenerative medicine is frequently discussed. The potential stretches from treatment of conditions like blindness or deafness over wound healing to cure of neurodegenerative diseases or diabetes. One of the requirements in stem cells research and treatment application is large amount of high-quality stem cells. In this presentation are pointed out difficulties connected with enzymatic cell harvesting and a possible non-enzymatic solution is propounded. Thermoresponsive polymer PNIPAM as a fascinating tool for cell harvesting is described and compared with other common cell harvesting techniques. The assumptions leading to main hypothesis “Thermoresponsive cell harvesting in combination with hierarchically structured surface enables harvesting of large number of non-damaged stem cells” are emphasized. Goals of the project are set and methods for the future experiments are implied.

Manufacturing of personalised medicines by impregnation of mesoporous silica tablets

Zuzana Hlavačková (B3)

Školitel: Ing. David Zůza

Current drug manufacture methods are based on large scale production with a few dosage strength variations. A new manufacturing method is needed to reach the patient-specific requirements for personalized medicine. The main idea of personalized medicine is that drugs are tailored to the individual patient using patient-specific information. Different ways of producing personalized medication are currently investigated, for example 3D print or drop-on-demand (DoD) technique. This work aimed to explore the effect and possible use of placebo tablets with silica particles to meet the patient-specific requirements for personalized medicine. The placebo tablets containing mesoporous silica were prepared to meet the manufacturing criteria such as hardness and friability. The tablets were filled layer-by-layer with a precise dose of API by drop-on-demand (DoD) technique, which is a liquid dosing system with validated precision (Figure 1). It was found that the number of layers affects the dissolution profile of the tablet. Thus, different dissolution profiles can be achieved. Overall, this method shows the potential to be used in personalized medicine, where various doses and specific dissolution profiles are needed to fit the patient's requirements.

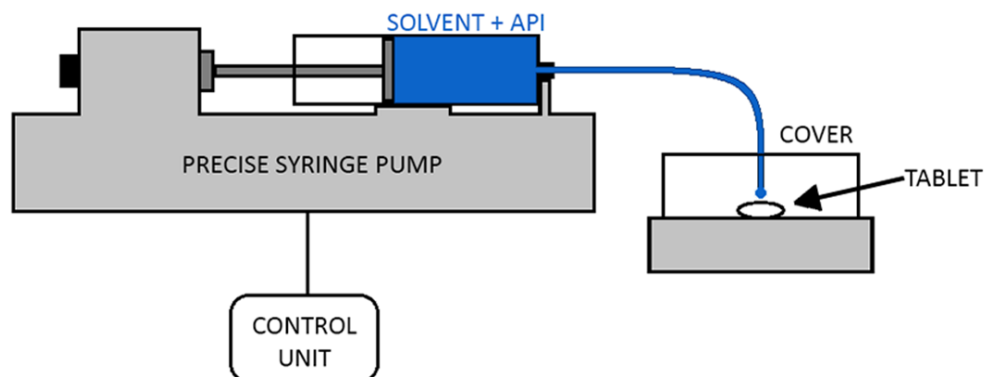


Figure 1: Scheme of the experimental set-up of the drop-on-demand technique.

Effect of polymer surface inhomogeneities on charge transfer

David Horký (B3)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

It is a well-known phenomenon, that after contact or friction between two polymers a static electricity is developed. For hundreds of years, it has been believed that polarity of charge is the material property and thus the surface of one polymer charges positively and the second negatively. However, because of surface inhomogeneities and asymmetrical friction, the charge creates a mosaic with both positive and negative spots on a surface. The aim of my work is to investigate the influence of surface inhomogeneities, on charge transfer. For this purpose, I use Atomic Force Microscopy (AFM) in two modes (KPFM – Kelvin probe force microscopy and Peak force - QNM). KPFM measures the topography of the surface and the surface potential, while PFQNM measures the adhesive forces on the surface using Force distance curves. Additionally, I also measured the effect of various external influences (e.g. temperature, pressure during contact/ friction of polymers, duration of contact or humidity) on charge transfer and dissipation. The knowledge gained in this work can be applied for example in triboelectric separation of plastics.

Selektivní katalytická oxidace v mikroreaktoru s meandrujícím kanálkem

Michal Jankovský (B3)

Školitel: Ing. Petr Stavárek, Ph.D.

V této práci se budeme zabývat optimalizací procesu katalytické oxidace v mikroreaktoru s meandrujícím kanálkem. Přesněji, budeme zkoumat výrobní proces kyseliny akrylové a možné zvýšení efektivity tohoto procesu pro průmyslové využití. Příprava kyseliny akrylové bude vedena ve dvojici mikroreaktorů, kde v jednom bude probíhat oxidace propylenu a v druhém oxidace akrylaldehydu. Výzkum tohoto procesu je možný pomocí mikroreaktorů, které díky své specifické vnitřní struktuře nalézají mnoho výhodných aplikací v chemických procesech a mohou napodobit prostředí průmyslového reaktoru v laboratoři. Použití mikroreaktoru s meandrujícím kanálkem nám umožní mnohem přesněji měřit, zhodnotit a studovat jednotlivé aspekty výroby kyseliny akrylové.

Preparation of alginate micro particles by electrospaying

Kateřina Kleinov (B3)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Microcapsules are largely used in drug transportation, as they can be loaded with active pharmaceutical ingredients and transported within the lungs or other organs. There are several techniques to prepare these capsules. The electrospaying method is attractive because of its simplicity, along with cost, and material modesty. Moreover, monodisperse particles can be produced, and with the precise control of several factors, the final size of produced capsules can be adjusted for a specific use. Our work aims to optimize the most important factors that are affecting electrospaying, in order to deliver stable monodisperse particles on the scale of micro, and nanoparticles. Electrospaying of an alginate solution under increased voltage introduces Coulomb forces in droplets. Due to these forces, particles are destabilized and thus, divided into very small droplets. These droplets are deposited directly into the bath containing Ca^{2+} ions which are causing the entanglement of chains of the polymer and small gel capsules are formed. Here, we present the effect of concentration of both alginate and Ca^{2+} solutions, temperature, and different ways to entangle sprayed solution with the precipitant, and methods of how to effectively detect its size and morphology of produced particles.

Chemické inženýrství 2

KOMISE

doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D. (předseda)

Ing. Vojtěch Šálek

Ing. Marie Plachá

Ing. Marek Michalko (Chemoprojekt)

PROGRAM

08:30 [Lucie Kubíčková](#) (B3, Ing. Martin Isoz, Ph.D.)

Využití výpočetní mechaniky tekutin pro tvarovou optimalizaci ejektoru

08:50 [Vojtěch Kunc](#) (B3, Ing. Ondřej Kašpar, Ph.D.)

Příprava částic s architekturou jádro-slupka pro teplotně řízené vylučování hydrofobních látek

09:10 [Dominika Moravcová](#) (B3, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Obrazová analýza XRT snímků pro modelování mikrostruktury katalytických filtrů

09:30 [Kateřina Nyklíčková](#) (B3, Ing. Petr Stavárek, Ph.D.)

Hydrodynamická optimalizace náplně zkrápěných reaktorů pomocí 3D tisku

10:10 [Klára Odehnalová](#) (B3, Ing. Aleš Zdražil, Ph.D.)

Nanocomposites of silica nanoparticles and liposomes for targeted drug delivery

10:30 [Lucie Pilíková](#) (B3, doc. Dr. Ing. Pavlína Basařová)

Simulace tvaru bubliny ve vodě a slabě koncentrovaných roztocích jednoduchých alkoholů

10:50 [Matouš Polák](#) (B3, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Měření tlakových ztrát na katalytických filtrech pevných částic

11:10 [Martin Rompotl](#) (B3, Ing. Ondřej Kašpar, Ph.D.)

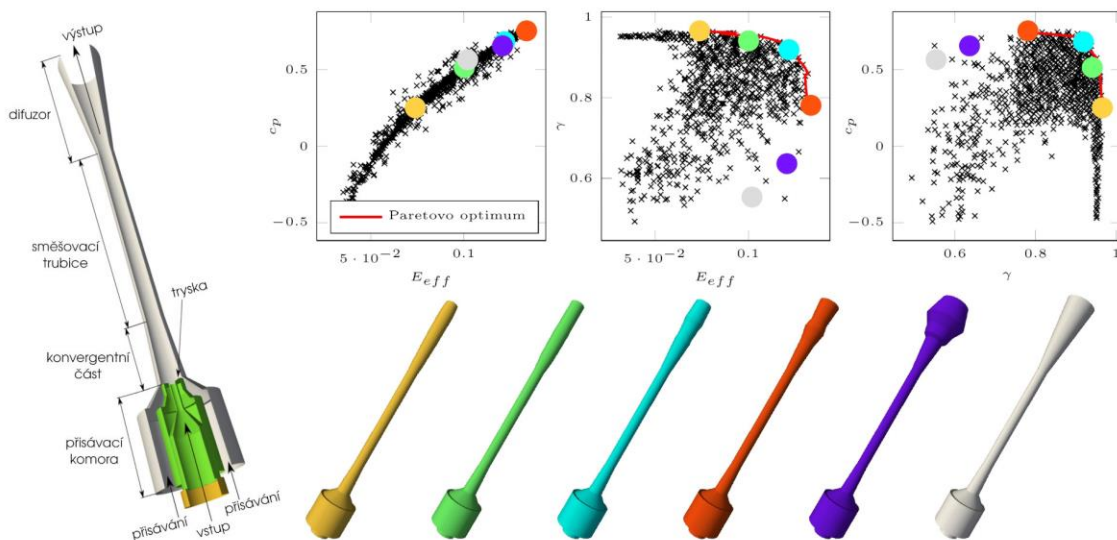
Příprava emulzí olej/voda pro rozprašovací sušení

Využití výpočetní mechaniky tekutin pro tvarovou optimalizaci ejektoru

Lucie Kubíčková (B3)

Školitel: Ing. Martin Isoz, Ph.D.

Cílem prezentované práce je provést tvarovou optimalizaci ejektoru s využitím prostředků výpočetní mechaniky tekutin. Ejektor je jednoduchá proudová pumpa bez pohyblivých částí, čehož se s výhodou využívá v řadě inženýrských aplikací, například při práci s nebezpečnými tekutinami. Dále lze ejektor potkat v chladicích systémech, tepelných systémech pro generaci energie, nebo jako hlavní součást perlátorů. Nevýhodou ejektoru jsou jeho vysoké energetické požadavky na provoz. Ve spolupráci s Laboratoří sdílení hmoty VŠCHT se snažíme tvarovou optimalizací koncové části ejektoru, tzv. difuzoru, zvýšit jeho energetickou efektivitu. Základem pro optimalizaci je numerický jednofázový axisymetrický model ejektoru s Reynoldsovým středováním, který je fitován na experimentální data. V průběhu optimalizace byl sledován vliv změny tvaru difuzoru na energetickou efektivitu ejektoru (E_{eff}), schopnost difuzoru přeměňovat kinetickou energii na energii tlakovou (c_p) a na rychlostní uniformitu výstupního proudu (γ). Ze série optimalizací jsme nakonec vybrali několik nadějných tvarů, které jsou v současné době připravovány pro experimentální testování.



Příprava částic s architekturou jádro-slupka pro teplotně řízené vylučování hydrofobních látek

Vojtěch Kunc (B3)

Školitel: Ing. Ondřej Kašpar, Ph.D.

Částice s architekturou jádro-slupka jsou využívány zejména ve farmacii, potravinářství a kosmetice. V uplynulé dekádě významně vzrostl zájem o enkapsulaci materiálů s fázovým přechodem za vyšších teplot, než je teplota pokojová. Tyto materiály mohou usnadnit teplotně řízené vylučování aktivních látek z mikrokapslí, což skrývá potenciál zejména pro farmaceutický průmysl. Cílem předkládané práce je zkoumat prodloužené uvolňování aktivních látek z kapslí s architekturou jádro-slupka složených z alginátové slupky a z hydrofobních jader. Enkapsulace hydrofobních látek do alginátových slupek bude probíhat s využitím enkapsulátoru Büchi B-395 Pro. Jako jádra poslouží jak kapalné oleje, tak vosky, které jsou za pokojové teploty pevné. U olejových jader bude provedena parametrická studie, jež si klade za cíl ověřit vhodná kritéria pro vytvoření mikrokapslí. U voskových jader bude následně zkoumáno řízené vylučování léčiva při vyšších teplotách, než je teplota fázového přechodu vosků. Získané poznatky mohou být využity pro další výzkum a potenciální uplatnění v oblasti formulace léčiv a jejich následného řízeného uvolňování.

Obrazová analýza XRT snímok pre modelovanie mikroštruktúry katalytických filtrov

Dominika Moravcová (B3)

Školiteľ: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Katalytický filter zabudovaný v automobile je zariadenie určené k odstraňovaniu škodlivých látok obsiahnutých vo výfukových plynoch, ktoré vznikajú nedokonalým spaľovaním uhľovodíkového paliva. Tento zväčša keramický nosič býva potiahnutý aktívnou katalytickou vrstvou obsahujúcou vzácne kovy ako napríklad platina či paládium. Vzorka s nanosenou vrstvou je podrobená rentgenovej tomografii (XRT), ktorá zachytí skutočnú morfológiu pórov substrátu, ako aj priestorové rozloženie vrstvy vo vnútri steny filtra a na jej povrchu vrátane možných prasklín v štruktúre. Získané 3D snímky sú následne exportované do sady 2D rezov a ďalej spracovávané pomocou softvérového balíka ImageJ-Fiji. Segmentované médiá sa ukladajú vo forme matíc, kde sú jednotlivé fázy reprezentované pomocou jednotiek a núl. Matice sa dajú ďalej použiť v simuláciách na hodnotenie rôznych morfológických deskriptorov ako sú objemové zlomky vyjadrujúce porozitu daných fáz a distribúcia veľkosti pórov zisťovaná pomocou ortuťovej porozimetrie (MIP). Cieľom uskutočnených numerických simulácií je získať aproximáciu prietoku škodlivých plynov stenou filtra v systéme, ktorý čo najviac zodpovedá reálnej situácii a následné vyhodnotenie účinnosti nanoseného katalytického materiálu a tlakovej straty.

Hydrodynamická optimalizace náplně zkrápěných reaktorů pomocí 3D tisku

Kateřina Nyklíčková (B3)

Školitel: Ing. Petr Stavárek, Ph.D.

Dvoufázové reaktory se zkrápěným ložem mají mnoho využití v chemickém průmyslu, zejména pro vedení heterogenně katalyzovaných reakcí. Nejčastěji jsou používány v organické a palivářské technologii pro zpracování ropy. U zkrápěných reaktorů proudí kapalina a plyn shora skrze vrstvu, náhodně sypaných, pevných, částic s katalyzátorem. Mezi nejčastěji používané tvary částic patří např. kuličky, válečky nebo kroužky různých velikostí. Hlavní výhodou takto sypané vrstvy je jednoduché zavádění do reaktoru a i jeho následná výměna, avšak nevýhodou je poměrně vysoká tlaková ztráta a nízká intenzita transportu tepla v radiálním směru. Tyto nevýhody mohou být eliminovány návrhem vhodné geometrie pomocí počítačového softwaru a využitím technologie 3D tisku. Tedy optimalizací 3D struktury a následným tiskem jednotlivých částí náplně reaktoru na vhodné 3D tiskárně. Tato práce se věnuje charakterizaci 3D struktury náplně, tvořené z tzv. periodicky se opakujících otevřených struktur (POCS), z pohledu hydrodynamiky dvoufázového toku. Experimentální část práce je zaměřena na měření hydrodynamických veličin, tedy jednofázové a dvoufázové tlakové ztráty a zádrže kapaliny. Tyto data budou zpracována a vyhodnocena a následně porovnána s klasickými typy náhodně sypaných náplní.

Nanocomposites of silica nanoparticles and liposomes for targeted drug delivery

Klára Odehnalová (B3)

Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Liposomes are phospholipid-based artificially prepared spherical vesicles forming lipid bilayers. They play an important role in pharmacy; their advantage is to prevent premature release of the substance and to allow controlled release of the active pharmaceutical ingredient (API). Even though liposomes are already used in pharmacy, they are suitable only for a few APIs. On the way how to improve liposomes is to encapsulate the porous silica nanoparticles into the liposome, which is called protocell. Protocells have been already fabricated, but their preparation is complicated and therefore, it is required to make it simpler. In the past, protocells were already prepared by a simple method based on the preparation of liposomes (lipid film hydration method) but with non-porous silica nanoparticles. In this work, porous silica nanoparticles were used. The nanoparticles may adsorb larger amount of API due to porosity by comparison to non-porous particles. This preparation has been optimized in addition to the successful encapsulation of the silica nanoparticles into the liposomes. Protocells were subsequently prepared by two methods with a model substance instead of API. For both methods, the efficiency of the adsorbed amount of the model substance was compared.

Simulace tvaru bubliny ve vodě a slabě koncentrovaných roztocích jednoduchých alkoholů

Lucie Pilíková (B3)

Školitel: doc. Dr. Ing. Pavlína Basařová

V probublávaných kolonách a fermentorech je klíčovým ukazatelem doba zdržení bubliny ve vsádce. Tato doba ovlivňuje zádrž plynu a v případě mikroorganismů i výživu kyslíkem. Rychlost bubliny je dána velikostí bubliny a fyzikálními vlastnostmi roztoku, ale výrazně ji ovlivňuje i tvar bubliny. Tato práce se zabývá studiem tvaru bubliny a stoupavou rychlostí bublin ve vodě a vodných roztocích propanolu. Tyto roztoky slouží jako modelové pro simulace vsádky fermentorů. Hlavním cílem práce bylo zjistit, zda teoretické modely převzaté z literatury odpovídají experimentálním výsledkům a dále jestli lze pohyb bublin simulovat pomocí CFD (Computational Fluid Dynamics) řešiče COMSOL Multiphysics. Z výsledků vyplývá, že pouze pro bubliny stoupající ve vodě je možné najít vhodné teoretické modely, které umožňují popsat jejich tvar. Zároveň bylo zjištěno, že simulace chování těchto bublin ($d_{eq} < 1\text{mm}$) v COMSOLu poskytuje velmi dobré výsledky. Naopak pro získání přesnějších simulací pohybu bubliny ve zředěných roztocích propanolu bude v budoucnu pravděpodobně nutné do řešiče naimplementovat dodatečné vztahy.

Měření tlakových ztrát na katalytických filtrech pevných částic

Matouš Polák (B3)

Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Současným trendem společnosti je snižování škodlivých látek vypouštěných do ovzduší, a to se promítá v nárocích v legislativě. EU vydává přísnější emisní normy (EURO), pro jejichž splnění se vyvíjí nové a účinnější technologie, např. katalytické filtry pevných částic (KFPČ). KFPČ je zařízení, které kombinuje klasický automobilový katalyzátor a filtr pevných částic, tzn. kompaktní zařízení, které je schopno eliminovat toxické emise vznikající při chodu spalovacího motoru a zároveň zachytávat pevné částice. Klíčovými parametry pro správnou funkci tohoto zařízení jsou filtrační účinnost, tlaková ztráta a katalytická aktivita. Pro optimální funkci KFPČ je nutné parametry nastavit tak, aby tlaková ztráta byla nejmenší a bylo dosaženo nejvyšší katalytické a filtrační účinnosti. Cílem této práce je experimentálně změřit a porovnat tlakové ztráty na vzorcích KFPČ, které se lišily pouze velikostí částic obsažených v nanosené katalyticky aktivní vrstvě. Jednalo se o vzorky s katalyzátorem Pt/ γ -Al₂O₃ namletým tak, aby průměrná velikost částic byla 6, 12, 20 μ m a čtvrtým porovnávaným vzorkem byla kombinace katalyzátorů s velikostí částic 6 a 20 μ m. Na každém vzorku byly změřeny tlakové ztráty při 12 různých prostorových rychlostech plynu.

Příprava emulzí olej/voda pro rozprašovací sušení

Martin Rompotl (B3)

Školitel: Ing. Ondřej Kašpar, Ph.D.

Rozprašovací sušení je proces, při kterém získáváme suchý prášek rychlým ohřátím kapaliny v proudu horkého plynu. Výhodami této metody nejvíce rozšířené ve farmacii, potravinářském a kosmetickém průmyslu jsou zejména její jednoduchost, snadné převedení do průmyslového měřítka a také, díky rychlosti samotného procesu sušení, možnost aplikace na reaktivní a teplotně labilní látky. Kromě samotného sušení umožňuje tato metoda také enkapsulaci látek, která nachází uplatnění především při snaze ochránit aktivní látku od vnějšího prostředí nebo zajistit její pozvolné vylučování. Tématem této práce je enkapsulace lipofilních látek pomocí rozprašovacího sušení. Abychom mohli lipofilní látky takto enkapsulovat, je třeba zajistit jednak olejnou fázi, ve které se budou aktivní lipofilní látky rozpouštět a jednak vodnou fázi ve které bude rozpuštěn polymer, jenž bude tvořit budoucí schránku částice. Proto je našim cílem vytvořit vhodnou emulzi typu olej/voda, čili kapky oleje ve vodě, v níž bude rozpuštěný vhodný polymer v takovém poměru k olejné fázi, aby byla následná enkapsulace co nejúčinnější a po vytvoření částic docházelo k pozvolnému vylučování aktivní látky.

Chemické inženýrství 3

KOMISE

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

Ing. Jiří Kolář

Ing. Martin Šourek

Ing. Růžena Penížková, Ph. D. (HPST)

PROGRAM

08:30 [Michal Smoleň](#) (B3, Ing. Petr Kovář)

Experimentální stanovení koncentračních profilů v elektrodialyzační cele

08:50 [Jonatan Šercl](#) (B3, prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha)

Membránová separace primárních produktů fermentace

09:10 [Ondřej Šimůnek](#) (B3, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Tvorba prasklin v katalytické vrstvě filtru pevných částic

09:30 [Renata Švecová](#) (B3, RNDr. Ivan Řehoř, Ph.D.)

Towards Parallel Steerable Hydrogel Microrobots

10:10 [Zbyněk Tomiška](#) (B3, Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.)

Modelování vlivu textury uhlíkatých plstí na transportní procesy v redoxních průtočných bateriích

10:30 [Lucie Večerková](#) (B3, Ing. Viola Tokárová, Ph.D.)

Nanostrukturované povrchy s antibakteriálním efektem, jejich testování a replikace

10:50 [Jan Trnka](#) (B3, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.)

Plug flow reactor for continuous preparation of mesoporous silica

11:10 [Tetyana Zheleznyak](#) (B3, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

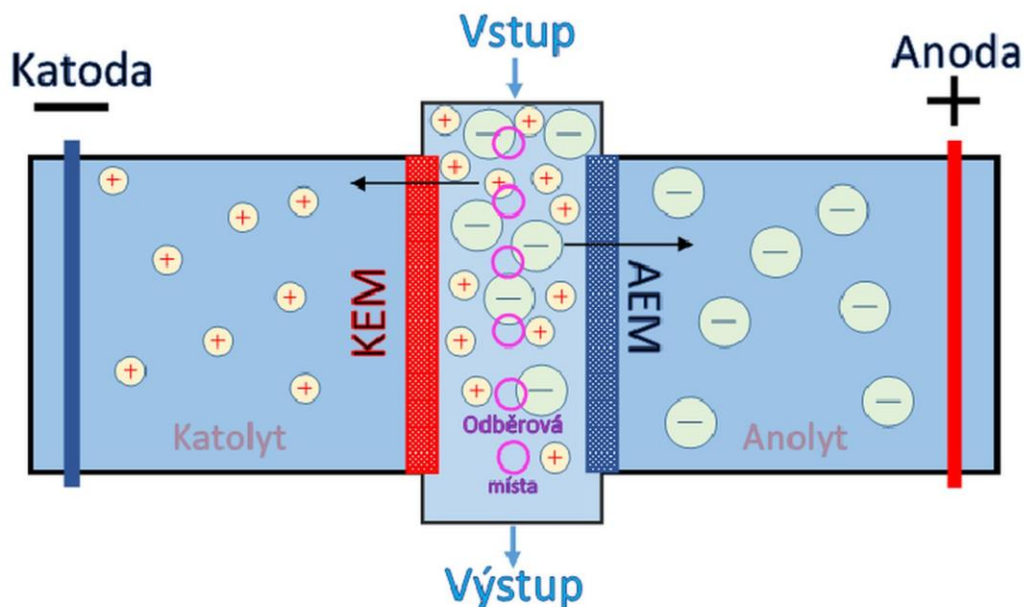
Efektivní modelování katalytických filtrů pro čištění výfukových plynů

Experimentální stanovení koncentračních profilů v elektrodialyzační cele

Michal Smoleň (B3)

Školitel: Ing. Petr Kovář

Elektrodialýza je proces, při kterém dochází k úpravě kapaliny za pomoci polopropustných iontově selektivních membrán zasazených do elektrického pole. V našem případě zkoumáme 0,1 M roztok NaCl, který věrně reprezentuje vzorek běžné brakické vody. K experimentům jsme si vyrobili vlastní elektrodialyzační celu z polymerního materiálu. Jelikož je sestava vybavena odběrovými místy po celé délce kanálku, dostáváme přesná data vázaná k místu odběru. Zkoumanými veličinami jsou koncentrace a změna pH spojená se štěpením vody. Především koncentrační profil je zcela stěžejní při vyhodnocování efektivity a míry odsolení. Zároveň tím, že je polymer průhledný, máme možnost dalšího výzkumu jevů, které při elektrodialýze nastávají, pomocí mikroskopu. Doufáme, že naše výsledky přinesou důležité poznatky, které se podaří přenést na vývoj elektrodialyzérů ve velkém měřítku.



Membránová separace primárních produktů fermentace

Jonatan Šercl (B3)

Školitel: prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha

Pervaporace je proces, při kterém se kapalná směs dělí průchodem neporézní membránou do vakua nebo nosného plynu. Funguje na principu různé rozpustnosti a rychlosti migrace složek směsi membránou. Při pervaporaci se směs zahřívá k bodu varu a poté se přivádí k membráně, odkud složky směsi difundují skrz membránu a na druhé straně se odpařují za sníženého tlaku do plynu nebo do vakua. Technologie pervaporace je velmi výhodná díky své relativně nízké energetické náročnosti a provozním nákladům a zároveň vysoké účinnosti separace látek, které se těžko dosahuje běžnými separačními metodami jako jsou například extrakce nebo destilace. Pervaporace na rozdíl od uvedených metod umožňuje například i separaci azeotropických směsí. Díky pokrokům ve vývoji nových materiálů, tedy i membrán s vyšší selektivitou pro dělení složek význam PV roste. V budoucnu bude mít například velký význam při výrobě etanolu fermentací biomasy jako alternativního paliva z obnovitelných zdrojů. Experimentální výzkum probíhá na laboratorním modulu pro membránovou separaci a účelem práce je zjišťování transportních charakteristik při různých průtocích kapaliny a plynu. Zároveň je cílem práce optimalizace modulu pro správnou funkčnost.

Tvorba prasklin v katalytické vrstvě filtru pevných částic

Ondřej Šimůnek (B3)

Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Spalováním fosilních paliv v automobilových motorech vznikají výfukové plyny, které obsahují plynné emise a pevné částice. Ke konverzi škodlivých výfukových plynů se používají katalyzátory. Pro zachycení vzniklých pevných částic je nutné použít filtr. Moderní filtry pevných částic se díky katalytické vrstvě nanesené do filtru využívají také jako katalyzátory. Jedná se o keramický monolitický filtr tvořený soustavou kanálků, které jsou střídavě zaslepeny z jedné strany. To nutí plyn projít přes porézní stěnu pokrytou katalytickou vrstvou do sousedního kanálku, což vede ke konverzi emisí. Katalytická vrstva umožňuje konverzi zdraví škodlivých výfukových plynů. Je proto důležité, aby nanesená vrstva ve filtru byla rovnoměrně rozprostřená, kompaktní a také, aby se katalyzátor dostával do pórů ve stěně filtru. Důležité je zajistit co nejmenší tlakové ztráty celého systému. Tyto ztráty lze ovlivnit přítomností prasklin nebo rozložením vrstvy ve filtru. Cílem prováděného výzkumu je zjistit, jaké parametry suspenze, či procesu nanášení suspenze do filtru, mají vliv na tvorbu prasklin. Během experimentů byly měněny vlastnosti jako pH suspenze, velikost částic v suspenzi a vlastnosti nanášení suspenze, tzn. namáčení vzorku před samotným nanášením nebo změna tlaku při podtlakovém nanášení.

Towards Parallel Steerable Hydrogel Microrobots

Renata Švecová (B3)

Školitel: RNDr. Ivan Řehoř, Ph.D.

Soft materials promise a way for miniaturization present-day hard robots. Thermo-responsive poly(N-isopropylacrylamide) hydrogel microrobots loaded with gold nanospheres have been investigated in our group for their ability to act similarly to soft-bodied organisms. Current robots can crawl and be actuated when irradiated periodically with aimed laser beam thanks to a friction hysteresis of the gel between shrinking and expanding cycles. The biggest limitation of current microrobot design is that only one robot can be actuated at the time due to aiming the laser beam. In this research, I focus on improving the hydrogel sensitivity and developing novel robot designs to enable their parallel operation. Cross-linking agent used in original composition - poly(ethylene glycol)diacrylate - was replaced with *N,N'*-methylenebisacrylamide resulting in steeper volumetric response to the laser irradiation. In addition, gold nanospheres were substituted for gold nanorods which have higher optical absorbance, thus the microrobot's light harvest efficiency has been increased. I show that both the new composition and robot design allow actuation of an entire single robot with unfocused light (Figure 1) and hold promises for parallel actuation of multiple robots.

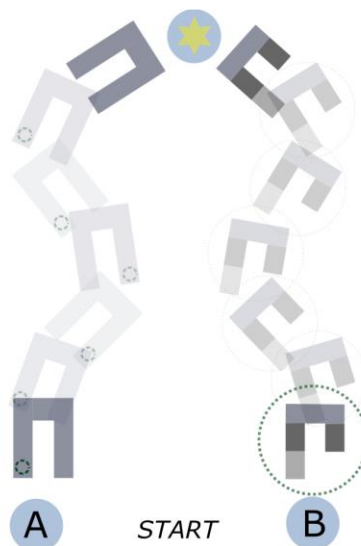


Figure 1. Comparison of two steerable microrobots of different designs. The new design (B) does not require aiming the laser beam when illuminated.

Modelování vlivu textury uhlíkatých plstí na transportní procesy v redoxních průtočných bateriích

Zbyněk Tomiška (B3)

Školitel: Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.

Redoxní průtočné baterie jsou považovány za jednu z nejslibnějších realizací rychle se rozvíjející oblasti stacionárních uložení energie. Použití roztoku vanadu jako elektrolytu má unikátní výhodu, může být použit jako anolyt a katolyt zároveň, což přispívá k efektivnějšímu potlačení přestupu iontů přes membránu, a tedy zlepšení životnosti baterie. Elektrody tvořené z porézních uhlíkatých plstí tvoří stěžejní komponentu baterie. Díky svému velkému specifickému povrchu poskytují dostatek aktivních míst pro dostatečně rychlou elektrochemickou redoxní reakci. Cílem této práce je teoretický výzkum morfologických a transportních vlastností uhlíkaté plsti v závislosti na různém stupni jejího stlačení. Prostorově 3D porézní textura plsti byla rekonstruována ze snímků mikro-tomografie a použita jako vstup pro výpočet statistických deskriptorů její morfologie (textury). Mezi studované morfologické deskriptory, pro jejichž vyhodnocení byly vyvinuty specifické algoritmy, patří např. porozita, měrný povrch, styčná plocha či prostorová orientace uhlíkatých vláken. Počítačově rekonstruovaná plst' může být dále využita v matematických modelech umožňujících odhad jejich transportních charakteristik (např. efektivní elektrické vodivosti či tlakové ztráty generované proudícím elektrolytem).

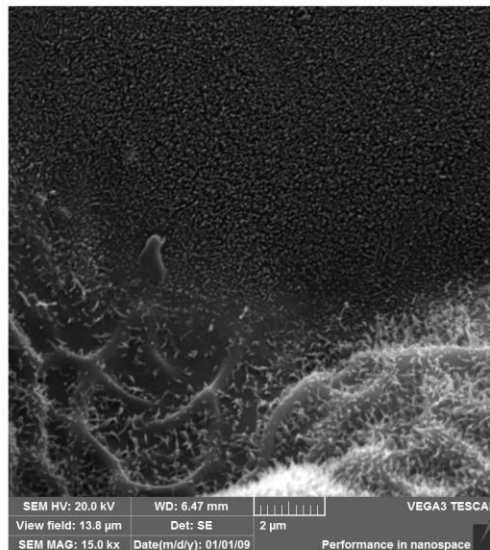


Nanostrukturované povrchy s antibakteriálním efektem, jejich testování a replikace

Lucie Večerková (B3)

Školitel: Ing. Viola Tokárová, Ph.D.

V současné době stále aktuálnější problém rostoucí antibiotické rezistence mikroorganismů vyžaduje hledání nových přístupů v boji proti bakteriím. Jednou z možností je prevence. Bakterie se mohou přichytit na nejrůznější povrchy, dotekem pak dochází k přenosu a infekci. Pokud dokážeme zabránit přežití a následnému množení bakterií na povrchu, výrazně omezíme přenos bakteriálních onemocnění. Existují nanostruktury, nacházející se například na křídlech vážek a cikád (viz obrázek), které dokáží protrhnout bakteriální stěnu, případně zabránit přisednutí bakteriální buňky. Neboť jde o čistě mechanický efekt, vytvoření rezistence by vyžadovalo zesílení bakteriální stěny. Tento proces trvá výrazně delší dobu než vytvoření antibiotické rezistence. Cílem této práce je zhodnotit míru antibakteriálního efektu nanostruktur na křídlech různých druhů vážek žijících v České republice a následně vytvořit repliku vybrané nanostruktury do polymerní matrice. Křídla i repliky jsou charakterizovány pomocí skenovací elektronové mikroskopie a následně je testován jejich antibakteriální účinek.



Plug flow reactor for continuous preparation of mesoporous silica

Jan Trnka (B3)

Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Mesoporous silica has been lately investigated as a pharmaceutical excipient for drug formulation due to its exceptional ability to maintain an amorphous state of poorly soluble API in its mesopores. However, industrially fabricated silica particles are of low quality compared to laboratory prepared ones. On the contrary, laboratory syntheses are difficult to scale up to the industrial level. High-quality mesoporous silica has been fabricated only in the batch to this day, while a potential transfer to continuous mode would result in more efficient and less expensive production of this excellent material. A promising solution to this problem seems to be the usage of a plug flow reactor, particularly due to its stable flow rate, easy determination of retention time, and the possibility to scale up via parallelization. This work aims to design a plug flow reactor for mesoporous silica fabrication and then follow up the reactor with another unit operation, such as colloid milling to defined size or size separation to produce particles of strictly determined parameters. A static light scattering, scanning and transmission electron microscopy also as nitrogen sorption method are employed to examine the size, morphology and structure of the produced particles.

Efektivní modelování katalytických filtrů pro čištění výfukových plynů

Tetyana Zheleznyak (B3)

Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

V dnešní době se v autech stále více používají katalytické filtry k čištění výfukových plynů. Katalytické filtry jsou kombinací klasického filtru pevných částic a katalytického konvertoru. Kromě zachytu částic tedy umožňují také katalýzu redoxních reakcí škodlivých plynů, zejména CO a NO_x, na netoxické produkty. Rychlost těchto reakcí je závislá mimo jiné na teplotě. Během jízdy je filtr vlivem proměnlivého zatížení motoru vystaven náhlým změnám průtoku a teploty výfukových plynů. Také teplota a rychlost okolního vzduchu mohou mít vliv na teplotu uvnitř filtru. V této práci se ke studiu zmiňovaných vlivů využívá model katalytického filtru. Po provedení jednotlivých simulací s různými vstupními parametry jsou jejich výsledky mezi sebou porovnány a diskutovány. Cílem je získat lepší představu o vlivu vnějších faktorů na funkci katalytického filtru

Chemické inženýrství 4

KOMISE

Ing. Lukáš Valenz, Ph.D. (předseda)

Ing. Viola Tokárová, Ph.D.

Ing. Lenka Krajáková

Ing. Vít Zvoníček (Zentiva)

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

PROGRAM

08:30 [Bc. Ondřej Gebouský](#) (M1, Ing. Jan Haidl, Ph.D.)

Vliv orientace ejektoru kapalina-plyn na jeho hydraulické chování

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

Developing a digital twin for experimental data extension in turbulence research

09:10 [Bc. Filip Hládek](#) (M2, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.)

Curcumin nanoformulations for targeted drug delivery

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

Príprava foriem liečiv s programovateľnou disolučnou krivkou

09:50 [Bc. Marek Kincl](#) (M1, doc. Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.)

PIV analýza elektrokonvektivních struktur vznikajících na iontové výměnných systémech

10:30 [Bc. Matouš Pechar](#) (M1, doc. Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D.)

Physical stability of PVA based amorphous solid dispersions: experimental and computational study

10:50 [Bc. Richard Knopp](#) (M1, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Studium konverze CO na katalytických filtrech pevných částic

11:10 [Bc. Jan Pagáč](#) (M1, doc. Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.)

Měření profilů elektrického potenciálu v miniaturizované elektrodialyzní cele

11:30 [Bc. Tomáš Pachel](#) (M1, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Vliv asymetrických kanálků na tlakovou ztrátu ve filtru pevných částic

Vliv orientace ejektoru kapalina-plyn na jeho hydraulické chování

Bc. Ondřej Gebouský (M1)

Školitel: Ing. Jan Haidl, Ph.D.

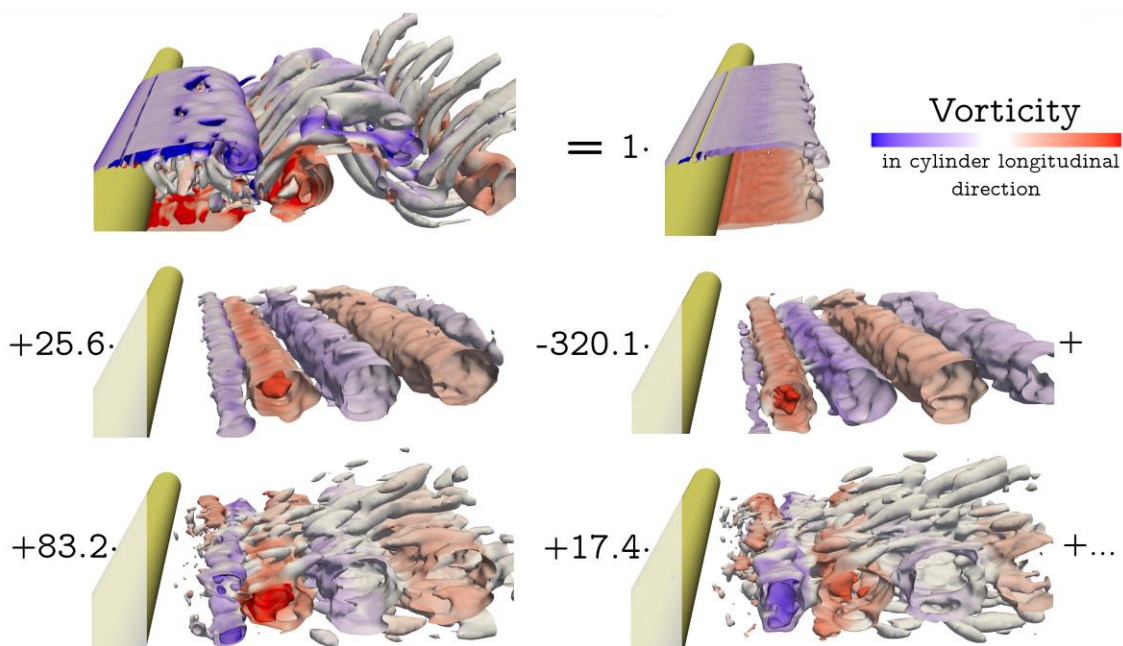
Ejektor typu kapalina-plyn je poměrně rozšířeným druhem proudového čerpadla. Využívá tlakové energie kapaliny k dopravě a stlačení plynu, přičemž z ejektoru vystupují obě média společně jako disperze. Se zařízeními, pracujícími na stejném principu, se běžně setkáváme v podobě rozprašovačů či vodních vývěv. Ejektory kapalina-plyn ale nachází uplatnění především v průmyslu jako vývěvy, vysokokapacitní distributory plynu a zařízení pro intenzivní přestup hmoty. Vzhledem ke svému kompaktnímu designu a absenci pohyblivých částí jsou ejektory levnou, spolehlivou a bezpečnou alternativou k tradičně používaným aparátům. Širšímu průmyslovému nasazení ovšem brání absence spolehlivých návrhových metod; jednou z nezodpovězených otázek je například vliv orientace zařízení na jeho hydrodynamické a transportní vlastnosti. Tato práce se proto zabývá studiem hydraulického chování ejektoru kapalina-plyn v závislosti na orientaci zařízení. V příspěvku jsou prezentovány, porovnány a diskutovány hydraulické charakteristiky změřené na třech limitních orientacích ejektoru voda-vzduch.

Developing a digital twin for experimental data extension in turbulence research

Bc. Tomáš Hlavatý (M1)

Školitel: Ing. Martin Isoz, Ph.D.

Turbulence is pivotal in most industrial applications of computational fluid dynamics (CFD). Nevertheless, direct simulations of all the spatio-temporal scales involved in turbulent flows are impractical due to the required computing power. Thus, to account for effects of turbulence in their simulations, CFD engineers rely on an extensive library of mostly empirical models for a scarcely understood phenomenon. A way to shed some light into the dark abyss of turbulence is via examination of coherent structures observed in fully turbulent flows. Our work is dedicated to both experimental and numerical study of the flow in the wake of a circular cylinder at Reynolds number of 5000. Main contributions of this work lie in (i) selecting a turbulence model capable of delivering accurate flow data in a realistic time frame, (ii) generating and fine-tuning a CFD mesh to directly compute $\sim 97\%$ of the flow kinetic turbulent energy and to exactly simulate the flow separation on the cylinder surface, and (iii) validating computed POD outputs against 2D PIV experiment and using CFD to extend the experimental data.

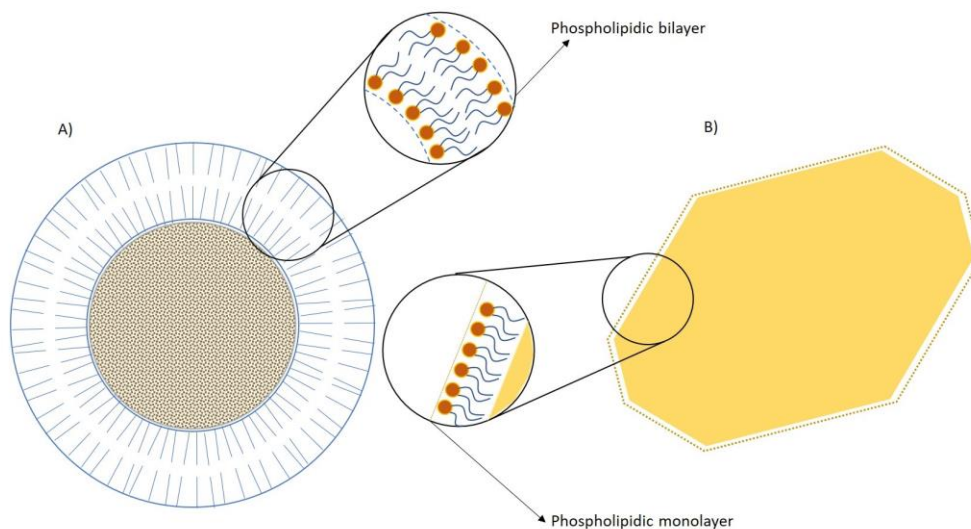


Curcumin nanoformulations for targeted drug delivery

Bc. Filip Hládek (M2)

Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

As various autoimmune diseases, cancer, bacterial and viral diseases, and even global pandemics become larger threat every year, new treatments emerge. One of the main issues of newly synthesized drugs is their poor solubility in water, which impeaches the range of options of their delivery to the body. Targeted drug delivery is a promising way to deliver the drug to the place of effect, ideally without the affecting any other part of the body, thus minimizing the side effects. The previous research has focused on so-called protocells, composite particles made of mesoporous silica nanoparticles (MSNs) core, and liposome outer bilayer (GA, A). Though this system was quite promising, there are other, potentially better approaches, such as nanocrystalline formulation (GA, B). In this work, direct encapsulation of drug nanocrystals was studied along with their preparation, stabilization and possible uses. The crystalline form should improve the solubility similarly to the MSNs carriers while ideally surpassing the issues with the MSNs encapsulation. The benefit of the nanocrystalline form is further supported by direct comparison of the two systems, where the measured loading capacity of protocells is around 45% of curcumin by weight within a protocell and 83% for the nanocrystal.



Graphical abstract: A) Protocell, B) Nanocrystal. Schematic depiction, not in scale

Príprava foriem liečiv s programovateľnou disolučnou krivkou

Bc. Kristián Kapusta (M1)

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

Farmaceutický priemysel neustále napreduje. Vyvíja ako nové lieky, tak aj nové spôsoby formulácie už existujúcich liečiv. Cieľom môže byť napríklad zvýšenie potencie liečiva, čo vedie k zníženiu potrebnej dávky, s následkom zvýšenia užívateľského komfortu. Taktiež v súčasnosti je snaha vyvíjať liečivá s komplexnou disolučnou krivkou. Preto táto práca nasleduje aktuálny trend a je zameraná na kontrolované, a riadené rozpúšťanie liečiv. Rýchlosť rozpúšťania častíc API (Active Pharmaceutical Ingredient) rozptýlených v kvapaline sa odvíja od špecifického povrchu častíc. Tento špecifický povrch je možné obmieňať prostredníctvom počiatkovej distribúcie veľkosti častíc (PSD) súvisiaceho rovnako tak s populačnou bilanciou. Na vytvorenie takej PSD, ktorej výsledkom bude predpísaná krivka rozpúšťania, bola preskúmaná kinetika rozpúšťania viacerých veľkostných frakcií a ich kombinácií s rozličnou bi-modálnou distribúciou častíc. Pre lepšie pochopenie rozpúšťania častíc a predikciu predpísaných kriviek rozpúšťania, bude zostrojený matematický model opisujúci rozpúšťanie častíc v závislosti na počte a veľkosti častíc API.

PIV analýza elektrokonvektivních struktur vznikajících na iontově výměnných systémech

Bc. Marek Kincl (M1)

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

Elektrodialýza je elektromembránový proces využívající se v dnešní době zejména k odsolování mořských vod, odstraňování solí z biotechnologických či potravinářských produktů nebo k přípravě pitné vody. Principem elektrodialýzy je migrace iontů v elektrickém poli. Klíčovou složkou celé separace jsou iontově-výměnné membrány, které mají za úkol selektivně propouštět či zadržovat složky s daným nábojem. Tato práce se zabývá přímým pozorováním jevů na rozhraní iontově-výměnné membrány a elektrolytu. Pozorování je prováděno pomocí optické metody vizualizace toku zvané „Integrální laserová anemometrie“ (PIV). Díky této metodě jsme nejen schopni sledovat chování tekutiny v okolí iontově výměnných membrán, ale také získat okamžitá rychlostní pole ve sledované proudící tekutině. Cílem této práce je zjistit, jak přítomnost různých molekul jako například molekul DNA ovlivňuje tvar a intenzitu elektrokonvektivních struktur. Tyto struktury napomáhají řádnému promíchání odsolovaného elektrolytu a vedou k intenzivnímu transportu hmoty mezi jádrem elektrolytu a povrchem membrány. Elektrokonvekce může být v tomto kontextu chápána jako proces vedoucí k intenzifikaci odsolení.

Physical stability of PVA based amorphous solid dispersions: experimental and computational study

Bc. Matouš Pechar (M1)

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

Many newly produced drugs are poorly soluble in water which in consequence leads to worse bioavailability. Among many other techniques, polymeric amorphous solid dispersions (PASDs) are possible solution to this kind of problem by turning active pharmacological ingredient (API) to amorphous state and subsequent stabilization of the API by polymeric matrix. These API-polymer formulations, however, often show instability – they tend to recrystallize. Stability of these formulations can be predicted from so-called temperature-composition (T-C) phase diagrams. This work is focused on two model APIs namely indomethacin and naproxen in combination with polyvinyl alcohol – a semicrystalline, water well-soluble polymer. T-C phase diagrams were created using Kyeremateng empirical equation, Flory-Huggins theory and PC-SAFT. The validity of stability prediction of individual approaches was confronted with experimental data of ageing of prepared samples including DSC measurements and X-ray powder diffraction analysis.

Studium konverze CO na katalytických filtrech pevných částic

Bc. Richard Knopp (M1)

Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Počet automobilů ve světě neustále roste a zatím nic nenasvědčuje tomu, že by se tento trend měl nějak dramaticky měnit. Proto je nutné snižovat množství emisí vyprodukovaných automobilovým průmyslem. Kromě plynných zplodin, kterými jsou hlavně oxidy dusíku, oxid uhelnatý a nespálené zbytky uhlovodíků, je v poslední době kladen stále větší důraz na omezení množství pevných částic. To donutilo výrobce vybavit vozidla nejen katalytickým konvertorem, ale i filtry pevných částic, které jsou schopny částice zachytit, spálit a zamezit tak jejich úniku do ovzduší. Kvůli tlaku na redukci ceny, hmotnosti a velikosti celého katalytického systému byly vyvinuty tzv. katalytické filtry pevných částic, kde je katalytická vrstva nanесena přímo na stěny filtru. Tato studie byla zaměřena na výzkum katalytické aktivity vzorků katalytických filtrů pevných částic, kde byla jako katalyzátor využita Pt/ γ -Al₂O₃. Zkoumány byly 4 vzorky, které se lišily především distribucí velikosti částic v aktivní vrstvě (D_{90} = 6 μ m, 12 μ m, 20 μ m a 6+20 μ m). Byla provedena řada experimentů v laboratorním trubkovém reaktoru formou teplotních ramp s lineárním růstem teploty. Zkoumána byla konverze CO v závislosti na teplotě pro 4 různé prostorové rychlosti plynů (6 250 h⁻¹, 12 500 h⁻¹, 25 000 h⁻¹ a 50 000 h⁻¹).

Měření profilů elektrického potenciálu v miniaturizované elektrodialyzní cele

Bc. Jan Pagáč (M1)

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

Elektromembránové separační procesy jsou velice atraktivní metodou pro separaci složek z roztoků elektrolytů vlivem externě aplikovaného nebo interně generovaného elektrického napětí. Použití těchto procesů poskytuje spoustu výhod z hlediska účinnosti separace, snadné automatizace a provozu v kontinuálním režimu. Elektrodialýza, elektrolyza, difuzní dialýza a kontinuální deionizace již přes 40 let nachází široké uplatnění v rozsáhlých průmyslových aplikacích pro odsolování brakických vod, čištění odpadních vod, výrobě léčiv a polovodičů, nebo například pro získávání kyselin a zásad z roztoků elektrolytů. Nedílnou součástí těchto procesů tvoří polopropustné iontovýměnné membrány, které umožňují selektivní separaci námi požadovaných iontů ze zpracovávaných roztoků. Cílem této práce je blíže porozumět transportním a reakčním mechanismům, ke kterým v membránách dochází pomocí naměřených profilů elektrického potenciálu v miniaturizované elektrodialyzní cele. Tyto profily byly naměřeny ve směru odsolení pomocí námi vyvinutých měřících portů z polyakrylamidového gelu, které kontaktovali měřící místo v odsolovacím kanálku s měřící elektrodou. Tyto gelové můstky byly použity k zamezení nechtěných reakcí na měřících elektrodách, které se po vložení do elektrického pole stávají bipolárními.

Vliv asymetrických kanálků na tlakovou ztrátu ve filtru pevných částic

Bc. Tomáš Pachtl (M1)

Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Spalovací motory stále tvoří pohon pro většinu nově vyrobených automobilů. Škodliviny, které spalovací motory produkují, jsou dlouhodobě známy, a proto se emisní limity pro toxické plyny pořád zpřísňují. Katalytické konvertory a filtry pevných částic se staly součástí výfukového systému každého automobilu. Obsah toxických plynných složek jako oxid uhelnatý, nespálené uhlovodíky a oxidy dusíku se snižuje v katalytickém konvertoru. Jemné prachové částice jsou následně zachycovány ve filtru. Ten je tvořen kanálky a proud výfukových plynů je nucen prostupovat skrz stěnu ze vstupních do výstupních kanálků. Tím však dochází k tlakové ztrátě a snižuje se tak i výkon motoru. Tato studie se zabývá modelováním asymetrických kanálků, což znamená, že vstupní kanálek je větší než výstupní. Popílek a saze, které se usazují na stěně filtru, pak tvoří nižší vrstvu a tím snižují svůj příspěvek k tlakové ztrátě. Při velké vrstvě sazí je nutné filtr zregenerovat, nižší vrstva zvyšuje dobu mezi jednotlivými regeneracemi a tím prodlužuje i jeho životnost. Výsledky z modelu byly porovnány filtrem s běžnými kanálky.

Chemické inženýrství 5

KOMISE

prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha (předseda)

Ing. Alexandr Zubov, PhD.

Ing. Jakub Klimošek

Ing. Libor Labík, Ph. D. (Mondi)

PROGRAM

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

Elektrostatické nabíjení dielektrických kapalin

08:50 [Bc. Jan Praus](#) (M1, doc. Ing. Ondřej Vopička, Ph.D.)

Rovnovážná rozpustnost a difuzivita těkavých látek v iontových kapalinách

09:10 [Bc. Lukáš Sauer](#) (M1, prof. Ing. Michal Příbyl, Ph.D.)

Studium transportu hmoty v mikrofluidním membránovém modulu

09:30 [Bc. Jakub Staš](#) (M1, Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.)

3D modelování separace plyných směsí pomocí dutých vláken

09:50 [Bc. Ondřej Studeník](#) (M1, Ing. Martin Isoz, Ph.D.)

Vývoj a verifikace řešiče pro modelování proudění plně spřažené pevné a tekuté fáze

10:30 [Miroslav Večeřa](#) (M1, Ing. Jakub Mužík)

Příprava vícevrstevných částic na fluidním loži

10:50 [Bc. Miroslav Vrána](#) (M1, Ing. Jan Haidl, Ph.D.)

Ekonomické a provozní hodnocení vybraných zařízení v procesech sdílení hmoty

11:10 [Bc. Alžběta Zemánková](#) (M1, doc. Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D.)

Co-amorphous drug delivery systems: phase behaviour and dissolution performance

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

Chemicko inženýrské aspekty nanostrukturovaných materiálů

Elektrostatické nabíjení dielektrických kapalin

Bc. Jiří Perner (M1)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Electrostatic charging can cause severe problems in the industry. During the production of polyethylene in slurry (liquid-solid dispersion) reactors, the fouling of reactor walls occurs due to electrostatic charging. Electrostatic charging of liquids is also responsible for fuel transport accidents and power transformer failures. Despite the significance of these problems, the mechanism of charging in liquid-medium systems is still poorly understood because of the difficulty of measurements. So far, little research has been done on liquid systems, almost solely focused on charging of power transformer oils, and no research has been done on liquid-solid dispersion systems. In this work, the electrostatic charging of chemically pure dielectric liquids was studied. An apparatus for on-line measurement of charging during flow was built. It was determined that the charging tendency is a function of dielectric constant, flow velocity and solid-liquid phase interface size. It was also determined that polar liquids show significantly different kinetics of charging to non-polar liquids. Furthermore, a basic study of electrostatic charging in liquid-solid dispersion systems was conducted.

Rovnovážná rozpustnost a difuzivita těkavých látek v iontových kapalinách

Bc. Jan Praus (M1)

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

Iontové kapaliny (IL) jsou nehořlavé, prakticky netěkavé látky s potenciálním uplatněním například v separačních procesech. Předmětem práce je studium rovnovážné a nerovnovážné absorpce par série těkavých látek v IL, dílčím cílem je rozbor v literatuře popsané anomálně rychlé difuze ve smyslu kladných odchylek od Einsteinovy-Stokesovy-Sutherlandovy rovnice. Metodou absorpční mikrogravimetrie byla měřena rovnovážná data a kinetika absorpce šesti těkavých látek ve čtyřech iontových kapalinách. Rovnovážná data byla v oblasti nízkých koncentrací dobře popsána Henryho zákonem, v oblasti vyšších koncentrací poskytoval dobrý popis model Margulesův a model GAB. Kinetika absorpce byla dobře vystižena modelem odvozeným ze druhého Fickova zákona s konstantním difuzním koeficientem, byl odvozen model zahrnující opravu difuzního koeficientu na termodynamickou neidealitu roztoku. Bylo zjištěno, že započtení vlivu termodynamické neidealitu roztoku nevysvětluje anomálně rychlou difuzi v IL a u většiny systémů způsobuje překompenzování koncentrační závislosti difuzního koeficientu. Dále bylo zjištěno, že jak rovnovážnou absorpci tak i difuzní koeficient těkavých látek v IL determinuje zejména anion IL.

Studium transportu hmoty v mikrofluidním membránovém modulu

Bc. Lukáš Sauer (M1)

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

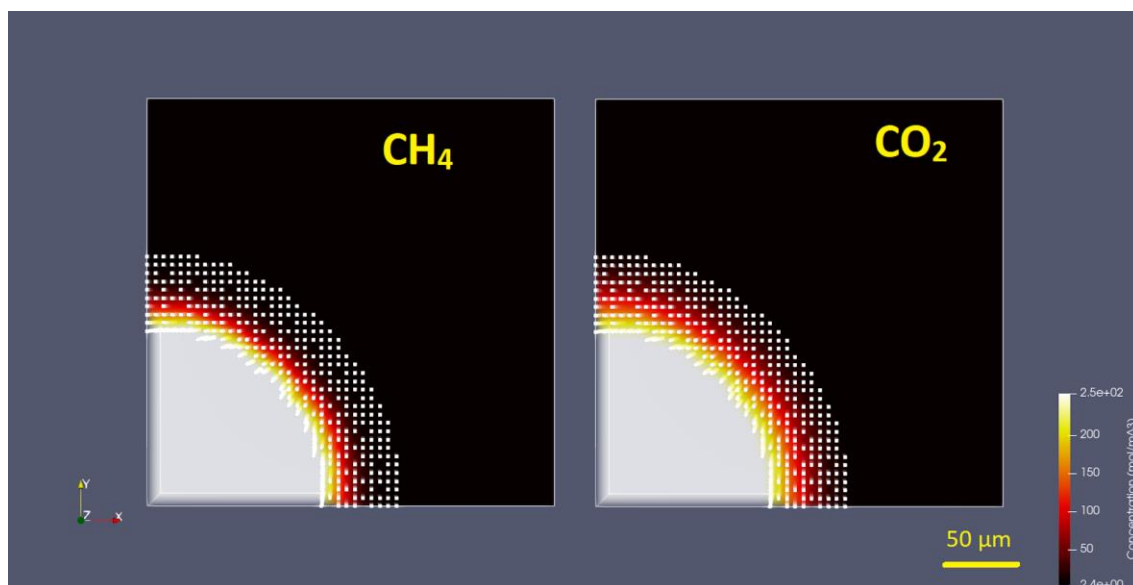
Vytořený mikrofluidní membránový modul je tvořen kanálky o rozměrech v řádu stovek mikrometrů. Mikrofluidní modul obsahuje vloženou polopropustnou cylindrickou membránou. V modulu je možné zároveň připravit produkty enzymových reakcí, například léčiva či jiné speciální chemikálie, a účinně je pomocí membrány separovat z reakční směsi. Toto zařízení je příkladem průtočného mikrofluidního reaktoru-separátoru pro kontinuální syntézu malého množství speciálních látek. Nejčastější separační metodou v mikrofluidních zařízeních bývá extrakce. Účinnost extrakce někdy může být zvýšena pomocí vloženého elektrického pole nebo optimalizací dob prodlení obou kapalných fází. Stabilitu toku v mikroměřítku lze příznivě ovlivnit pomocí separační membrány. Miniaturizace extrakce přináší mnoho výhod, proces může být ekonomicky výhodnější a mnohem efektivnější než extrakce ve velkém měřítku, protože v mikrozařízeních lze zajistit mnohem intenzivnější transport hmoty. Hlavní cíle práce: Vyrobit mikrofluidní membránový modul s možností souproudeho a protiproudeho zapojení. Zkoumat účinnost separace a faktoru obohacení pomocí látky 7-ADCA (kyselina 7-aminodeoxycefalosporanová) a nosných roztoků na vodné bázi. Nalézt vhodné podmínky k dosažení co nejvyšší účinnosti. Studie transportních odporů.

3D modelování separace plyných směsí pomocí dutých vláken

Bc. Jakub Staš (M1)

Školitel: Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.

V moderním světě se kříží dva trendy – úbytek zdrojů fosilních paliv a neustále rostoucí spotřeba energie. Jedním z řešení tohoto problému jsou alternativní paliva, jako je například bioplyn vyráběný z biologických odpadů. Hlavní energetickou složkou bioplynu je methan, který je však získáván ve směsi i s jinými nežádoucími plyny, zejména oxidem uhličitým. Aby mohl být bioplyn používán je potřeba tyto příměsi odstranit. Jedním z ekonomicky nejvýhodnějších způsobů dělení plyných směsí je separace pomocí dutovlákných membránových modulů. Dutá vlákna obsahují malé póry ve stěněch, které mohou mít vliv na rychlost a kvalitu separace. Proto jsme vyvinuli dynamický matematický model transportu vícesložkových plyných směsí v heterogenním prostředí. Proces difúze je popsán pomocí Maxwellových-Stefanových rovnic, což umožňuje popsat vzájemnou interakci mezi složkami a její vliv na transport skrze stěnu vlákna. Porézní strukturu vlákna buď rekonstruujeme ze 3D mikro-tomografických snímků reálných vláken nebo *in silico* generujeme vlastní struktury s pravidelnou geometrií pórů. Cílem vývoje tohoto modelu je pochopení jevů vyskytujících se při procesu separace vícesložkových plyných směsí a optimalizace struktury těchto vláken k dosažení efektivní dělení plyných směsí – zejména bioplynu.

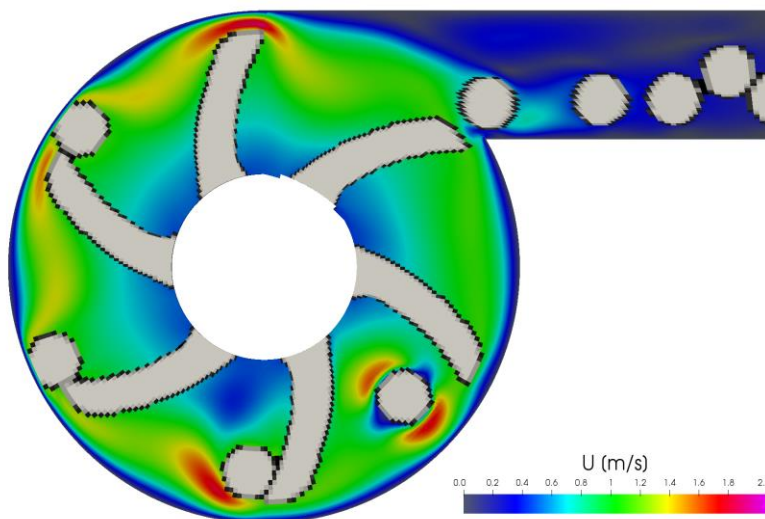


Vývoj a verifikace řešiče pro modelování proudění plně spřažené pevné a tekuté fáze

Bc. Ondřej Studeník (M1)

Školitel: Ing. Martin Isoz, Ph.D.

Výpočetní dynamika tekutin (ang. Computational Fluid Dynamics – CFD) se stala účinným nástrojem k modelování inženýrských procesů. Avšak pokud proces zahrnuje i volně pohyblivé částice, CFD může být nedostačující. Limity CFD jsou markantní zejména v případě, kdy je pohyb částic primárně určen prouděním tekutiny a částice jsou natolik velké, že samy ovlivňují charakter proudění. Z tohoto důvodu se stále setkáváme s užíváním empirických modelů u některých inženýrských aplikací (např. usazování, fluidace). Tato práce je zaměřena na validaci a rozšíření nově vyvíjeného řešiče, který má za cíl toto omezení odstranit. Řešič je založený na kombinaci metody diskretních prvků (Discrete Element Method – DEM) a metody CFD. Předmětem validace je porovnání výsledků simulací řešiče s výsledky standardních CFD postupů implementace pevné fáze. Rozšíření řešiče sestává z návrhu a implementace náhodné generace částic v uživatelsky definované zóně výpočetní domény s možností zachování předdefinovaného objemového zlomku částic ve vybrané zóně. Toto rozšíření umožňuje přesnější simulaci procesů, kde se vyskytuje tekutina s dispergovanou pevnou fází. Závěrem je demonstrováno použití řešiče v případech, které nelze standardními CFD nástroji řešit a kde je využito náhodné generování částic.



Příprava vícevrstevných částic na fluidním loži

Miroslav Večeřa (M1)

Školitel: Ing. Jakub Mužík

Polymorbidita (mnohočetné onemocnění) je předmětem zkoumání moderní medicíny. Důsledkem toho je, že pacient musí v průběhu dne užívat několik léčiv najednou. Příprava takové formy léčiva, která obsahuje více účinných látek naráz, jež jsou běžně předepisována společně, nese řadu výhod pro uživatele. Ve farmaceutickém průmyslu se využívá fluidního zařízení na zlepšené a cílené rozpouštění léčiva potahováním jednotlivými funkčními vrstvami. Cílem této práce je pomocí fluidního lože kontrolovaně aplikovat vrstvy jednotlivých léčiv na sebe. V laboratoři byly nejprve, technikou airbrush pistole, vytvořeny filmy systémem léčivo/oddělovací polymer/léčivo, kde byla sledována nutná tloušťka polymeru k fyzickému oddělení vrstev léčiv. Poté bylo zkoumáno postupné odmývání jednotlivých vrstev z filmu využitím UV zobrazovače. Pro náhradu fluidního lože byl vytvořen laboratorní nástřikový systém, díky němuž byly připraveny první vícevrstvé částice, které byly charakterizovány na skenovacím elektronovém mikroskopu (SEM) a byly provedeny disoluční testy. V budoucnu bychom nástřikem vhodného oddělovacího polymeru mohli navíc kontrolovat uvolňování jednotlivých léčiv v delším časovém horizontu např. ráno a večer.

Ekonomické a provozní hodnocení vybraných zařízení v procesech sdílení hmoty

Bc. Miroslav Vrána (M1)

Školitel: Ing. Jan Haidl, Ph.D.

Procesy sdílení hmoty mezi kapalnou a plynou fází mají velký význam pro mnoho průmyslových aplikací. V chemickém průmyslu je běžně nalezneme u procesů s heterogenními reakcemi a dále v potravinářských či biochemických provozech například u fermentací. Nejzásadnějšími parametry popisujícími přenos hmoty mezi kapalnou a plynou fází jsou mezifázová plocha a objemový koeficient přenosu hmoty kapaliny k_{LA} a plynu k_{GA} , na které je kladen dle zvoleného procesu rozdílný důraz. V této práci se snažíme modelovat a vyhodnotit vhodnou aplikaci vybraných zařízení pro sdílení hmoty (míchané nádoby, ejektorové reaktory, absorpční a probublávané kolony) v konkrétních procesech, které rozlišujeme na základě závislostí na jednotlivých výše zmíněných parametrech. Vhodná aplikace zařízení pro zvolený proces je hodnocena na základě velikosti aparátu, energetické náročnosti a pružnosti zařízení ve výrobě. Tato kritéria jsou v praxi nezanedbatelnými faktory, kterými se musí podnik nejen v dnešní proměnlivé době zabývat pro optimalizaci výroby a svou ekonomickou efektivitu.

Co-amorphous drug delivery systems: phase behaviour and dissolution performance

Bc. Alžběta Zemánková (M1)

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

The drug solubility in water is one of the most important properties for efficient drug delivery. On the other hand, an increasing number of drugs under development are poorly water-soluble. Therefore it becomes crucial to develop methods to enhance their water solubility and thus their bioavailability. Co-amorphous systems consisting of drug and small molecule co-former are considered as one of the most promising strategies to enhance the drug bioavailability. The amino acids arginine and tryptophan were used as co-formers to transform the model drugs indomethacin and ibuprofen into an amorphous state *via* ball milling or quench cooling method. To determine whether it is possible to improve the solubility of the poorly water-soluble drug by its formulation into the co-amorphous system, dissolution tests were performed. The dissolution profiles of co-amorphous systems were compared with those for physical mixtures and pure drug. To understand the phase behaviour of the systems, phase diagrams were created from liquidus temperatures measured by differential scanning calorimetry. Physico-chemical characterizations were performed to monitor the physical stability of the prepared co-amorphous systems over time.

Chemicko inženýrské aspekty nanostrukturovaných materiálů

Bc. Jakub Zlatník (M1)

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

Zájem o nanomateriály od poloviny dvacátého století vzrůstá. To je dáno především vlastnostmi těchto materiálů, které reflektují jejich malé charakteristické rozměry. Ne všechny nanomateriály se dají použít ke konkrétním účelům, ať už kvůli chemickým, či fyzikálním vlastnostem. Tato práce je zaměřena na využití vysoké hodnoty měrného povrchu uhlíkových nanotrubek a zjišťování jejich chování v mikrofluidních zařízeních při různých provozních parametrech těchto zařízení. Jelikož se jedná o sypký materiál, můžeme skrze něj nechat protékat roztoky. Díky tomu můžeme připravit nanostrukturované lože a použít je například jako 3D elektrodu v redoxní baterii poskytující vysoký měrný povrch. Zároveň snížením transportních vzdáleností dojde k intenzifikaci procesů probíhajících přímo na povrchu. Podobně může daná 3D elektroda fungovat jako biosenzor se schopností detekovat přítomnost příslušných látek (nejčastěji biomolekul) v protékajícím roztoku. Z pohledu chemického inženýrství ovšem takto vytvořené nanostrukturované lože bude vykazovat velmi vysoký hydrodynamický odpor a díky malé kontrole při tvorbě lože může dojít ke zkratovému toku. To znamená, že tekutina neproudí skrz lože, ale obtéká je. Tato prezentace se zabývá především otázkou tlakových ztrát na vytvořeném loži.

Chemické inženýrství 6

KOMISE

prof. Ing. Michal Příbyl, PhD. (předseda)

Ing. Denisa Lizoňová

Ing. Martin Bureš

Ing. Václav Miklas (BR&E Europe)

Ing. Miroslav Malecký (Unipetrol)

PROGRAM

08:30 [Bc. David Van Gelder Adjar](#) (M2, Ing. Martin Kohout, Ph.D.)

Cascade of rectification columns - modeling and economic evaluation using a standard simulation program

08:50 [Bc. Tomáš David](#) (M2, Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.)

Viskozita stéricky stabilizovaných latexů: Validace modelu

09:10 [Bc. Samuel Frej](#) (M2, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

Magnetoliposomes and navigation in a magnetic field

09:30 [Bc. Kristýna Idžakovičová](#) (M2, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Modelling of flow in membrane spacers

09:50 [Bc. Martin Jůza](#) (M2, doc. Dr. Ing. Milan Jahoda)

Ztráta tlaku při průchodu bezpečnostní pojistkou

10:30 [Bc. Kateryna Kornienko](#) (M2, Ing. Viola Tokárová, Ph.D.)

Využití enkapsulace při vývoji dvousložkových antibakteriálních nosičů

10:50 [Bc. Katarína Kováčová](#) (M2, prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha)

Stanovenie koeficientu prestupu hmoty na strane kvapalného filmu v pervaporačnom membránovom module

11:10 [Bc. Jindřich Kropáček](#) (M2, RNDr. Ivan Řehoř, Ph.D.)

Samoskladba hydrogelových mikrorobotů do aktuujících struktur

11:30 [Bc. Martin Krov](#) (M2, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.)

Spheromat for the production of innovative solid-lipid drug formulations

11:50 [Bc. Markéta Kubiková](#) (M2, Ing. Michal Babič, Ph.D.)

Polymerní částice se superhydrofobním jádrem

Cascade of rectification columns - modeling and economic evaluation using a standard simulation program

Bc. David Van Gelder Adjar (M2)

Školitel: Ing. Martin Kohout, Ph.D.

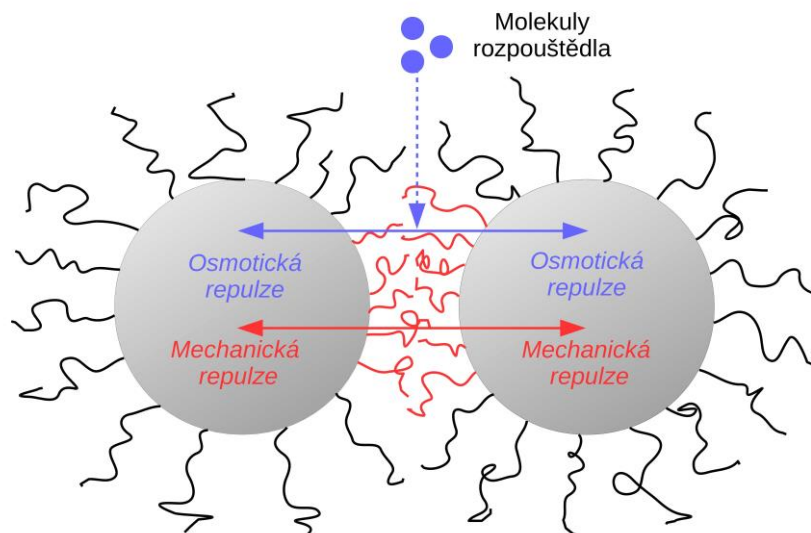
This project involved the modeling of a cascade of rectification column and an economic evaluation of the process using the standard simulation software AspenPlus. The aim of this project was to perform a synthesis analysis on a 4-component mixture to determine the optimal operation conditions and the most economically viable variant of synthesis. The 4-component mixture is made up of propane, i-butane, n-butane and i-pentane. The research covered distillation, rectification, the use of rectification columns and the use of synthesis in process engineering. All the sequencing and modeling of the columns were done without the use of the economic evaluation package. This helped in having a fair idea of what the various sequences would look like and were based on the physical and chemical properties of the olefins used in the process. The economic evaluation and optimization were then incorporated, and this helped to decide the size and type of the various columns in the models. At this stage, most decisions were made using a combination of the economic value and how the process responds to the various changes. A look at the results obtained, show all the various good economic values obtained as well as good performance of various process models.

Viskozita stéricky stabilizovaných latexů: Validace modelu

Bc. Tomáš David (M2)

Školitel: Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.

Syntetické latexy, tj. disperze pevných nanočástic v kapalném médiu, jsou významnou průmyslovou komoditou, např. v průmyslu s nátěrovými hmotami. Pro finální produkt je velmi důležitá stabilita dispergovaných nanočástic, tedy schopnost neagregovat, díky které dochází ke zvýšení životnosti produktu. Stabilitu koloidních suspenzí lze dosáhnout různými mechanismy. Neiontová stabilizace, která je předmětem této práce, je zprostředkována řetězci povrchově aktivní látky, které jsou ukotveny na povrch částic a tím zamezují jejich agregaci. Cílem této práce je vytvořit matematický model schopný předpovídat reologické vlastnosti neiontově stabilizovaných latexů na základě ryze fyzikálních úvah, tedy bez použití empirických vztahů, které jsou v této oblasti doposud využívány. Za tímto účelem byl vyvinut dynamický model toku suspenze založený na tzv. metodě diskretních elementů (DEM). V modelu jsou zahrnuty kontaktní a nekontaktní mezičásticové interakce, interakce se stěnou, vzájemná interakce mezi částicemi a tekutinou. Jedním z posledních kroků ve vývoji modelu je jeho validace. Výsledky validujeme pomocí experimentálních dat převzatých z literatury, které představují měření viskozity suspenze v závislosti na rozličných parametrech systému.



Magnetoliposomes and navigation in a magnetic field

Bc. Samuel Frei (M2)

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

Liposomes are spherical vesicles formed by a phospholipid bilayer surrounding a hydrophilic lumen. Recently, the possibility of combining liposomes with magnetic nanoparticles started to be studied. The structure created by the incorporation of nanoparticles to liposomes is referred to as magnetoliposomes (MLs). MLs would not only allow a targeted delivery using a magnetic field but also create an option of MRI observation. Three main approaches are generally studied: incorporation of nanoparticles to the bilayer, to the lumen, or to the surface. However, these have some issues, mainly destabilization of the bilayer and competing for space with the loaded substance. In this work different type of the MLs was prepared. They are formed by a core of iron oxide nanoparticles, which are stabilized by phospholipid forming the bilayer. The core is surrounded by liposomes. This structure still allows the loading of both hydrophilic and lipophilic substances, while the loading capacity is not reduced. It also results in better magnetic properties. Experiments confirmed the possibility of using a magnetic field to deliver MLs to the acceptor site, where the model substance was released and absorbed by acceptor. This work further focuses on spatial delivery of MLs using multiple magnets.

Modelling of flow in membrane spacers

Bc. Kristýna Idžakovičová (M2)

Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

The performance of electro dialysis unit is influenced by flow inside the cells of the unit. Net-like flow distributors (spacers) are heavily used in industry because they enhance solution mixing which reduces concentration polarization close to the membranes. Commonly used polymer spacers are either extruded (ladder-like fibers) or woven (intertwined fibers). Their structure, shape of fiber, and orientation towards the direction of the flow influence the flow pattern, pressure drop and mass transfer in membrane module. Experimental study of each type of spacers can be very time-consuming and expensive. Thus, mathematical modelling represents a unique tool in the analysis and optimization of spacer geometry and performance. In this study, I examine laminar and turbulent models of flow inside two spacer types – extruded and woven with rounded fibers, each at two different orientations towards the direction of flow. For all simulations, I utilize the open-source computational fluid dynamics (CFD) programme OpenFOAM. Hydrodynamic results show almost no difference in flow pattern and pressure drop for laminar and turbulent regime, which suggests that the laminar flow model is sufficient for the flow description in the studied spacers.

Ztráta tlaku při průchodu bezpečnostní pojistkou

Bc. Martin Jůza (M2)

Školitel: doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

Příspěvek je zaměřen na modelování proudění uvnitř multifunkčního ventilu včetně bezpečnostní pojistky tlakových zásobníků na stlačený zemní plyn. Multifunkční ventil má jak funkci uzavírací, tak napouštěcí. Bezpečnostní tlaková pojistka je tvořena pístem, který je v uzavřené poloze držen zatuhlou nízkotavitelnou slitinou. Při zvýšení teploty nad 110 °C dojde k roztavení slitiny, což vede k uvolnění pístu a úniku stlačeného zemního plynu z tlakové lahve. Maximální tlak v lahvi je 200 bar a pokud dojde k otevření pojistky vlivem tepelného zatížení, může se vytvářet tzv. jet fire, tedy tryskový požár. Z hlediska bezpečnostního inženýrství je vhodné získat představu o tlakovém a rychlostním poli při úniku plynu ze zásobníku přes multifunkční ventil a bezpečnostní pojistku. Vzhledem k vysokým výtokovým rychlostem a kompaktní stavbou ventilu jsou hodnoty velmi těžko měřitelné. Tyto parametry je vhodné získat CFD výpočtem. Vzhledem k rozdílné geometrii a rozměrům vnitřní části pojistky (v řádech milimetrů) a vnějšího okolí (v řádech metrů) je vhodné rozdělit řešenou úlohu na dvě samostatné oblasti. Výstup ze simulace toku ventilem a pojistkou bude sloužit jako vstup pro simulaci tryskového požáru.

Využití enkapsulace při vývoji dvousložkových antibakteriálních nosičů

Bc. Kateryna Korniienko (M2)

Školitel: Ing. Viola Tokárová, Ph.D.

Enkapsulace je proces zapouzdření aktivních látek do polymerní matrice. Takovými látkami mohou být např. léčiva, proteiny nebo buňky. Enkapsulace se využívá pro zvýšení stability a zachování aktivity zapouzdřených materiálů, např. při skladování nebo transportu. To jsou důležitá kritéria pro výrobu produktů ve farmaceutickém a potravinářském průmyslu. Tato práce se zabývá přípravou polymerních mikročástic pro zapouzdření enzymu alliinázy. Alliináza je enzym nacházející se v buňkách česneku, a spolu se substrátem (alliin) reaguje za vzniku alicinu. Alicin, vysoce reaktivní a nestabilní sloučenina s antibakteriálním účinkem, se v buňkách česneku nenachází volně, ale vzniká výš zmíněnou enzymatickou reakcí při porušení buněčné stěny. Cíl této práce je napodobit přírodní mechanismus a vyvinout antibakteriální mikročástice. Byly připraveny alginátové mikročástice se zapouzdřenou alliinázou pomocí enkapsulátoru BÜCHI B-395Pro. Sledovala se stabilita a aktivita volného a enkapsulovaného enzymu. Přidáním substrátu k mikročásticím byl diskovou difuzní metodou ověřen antibakteriální účinek mikročástic na bakteriálním kmenu *E. coli*. Součástí práce je návrh přípravy teplotně řízených dvousložkových nosičů, ve kterých bude jádro tvořeno voskem s nízkou teplotou tání a slupka z alginátu.

Stanovenie koeficientu prestupu hmoty na strane kvapalného filmu v pervaporačnom membránovom module

Bc. Katarína Kováčová (M2)

Školiteľ: prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha

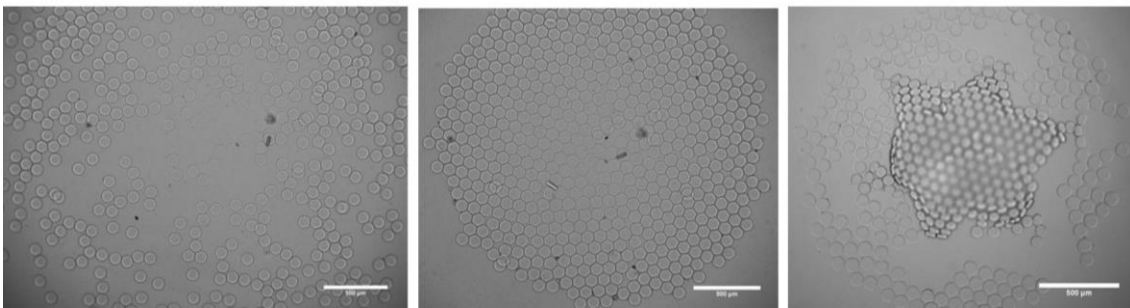
Pervaporácia je membránový proces určený na separáciu kvapalných zmesí. Technika membránovej separácie je jedným z najslubnejších úspechov v energeticky úsporných technológiách. Pervaporáciu je možné využiť na separáciu zložiek, ktoré sú ťažko separovateľné pomocou destilácie, extrakcie, adsorpcie a absorpcie, napríklad separácia azeotropických zmesí. Proces zahŕňa selektívnu sorpciu tekutej zmesi do membrány, difúziu cez membránu a desorpciu do plynnej fázy na permeátovej strane. Účelom práce je realizovať proces separácie etanolu od vody a neskôr aj inej zmesi, ktorá sa svojimi vlastnosťami viac podobá viskóznemu fermentačnému médiu. Ich oddelenie má veľký význam pre výrobu etanolu z biomasy pomocou fermentácie. V poslednom desaťročí sa tento proces stal predmetom záujmu z dôvodu hroziaceho nedostatku ropy. Jednou z hlavných výhod tohto procesu je to, že palivá sa vyrábajú z obnoviteľných zdrojov. Proces prebieha na membránovom module v laboratórnom merítke s membránami veľkosti 5,56cm x 20,50cm. Predmetom meraní je snaha o ich separáciu pri rôznych prietokoch plynu a kvapaliny, čo bude pre nás najdôležitejší krok pri určovaní transportných charakteristík, konkrétne koeficientu prestupu hmoty na kvapalnej strane.

Samoskladba hydrogelových mikrorobotů do aktuujících struktur

Bc. Jindřich Kropáček (M2)

Školitel: RNDr. Ivan Řehoř, Ph.D.

Miniaturizace robotů umožňuje jejich rozšíření do nových oblastí lidské činnosti, jakými jsou mikromanipulace, neinvazivní diagnostika nebo mikrochirurgie. V takovém měřítku je však obtížné vytvořit roboty jaké známe, napájené elektřinou a programově řízené. Hydrogelové mikroroboty jsou z měkkého deformovatelného materiálu a jsou schopny vykonávat mechanickou práci při velikosti desítek mikronů. V naší skupině byl nedávno představen hydrogelový mikrorobot, schopný absorpcí laserového záření konat řízený aktivní pohyb, případně manipulovat s jinými objekty. Takové roboty se jeví jako vhodné základní stavební jednotky větších celků. Mým cílem je využití mikrorobotů tvaru disku k přípravě miliskopických aktuátorů. Naše roboty jsou kromě aktivního pohybu po substrátu schopny se pasivně pohybovat po nakloněné rovině. Více takových robotů minimalizuje potenciální energii zaujmutím nejtěsnějšího uspořádání v nejnižším bodu substrátu. Uspořádané roboty následně podrobují polymerační reakci, kterou se jednotlivé roboty spojují do jednoho celku. Při tom dochází k deformaci jednotlivých disků, což vede při spojování k regulovatelné deformaci celého objektu. Vzniklé struktury jsou schopné konat mechanickou práci zahříváním a v budoucnu bych chtěl celé struktury aktivovat laserovým zářením.



Spheromat for the production of innovative solid-lipid drug formulations

Bc. Martin Krov (M2)

Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Low bioavailability of poorly water-soluble drugs is a major problem in today's pharmaceutical science. Among other approaches, solid-lipid drug formulations based on the so-called oil marbles have been shown to have the potential to eliminate this issue. Liquid marbles are particles consisting of a liquid core covered with a layer of powder. At present, however, liquid marbles and formulations based on them are prepared by hand, as there are no available devices or machines facilitating their production. Therefore, in order to make larger scale studies and industrial applications possible, a quicker and more reliable solution is required. The aim of this work is to construct and optimize a prototype of an apparatus allowing production of liquid marbles on a larger scale and to find its operational limits. A prototype called the Spheromat was built and its capability to produce both water based liquid marbles and polyethylene glycol marbles was proved experimentally. The region of feasibility in regard to process parameters was investigated in order to find the limits of the system for reliable production of monodisperse liquid marbles and solid-lipid drug formulations based on them.

Polymerní částice se superhydrofobním jádrem

Bc. Markéta Kubiková (M2)

Školitel: Ing. Michal Babič, Ph.D.

Rozvoj biotechnologických i medicínských oborů přináší nové požadavky a možnosti na vývoj vícefunkčních mikro- a nanočástic pro oblast diagnostiky, terapii, mikrobiologie a buněčné terapie. Cílem projektu je příprava mikročástic s architekturou core-shell se superhydrofobním jádrem a s povrchem upraveným tak, aby umožňoval použití ve vodných biologických prostředích s potenciálním využitím jako nosiče kontrastních látek pro výše zmíněnou diagnostiku a biotechnologie. Částice jsou připravovány metodou disperzní polymerace akrylátového monomeru se superhydrofobním bočním substituentem. Jako stabilizátor je používán hydrofilní polymer na bázi substituovaného akrylamidu připraveného pseudoživou RAFT polymerací s úzkými distribucemi různých molekulových vah. Práce je směřována k nalezení vhodných reakčních podmínek pro přípravu těchto částic a k popisu vlivu reakčních podmínek na morfologii, velikost a distribuci velikosti částic.

Chemické inženýrství 7

KOMISE

prof. Dr. Ing. Juraj Kosek (předseda)

Ing. David Zůza

Ing. Přemysl Richtr

Ing. Martin Hubička (Lovochemie)

PROGRAM

08:30 [Bc. Tereza Ludvíková](#) (M2, prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha)

Active surface of amperometric probes - study and modification

08:50 [Bc. Dominik Martynek](#) (M2, prof. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.)

Impact of crystallization and post-processing parameters on metformin crystals properties

09:10 [Bc. Pavlína Michaláková](#) (M2, Ing. Denisa Lizoňová)

Využití smíšených tkáňových kultur ve výzkumu biodistribuce nanočástic

09:30 [Bc. Michaela Mikešová](#) (M2, Ing. Petr Mazúr, Ph.D.)

Screening dusíkatých heterocyklických sloučenin pro aplikaci v redoxních průtočných bateriích

09:50 [Bc. Juraj Myšiak](#) (M2, Ing. Ján Janošovský, Ph.D.)

Návrh viacčlennej odparky na výrobu sušeného mlieka v prostredí Matlab

10:30 [Bc. Kristina Oftnerová](#) (M2, doc. Dr. Ing. Milan Jahoda)

Numerická předpověď výtoku plynu z bezpečnostní pojistky

10:50 [Bc. Adam Vondra](#) (M2, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Zjednodušený model trojcestného katalyzátoru výfukových plynů

11:10 [Bc. Simona Podhradská](#) (M2, Ing. Gejza Katona)

Analýza zanášania druhého reakčného okruhu výroby polypropylénu

11:30 [Bc. Michael Puffer](#) (M2, doc. Ing. František Rejl, Ph.D.)

Design aparatury ke stanovení efektivní mezifázové plochy při destilaci pomocí termografie

11:50 [Bc. Ondřej Vítovec](#) (M2, doc. Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.)

Elektroforetická separace v mikrofluidních systémech

Active surface of amperometric probes - study and modification

Bc. Tereza Ludvíková (M2)

Školitel: prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha

Pressurized water reactors are the most common nuclear reactors worldwide. In the primary circuit of a reactor, high pressurized water serves as a coolant, moderator, and heat transfer medium. The coolant water is treated with several chemicals to operate the circuit at suitable conditions. One of the main additives used in the primary circuits is hydrogen (H_2), which suppresses radiolytic oxygen formation, that would lead to pipeline corrosion and fuel deposits. At present, the H_2 concentration is mostly determined indirectly or by expensive optical devices. Hence, a new device - an amperometric probe is developed as a cheaper alternative. The conditions are not suitable for measurements directly in the primary circuit (temperature over 300 °C, pressure up to 16 MPa), they are performed in a bypass with reduced pressure and temperature. The developed probe consists of a silver cathode, a NaCl electrolyte, and a platinum anode with an active surface on which the hydrogen is oxidized. The H_2 oxidation provides electrons that are transferred within the probe circuit. The measured current indicates the H_2 concentration. The present goals are to study the deposition of the active surface on a platinum anode, to optimize the deposition process and monitor the long-term stability.

Impact of crystallization and post-processing parameters on metformin crystals properties

Bc. Dominik Martynek (M2)

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

Crystallization is at present key technique used in pharmaceutical industry, as it serves to purify active pharmaceutical ingredients (API) and to achieve consistent product. Most APIs crystallize in non-spherical shape, which leads to problems during further processing, both at subsequent steps of product synthesis and when applying finished drug. Needle-like crystals will be studied in this work using metformin hydrochloride (MET), which is a drug applied to treat type 2 diabetes. It is supplied as a powder aggregated to large chunks, requiring further processing before tableting. Aim of the work is to investigate impact of crystallization conditions on the crystal size distribution (CSD) and crystal shape of MET, as well as impact of follow up processes of filtration and drying to cover complete API production technology. While crystallization parameters had little impact on CSD, agglomeration was observed during drying, which led to addition of washing step. Produced crystals were analyzed using FBRM, online and offline image analysis and Raman spectroscopy. Combination of mentioned techniques allowed us to determine the bottleneck of the process and by introducing washing step we were able to reduce formation of agglomerates, and thus improve properties of MET crystals.

Využití smíšených tkáňových kultur ve výzkumu biodistribuce nanočástic

Bc. Pavlína Michaláková (M2)

Školitel: Ing. Denisa Lizoňová

Onkologická léčba je ve většině případů doprovázena mnoha nežádoucími účinky, což vede ke značnému zhoršení kvality života pacientů a také k omezení terapeutické použitelnosti této léčby. To je způsobeno převážně tím, že signifikantní procento tradičně užívaných cytostatik není schopno rozeznat pouze nádorové buňky. Řešením může být užití transportních systémů – nanočástic – díky kterým je možné léčivou látku doručit na cílené místo a výrazně snížit množství nežádoucích účinků. Problémem při jejich užití ovšem zatím je, že jsou do velké míry vychytávány buňkami imunitního systému. Cílem této práce bylo studovat interakce nanočástic s nádorovými a imunitními buňkami v čase. Nejprve byly připraveny křemičité nanočástice, které byly následně modifikovány, aby mohlo dojít k jejich cílenému doručení na základě vazby protilátka-antigen. Fluorescenční mikroskopie v kombinaci s průtokovou cytometrií byla použita za účelem pochopení procesů fagocytózy nanočástic imunitními buňkami a specifických interakcí protilátka-antigen. Kvantitativní výsledky z měření pomocí průtokové cytometrie byly použity k sestavení farmakokinetického modelu. K ověření, zda je možné výše zmíněné procesy detekovat také simultánně, byly provedeny experimenty se smíšenými kulturami imunitních a nádorových buněk.

Screening dusíkatých heterocyklických sloučenin pro aplikaci v redoxních průtočných bateriích

Bc. Michaela Mikešová (M2)

Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Se zvyšující se poptávkou po energii z obnovitelných zdrojů se více projevují limitace tohoto způsobu získávání energie, zejména fluktuace produkce, což s sebou přináší potřebu stacionárních úložišť energie. Dnes se k tomuto účelu využívají převážně lithium-iontové baterie, avšak i průtočné elektrochemické články si získávají své místo. Důležitou součástí baterie je elektrolyt, na jehož fyzikálně-chemických vlastnostech významně závisí technické, ekonomické a environmentální parametry. V současnosti jsou intenzivně hledány nové organické látky požadovaných vlastností (vhodný redoxní potenciál, vysoká rozpustnost a stabilita, nízká cena). Tato práce se zabývá elektrochemickou charakterizací série systematicky syntetizovaných dusíkatých heterocyklických sloučenin pomocí voltametrických měření na statické a rotační diskové elektrodě ze skelného uhlíku. Z voltametrických křivek jsou vyhodnocovány relevantní parametry (formální potenciál reakce, kinetické parametry, difuzní koeficient). Pro tyto účely byl v rámci práce vyvinut a ověřen matlabovský skript umožňující univerzální vyhodnocení experimentů. Získané výsledky jsou diskutovány v souvislosti s experimenty v laboratorním průtočném poločlánku s ohledem na jejich elektrochemickou stabilitu při cyklickém nabíjení-vybíjení.

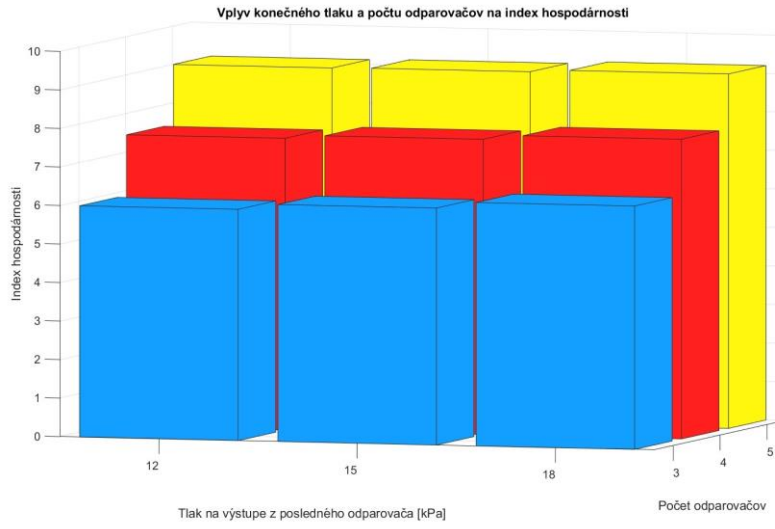
Návrh viacčlennej odparky na výrobu sušeného mlieka v prostredí Matlab

Bc. Juraj Myšiak (M2)

Slovenská technická univerzita v Bratislave

Školiteľ: Ing. Ján Janošovský, PhD.

Cieľom tejto práce je navrhnúť viacčlennú suprúdnú vákuovú odparku na výrobu sušeného mlieka v prostredí Matlab®. Mlieko je zahusťované z 9 % hm. na 48% hm. Prvá časť práce je venovaná postupu pri tvorbe programu. Model v programe je založený na materiálových bilanciách, energetických bilanciách a rýchlostnej rovnici prestupu tepla. Vstupné informácie do modelu boli získané literárnou rešeršou ako aj prevzaté z reálnych priemyselných podmienok. Ďalšia časť práce je venovaná analýzám vplyvu parametrov ovplyvňujúcich proces. Prvým parametrom je zapojenie termokompresora. Ďalším parametrom je počet členov odparky. Následne je skúmaný vplyv tlaku ostrej pary a nakoniec je sledovaný vplyv tlaku na výstupe z posledného stupňa odparky. Výstupom riešeného projektu sú prehľadné 2D a 3D grafy mapujúce závislosť kľúčových parametrov od rôznych spôsobov zapojenia odparky. Výsledky z týchto analýz sú porovnávané na základe indexu hospodárnosti, spotreby ostrej pary a celkovej teplovýmennej plochy odparky. Indexy hospodárnosti sa pohybovali v rozsahu 2 až 11. Poslednou časťou práce bola úprava programu na optimalizáciu výpočtového času programu. Pomocou reštrukturalizácie výpočtových rovníc a optimalizáciou tvorby nástrelného bolo dosiahnuté skrátenie výpočtového času až o 99,5 %.



Numerická předpověď výtoku plynu z bezpečnostní pojistky

Bc. Kristina Oftnerová (M2)

Školitel: doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

Základní otázkou v požární bezpečnosti vozidel na stlačený zemní plyn (CNG) je rozsah a dosah proudu plynu při otevření bezpečnostní pojistky na tlakovém zásobníku. Vozidla na CNG jsou vhodnou alternativou vozidlům na kapalná uhlovodíková paliva s ohledem na současnou cenu a dojezd elektromobilů. Z pohledu bezpečnosti jsou vozidla na CNG srovnatelná s vozidly na benzín nebo motorovou naftu. Základní rozdíl je ale v chování požáru v případě zahoření vozidla. CNG je umístěno v tlakových zásobnících, přičemž maximální tlak v zásobníku je 200 bar. Každý zásobník je proti roztržení působením zvýšené teploty chráněn tlakovou bezpečnostní pojistkou, která je spouštěná zvýšenou teplotou. Po otevření pojistky uniká stlačený zemní plyn do okolí vozidla. V případě smíšení se vzdušným kyslíkem a iniciací může dojít k plamennému zahoření. Jedná se o tzv. tryskový plamen, který je velmi nebezpečný svojí intenzitou. Cílem práce je pomocí metody CFD namodelovat proud plynu odcházející z bezpečnostní pojistky, jeho rychlostní pole a dále koncentrační pole zemního plynu.

Zjednodušený model trojcestného katalyzátoru výfukových plynů

Bc. Adam Vondra (M2)

Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Množství škodlivin ve výfukových plynech automobilů je regulováno emisními normami. V rámci plnění emisních limitů je nezbytné použití katalytických reaktorů umožňující efektivní zreagování toxických složek v automobilových výfukových plynech (zejména oxidu uhelnatého, oxidů dusíku a uhlovodíků) na zdraví neškodné látky (oxid uhličitý, vodní páru a dusík). U benzínových motorů se používá trojcestný katalyzátor, který při stechiometrickém poměru vzduch:palivo dosahuje vysoké konverze všech sledovaných škodlivin. Předmětem zkoumání v této práci je zjednodušení reakční kinetiky ve stávajícím matematickém modelu trojcestného katalyzátoru tak, aby výsledný model obsahoval co nejméně složek a reakcí, simulace proběhla v co nejkratším čase a byla výpočetně nenáročná. Zásadního zjednodušení je dosaženo sloučením skutečných složek plynu do pouze dvou zástupných složek: oxidující (O_2 , NO_x) a redukující (CO , H_2 , C_xH_y). Takto zjednodušený matematický model může být použit například pro výpočet přímo v automobilu v reálném čase pro lepší řízení provozních parametrů motoru a katalyzátoru.

Analýza zanášania druhého reakčného okruhu výrobne polypropylénu

Bc. Simona Podhradská (M2)

Slovenská technická univerzita v Bratislave

Školiteľ: Ing. Gejza Katona

Polypropylén patrí k najvšestrannejšie využívaným polymérom. Hlavným problémom výrobnej jednotky Polypropylén 3 (PP3) v spoločnosti SLOVNAFT, a.s. je časté zanášanie fluidného reaktora a výmenníka tepla, pričom minimálne 3-krát ročne je potrebné kompletne čistenie zariadení, čo je ekonomicky náročné. Cieľom tejto práce bola analýza procesných dát z posledných troch rokov a optimalizácia rýchlosti cirkulačného plynu v závislosti od vyrábaného typu polyméru. Na základe týchto dát boli graficky analyzované prvé chody po čistení reaktora 2, kde je zanášanie cirkulačného chladiča najmarkantnejšie a porovnaním procesných parametrov sa podarilo zistiť podmienky, pri ktorých je toto zanášanie pomalšie.

Design aparatury ke stanovení efektivní mezifázové plochy při destilaci pomocí termografie

Bc. Michael Puffer (M2)

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

Destilace je separační metoda založená na rozdílné těkavosti složek. Destilací se ze všech separačních metod průmyslově zpracovává největší množství surovin. Destilace za sníženého nebo atmosférického tlaku se často provádí v kolonách se strukturovanou výplní. Mezi hlavní transportní parametry strukturovaných výplní patří efektivní mezifázová plocha a koeficient přestupu hmoty na straně plynu a na straně kapaliny. Velikost efektivní mezifázové plochy výplně se tradičními metodami určuje velice obtížně a její odhady v literatuře se liší řádově. Cílem mé práce je vyvinout aparaturu, ve které budou panovat destilační podmínky a zároveň bude možno sledovat destilační prostor termokamerou. Snímky z termokamery budou zaznamenávat teploty fázového rozhraní. Na základě těchto teplot a při srovnání s teplotami v jádru fáze lze určit na jaké části výplně dochází ke sdílení hmoty a tím určit efektivní mezifázovou plochu. V rámci vývoje aparatury je třeba řešit inženýrské výzvy od základních výpočtů rektifikační kolony, designu, modelování a technických řešení distributoru kapaliny, distributoru páry a dalších prvků aparatury až po uvedení aparatury do provozu.

Elektroforetická separace v mikrofluidních systémech

Bc. Ondřej Vítovec (M2)

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

V poslední době rostou požadavky na detekci infekčních a rakovinových onemocnění. Zejména v rozvojových zemích je dostupnost lékařských diagnóz minimální. Levnější náklady při diagnóze mohou nabídnout laboratoře na čipu (LOC – „lab on chip“), což jsou mikrofluidní zařízení schopné biologické analýzy. Takové systémy pracují na principu analýzy určitých látek, které jsou v těle přítomny jen spolu s nějakou nemocí nadměrné koncentrací. Takový proces obsahuje předpřípravu reálného vzorku, následnou koncentraci na určitém místě a nakonec detekci hledaných látek. Tématem této práce je především první část tohoto procesu. Počáteční separace reálného vzorku je velmi důležitá kvůli separaci látek, které jsou následně v procesu potřeba. Takové předčištění směsi se může provádět separačními metodami, jako je např. gelová elektroforéza. Tato základní metoda používající se pro separaci DNA a proteinů ve stejnosměrném elektrickém poli spočívá v migraci elektricky nabitých molekul. Při tomto pohybu je možné pozorovat jejich separaci, protože každá z nich má jinou elektroforetickou mobilitu. Bylo vyvinuto mikrofluidní zařízení, které je schopno separovat elektricky nabitě částice. Po postupné optimalizaci navrhnutého čipu byly provedeny úspěšné separace jednoduchých směsí.

Chemické inženýrství 8

KOMISE

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

Ing. Jiří Charvát

Ing. Lucie Mašková

Ing. Václav Babuka (Synthos)

PROGRAM

08:30 [Bc. Jakub Píchal](#) (M2, prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha)

Dlouhodobé měření koncentrace vodíku pomocí amperometrické sondy

08:50 [Bc. Martina Reisnerová](#) (M2, Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.)

Stanovení objemového koeficientu přestupu hmoty v plynné fázi testovací metodou $\text{NH}_3/\text{H}_2\text{SO}_4$ na strukturované výplni Mellapak 250Y

09:10 [Bc. Lukáš Šatura](#) (M2, Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.)

An Adhesive Based on PHA Biopolymer from Biowaste: Preparation and Characterisation

09:30 [Bc. Antonín Šperlich](#) (M2, Ing. Mária Zedníková, Ph.D.)

Způsoby vyhodnocení kritické frekvence různých typů míchadel v disperzi kapalina-plyn

09:50 [Bc. Jan Šugar](#) (M2, Ing. Viola Tokárová, Ph.D.)

Temperature-responsive microcarriers for non-enzymatic harvesting of mammalian cell cultures

10:30 [Bc. Adam Tylich](#) (M2, prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha)

Vyhodnocovací program pro měření k_{La} - parametrická studie

10:50 [Bc. Aleš Palkovič](#) (M2, doc. Dr. Ing. Milan Jahoda)

Modelování hašení v programu OpenFOAM

11:10 [Bc. Adam Waněk](#) (M2, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.)

Studium tisknutelnosti vybraných účinných látek a 3D tisk duálních tablet

11:30 [Bc. Pavel Zelenka](#) (M2, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

Návrh a stavba zařízení pro částicovou 3D velocimetrii

11:50 [Bc. Milan Žalud](#) (M2, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Řízení struktury katalytické vrstvy nanášené do filtru pevných částic

Dlouhodobé měření koncentrace vodíku pomocí amperometrické sondy

Bc. Jakub Píchal (M2)

Školitel: prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha

Cílem výzkumu je vyrobit amperometrickou sondu pro měření koncentrace vodíku v kapalině. Účelem sondy je měření vodíku v primárním okruhu jaderných elektráren, kde je vodík dávkován z bezpečnostních a antikoročních důvodů. Sonda bude zapojena v obtoku, kde je nižší tlak i teplota než v primárním okruhu, což zmiňuje požadavky na výdrž sondy. Kvůli čtvrtletnímu plánu údržby provozu je nutné pro průmyslové využití konstruovaných sond zajistit stabilitu jejich signálu na dobu minimálně tří měsíců. Při výrobě sondy se vychází ze zkušeností získaných při práci s amperometrickou sondou pro měření kyslíku, která byla na pracovišti vyvinuta a nasazena v jaderných elektrárnách již dříve. Vodíková sonda se skládá z Pt anody, AgCl katody a elektrolytu-roztoku KCl. Vodík, obsažený v kapalině proudící okolo hlavice sondy, se rozpouští v membráně překrývající platinovou anodu. Na platině se vodík oxiduje. Elektronové přenosy předané anodě jsou odváděny přes elektrický obvod ke katodě. Měřenou veličinou je elektrický proud tekoucí mezi elektrodami. Zároveň s elektrickým proudem byly měřeny údaje o teplotě a tlaku pro vývoj algoritmu korekce teplotní závislosti čidla. Periodicky byla ověřována linearita koncentrační závislosti signálu sond měřením různých koncentrací vodíku.

Stanovení objemového koeficientu přestupu hmoty v plynné fázi testovací metodou $\text{NH}_3/\text{H}_2\text{SO}_4$ na strukturované výplni Mellapak 250Y

Bc. Martina Reisnerová (M2)

Školitel: Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.

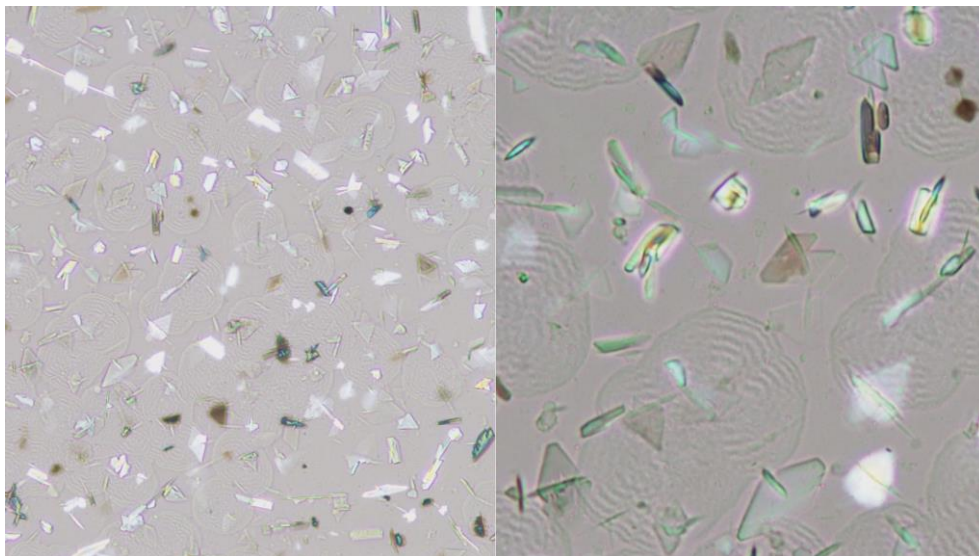
Tato práce se zabývá zkoumáním transportních vlastností strukturovaných výplní. Strukturované výplně se využívají například v absorpčních kolonách, kvůli zvětšení styčné plochy plynné a kapalné fáze a zlepšení účinnosti separace látek. Pro popis procesů se spojitým stykem fází je potřeba znát koeficienty přestupu hmoty a efektivní mezifázovou plochu. Experimentální stanovení koeficientů se provádí ve vhodně zvoleném systému, kde je odpor proti přestupu hmoty soustředěn pouze v jedné fázi. Objemový koeficient přestupu hmoty v plynné fázi neboli k_{GA} se nejčastěji získává dvěma metodami, chemisorpcí oxidu siřičitého do roztoku hydroxidu sodného a čpavku do roztoku zředěné kyseliny sírové. Ovšem literární hodnoty k_{GA} získané na různých pracovištích se až násobně liší. Cílem této práce je stanovit k_{GA} oběma metodami na jednom zařízení a tyto hodnoty porovnat. Měření byla provedena na strukturované výplni Mellapak 250Y a ve dvou kolonách s průměrem 150,6 a 290 mm. Byla otestována metodika stanovení k_{GA} chemisorpcí $\text{NH}_3/\text{H}_2\text{SO}_4$. Zkoumán byl vliv vstupní koncentrace NH_3 , průměru kolony, výšky výplně a stěnového toku na hodnoty k_{GA} . Stanovené hodnoty k_{GA} při různých průtocích jednotlivých fází byly porovnány s literárními hodnotami.

An Adhesive Based on PHA Biopolymer from Biowaste: Preparation and Characterisation

Bc. Lukáš Šatura (M2)

Školitel: Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.

Biodegradability is becoming an equivalent criterion to health safety or low price of packaging materials of food or cosmetic products. Frequently non-compliant with these criteria, an adhesive is a specific component of the packaging. In collaboration with TU Delft and a consortium of Dutch waste-treatment companies, application possibilities of poly(3-hydroxybutyrate-co-3-hydroxyvalerate), or *PHBV*, biopolymer produced from municipal biowaste in a pilot project were examined. This work aimed on design and development of a hot-melt adhesive based on a PHBV binder and additives—a potentially biodegradable and food-grade product. Several adhesive compositions were prepared and tested for thermal properties and contact with common packaging materials—paper, glass, wood, or even synthetic plastic. The resulting formulations successfully showed the potential of PHBV in adhesive applications along with significant plasticisation or tackifying effect of the chosen additives: namely *sebacic acid* and its derivative, or *rosin esters*. Optimisation of the composition can be derived feasibly from the results of this work in order to completely develop a successful industrial product. This potentially biodegradable product might profit on its partial origin from waste management.



Způsoby vyhodnocení kritické frekvence různých typů míchadel v disperzi kapalina-plyn

Bc. Antonín Šperlich (M2)

Školitel: Ing. Mária Zedníková, Ph.D.

V biotechnologických výrobcích se často využívá fermentoru, do kterého je nutné mikroorganismům přivádět plynný kyslík. Provoz bioreaktoru se optimalizuje ze dvou protichůdných hledisek. Prvním je efektivní transport kyslíku do kapaliny, který se snažíme maximalizovat. Druhým hlediskem je minimalizace smykového napětí, kterým míchadlo poškozuje mikroorganismy. Je tedy nutná znalost co nejnižší frekvence otáčení míchadla, při které už dochází ke kompletní dispergaci plynu, ale smykové napětí je minimální. Tato frekvence se nazývá kritická frekvence N_{CD} . Cílem práce je zjištění N_{CD} pro různé typy míchadel z experimentálního stanovení závislosti bezrozměrného příkonového kritéria na průtokovém čísle pro plyn. Dalším cílem práce je vytvoření softwaru pro automatické vyhodnocení N_{CD} z této závislosti. Experimenty probíhaly ve dvou temperovaných nádobách o průměru 29 a 59 cm. Příkon byl měřen u čtyř typů míchadel. Měření bylo prováděno pro tři typy vsádek (koalescentní, nekoalescentní, viskózní) a tři různé rychlosti plynu. N_{CD} byla vyhodnocována v Matlabu, kde byla nalezena minima závislosti odpovídající kritické frekvenci. Výsledky softwarového vyhodnocení byly porovnány s ručním vyhodnocením.

Temperature-responsive microcarriers for non-enzymatic harvesting of mammalian cell cultures

Bc. Jan Šugar (M2)

Školitel: Ing. Viola Tokárová, Ph.D.

Rising interest in cell therapies of various degenerative conditions and cancers is inevitably associated with cell cultivation of susceptible anchorage-dependent (adherent) cell lines (e.g., mesenchymal stem cells and pluripotent stem cells). Nevertheless, all the effort of growing large numbers of valuable cells can be compromised during the harvesting stage, which is crucial for cell viability and the overall benefit of cell therapy. Current cultivation techniques of adherent cell lines usually rely on trypsin (under cGMP conditions - recombinant trypsin), which efficiently cleaves all the cell-surface adhesive protein anchors, as well as the cell-cell junctions. However, the risk of contamination is still present, viability can be reduced, and eventually, cells might not be suitable for intended applications. On the grounds of this, a novel cell cultivation technique using temperature-responsive microcarriers to efficiently grow and harvest mammalian cell cultures without the utilization of trypsin or other proteases has been proposed in this work. The results of initial flat surfaces grafted with temperature-responsive polymer are shown and discussed as a solid foundation for proposed experimental work.

Vyhodnocovací program pro měření k_La - parametrická studie

Bc. Adam Tylich (M2)

Školitel: prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha

Mezi zařízení často využívána v průmyslu se řadí mechanicky míchané reaktory, v nichž bývá mj. optimalizována intenzita přestupu hmoty z plynné do kapalné fáze. Příkladem průmyslových aplikací jsou kromě aerobních fermentací, kdy mluvíme o tzv. fermentorech, fluorace nebo hydrogenace, kdy se jedná o dvoufázový míchaný reaktor. Pro správný návrh procesu přestupu hmoty a zařízení k tomu určeného, je třeba sledovat vlastnosti využívaných vsádek a také transportní charakteristiky, především objemový koeficient přestupu hmoty k_La . Měření probíhá v míchané nádobě, do které je dnem přiváděn vzduch. K zjištění hodnoty k_La byl v laboratoři sdílení hmoty na VŠCHT pod vedením prof. Mouchy vyvinut vyhodnocovací program. Ten z naměřených hodnot příkonu míchadel, zádrže plynu ve vsádce a z časových profilů koncentrace kyslíku měřených kyslíkovou sondou stanovuje hodnotu k_La s určitou přesností. Cílem práce je odhad této přesnosti na základě citlivosti v programu zabudovaných matematických modelů na vstupní parametry (například rychlostní konstanta kyslíkové sondy či hodnota zádrže plynu), které mohou ovlivnit stanovené hodnoty k_La .

Modelování hašení v programu OpenFOAM

Bc. Aleš Palkovič (M2)

Školitel: doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

Zvyšující se nároky na požární bezpečnost a nákladné požární zkoušky vytvářejí prostor pro rozvoj modelování požárů. Tyto modely mohou předpovědět chování požáru v rozdílných podmínkách a jsou schopny vypočítat množství uvolněného tepla a jiné veličiny. Modely hašení nejsou příliš rozšířené, proto je nejprve kladen důraz na jednoduché způsoby potlačení požáru pro ověření funkčnosti modelu. Práce se zaměřuje na simulaci hašení vodní mlhou. Tento způsob je podobný hašení sprinklerem. Voda je přiváděna pod tlakem do trysky s malými otvory, což způsobí její rozpad na kapky menší než jeden milimetr. Hlavním hasicím principem je odebrání tepla v okolí požáru při vypaření kapek. Důležitou roli zde hraje jejich velký povrch. Vznikající pára má větší objem než původní kapky, v důsledku čehož je kyslík vytlačován z oblasti požáru, a dochází tak k jeho utlumení. Dále je díky vodní mlze omezeno šíření tepla radiací. Hlavní výhodou oproti hašení sprinklerem je nižší spotřeba vody a menší škody po hašení. Simulace se věnuje tvorbě mlhy a jejím vlastnostem jako je velikost a distribuce kapek. Následovat bude příprava řešiče pro spojení hoření, tvorby spreje a hašení.

Studium tisknutelnosti vybraných účinných látek a 3D tisk duálních tablet

Bc. Adam Waněk (M2)

Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

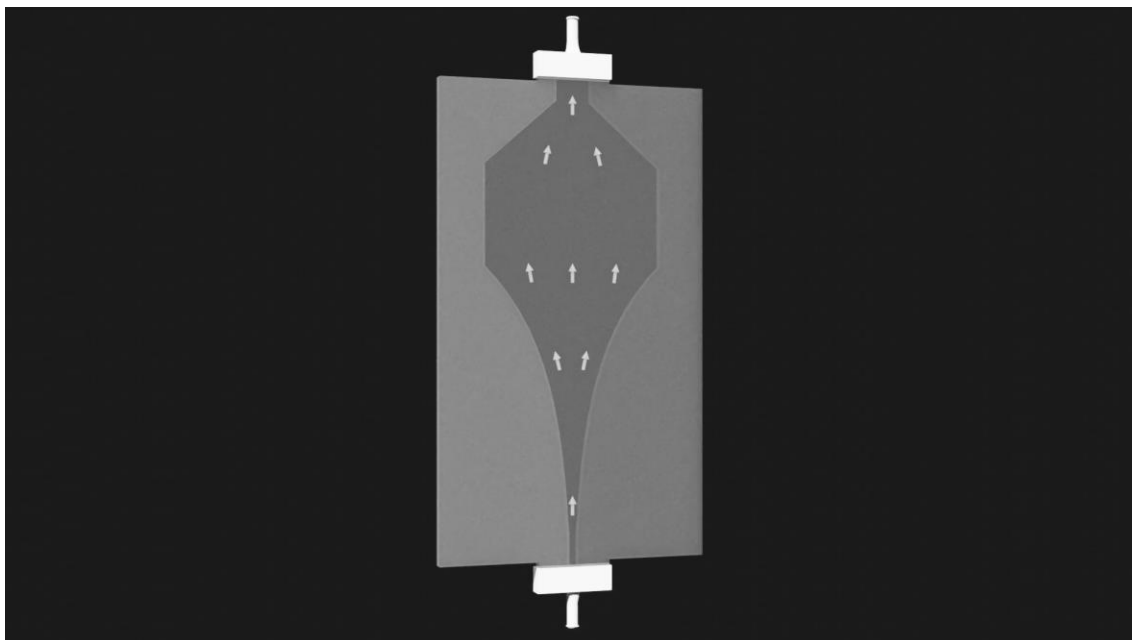
3D tisk ve farmacii jako nový rozvíjející se způsob výroby lékových forem pro personalizovanou medicínu a znamenal za posledních několik let již mnoho úspěchů. Jako jeden příklad za všechny lze zmínit první schválený 3D tištěný lék Spritam. Ve všech případech však šlo o použití pouze několika málo účinných látek, které byly vybrány s ohledem na vlastnosti důležité pro 3D tisk (vhodné mechanické a reologické vlastnosti) avšak o vhodnosti širšího okruhu dnes používaných účinných látek toho není příliš známo. V této práci byla provedena parametrická studie deseti vybraných účinných látek, které byly formulovány s pomocnými látkami a dále byly metodou hot-melt extruze vyrobeny filamenty pro FDM 3D tisk (technologie depozice taveného vlákna). Filamenty byly použity jako náplň do 3D tiskárny pomocí které byly vyrobeny tablety s různou porozitou obsahující jak jednu, tak dvě účinné látky. Vytisknuté tablety byly podrobeny rozličným testům (mechanické vlastnosti a disoluční testy). Všechna získaná data budou použita pro vývoj matematického modelu předpovídající velikost a strukturu tablet na základě předem daných kritérií (disoluční křivky, dávka účinné látky..). Model by poté mohl být použit pro "předpověď" tablet šitých na míru pacientovi na základě požadovaných vlastností.

Návrh a stavba zařízení pro částicovou 3D velocimetrii

Bc. Pavel Zelenka (M2)

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

Nezbytnou součástí studia účinků orálních lékových forem je popis procesů jejich desintegrace a rozpouštění aktivní látky. Jedním z klíčových parametrů, které ovlivňují desintegraci a disoluci částic, je velikost krystalů aktivní látky a excipientů. Tato velikost se dá měřit například síťovou analýzou či analýzou obrazu pod mikroskopem. Obě tyto metody však mají svá úskalí. Cílem této práce je návrh alternativní metody měření velikosti částic s využitím částicové 3D velocimetrie. Tato metoda se obvykle využívá pro popis proudění kapalin pomocí sledování pohybu částic, tzn. problému inverznímu než předpokládané využití pro farmacii. Pro tento účel bylo navrženo zařízení zahrnující skleněnou průtočnou celu (na přiloženém obrázku) a dvoukamerový stereoskopický snímací systém. Částice jsou uvnitř cely udržovány ve vznosu proudícím kapalným médiem a jejich polohy snímány kamerami. K charakterizaci částic je využíváno srovnání velocimetrických dat (trajektorií jednotlivých částic) s teoretickým popisem usazování a CFD modelem proudění v průtočné cele.



Řízení struktury katalytické vrstvy nanášené do filtru pevných částic

Bc. Milan Žalud (M2)

Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Emise pevných částic ze spalovacích motorů mohou mít negativní dopad jak na životní prostředí, tak na lidské zdraví. Částice vzniklé nedokonalým spalováním paliva jsou proto v moderních automobilech zachycovány pomocí filtrů pevných částic. Mimo nich jsou automobily osazeny ještě katalyzátory výfukových plynů. Zařízení, které umožňuje filtraci pevných částic i konverzi plynných škodlivin a zároveň šetří náklady a místo se nazývá katalytický filtr pevných částic. Jedná se o keramický filtr, do jehož vnitřní struktury je nanášena katalytická vrstva tvořená γ -aluminou s obsahem aktivních částic platiny. Vrstva musí mít optimální strukturu, aby co nejpříznivěji ovlivňovala klíčové vlastnosti katalytického filtru, mezi které patří vysoká filtrační účinnost a konverze při zachování nízké tlakové ztráty. Vrstva je do filtru nanášena podtlakově v podobě vodné suspenze, po nanesení je vrstva sušena a kalcinována. Úpravou klíčových parametrů suspenze, jako je velikost částic γ - Al_2O_3 nebo hodnota pH, která ovlivňuje viskozitu, lze řídit výslednou strukturu vrstvy tak, aby byla souvislá s obsahem různě velkých makropórů ve vrstvě a také vhodně distribuovaná do pórů stěny filtru. Výsledná struktura vrstvy je vyhodnocena pomocí snímků z rastrovacího elektronového mikroskopu.

Ústav fyziky a měřicí techniky (444)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

RNDr. Pavel Galář, Ph.D.

KOMISE

doc. Ing. Jaroslav Hofmann, CSc (předseda)

RNDr. Kateřina Kůsová, Ph.D.

doc. RNDr. Jaroslav Julák, CSc.

Ing. Martin Straka, Ph.D. (ÚJV Řež)

Mgr. Dr. Jana Jirešová

PROGRAM

09:00 [Jan Hrudka](#) (B3, doc. Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.)

Automatizované vyhodnocování nárůstu mikrobiálních kultur na kultivačních miskách

09:20 [Bc. Jan Kejzlar](#) (M2, Ing. Přemysl Fitl, Ph.D.)

Příprava a vlastnosti vysoce porézních kovových vrstev

09:40 [Jakub Kopenc](#) (B3, RNDr. Pavel Galář, Ph.D.)

Nano křemík jako složka výbušnin či moderních baterií

10:00 [Bc. Ondřej Laniak](#) (M1, Mgr. Anna Fučíková, Ph.D.)

Nano-otisky v kriminalistice

10:20 [Filip Matějka](#) (B3, RNDr. Pavel Galář, Ph.D.)

Příprava a povrchová modifikace křemíkových nanokrystalů metodou netermálního plazmatu

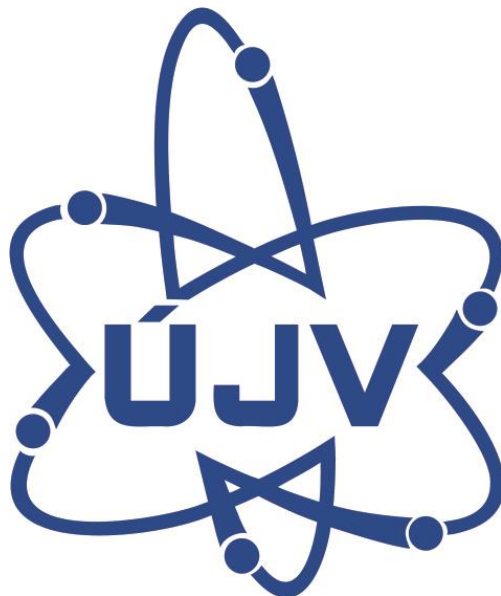
10:40 [Jindřiška Semerádová](#) (B3, doc. Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.)

Perspektivy sledování chemických procesů pomocí pokročilých rentgenových zobrazovacích metod

11:00 [Bc. Lucie Vabroušková](#) (M1, Ing. Přemysl Fitl, Ph.D.)

Chemické senzory a forenzní odorologie

SPONZOŘI ÚSTAVU FYZIKY A MĚŘICÍ TECHNIKY

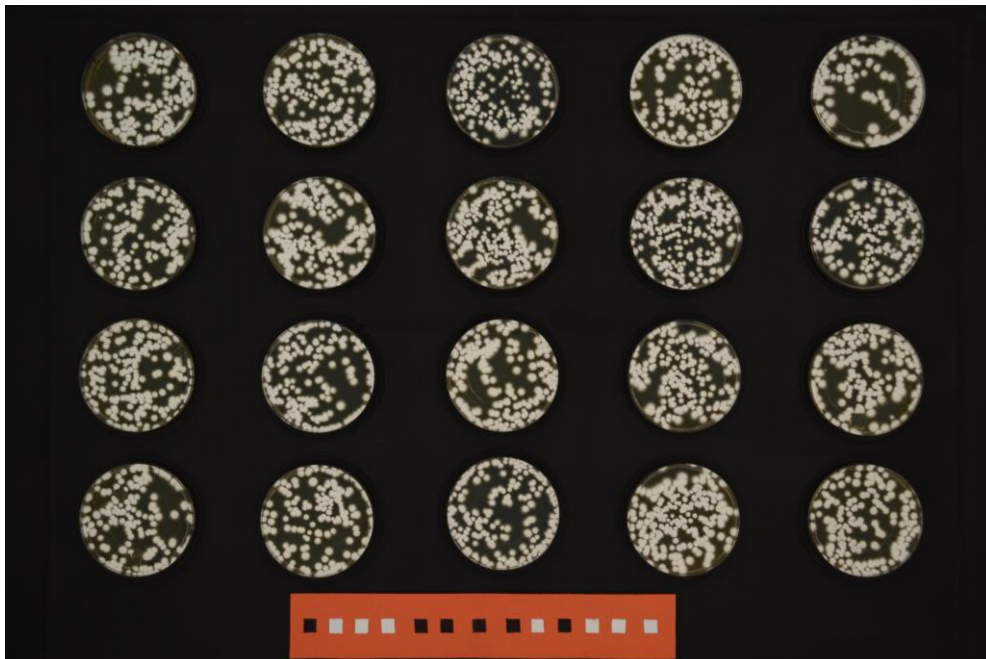


Automatizované vyhodnocování nárůstu mikrobiálních kultur na kultivačních miskách

Jan Hrudka (B3)

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

Pěstování mikrobiálních kultur na kultivačních médiích je metodou, přirozeného nárůstu populace mikroorganismů za kontrolovaných laboratorních podmínek, sloužící k jejich identifikaci, či ke zkoumání efektu vnějšího prostředí na jejich intenzitu reprodukce v čase. V současné době jsou tyto experimenty velice rozšířené, čímž dochází ke stále větší potřebě efektivních kvantitativních a kvalitativních vyhodnocovacích metod. K vyhodnocování mikrobiálních kultur se nyní využívá softwaru, které dokáží z fotografií kultur vyhodnotit zastoupení mikromycet, k čemuž je ovšem potřeba manuální asistence pracovníka u každé z fotografií, což je značně neefektivní, nepřesné a nespolehlivé. Mým úkolem je tímto projektem nalézt účinné řešení v podobě programu, který by celý proces vyhodnocení zautomatizoval, čímž by ho i zpřesnil a zefektivnil, minimalizováním lidského chybového faktoru.



Příprava a vlastnosti vysoce porézních kovových vrstev

Bc. Jan Kejzlar (M2)

Školitel: Ing. Přemysl Fitl, Ph.D.

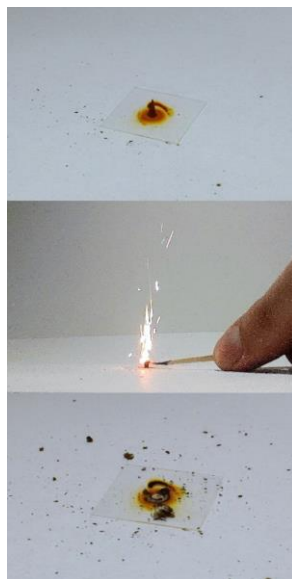
Černé kovy jsou díky svým morfologickým vlastnostem, konkrétně velkému poměru povrchu ku objemu, velmi slibným materiálem pro použití jako aktivní vrstvy plynových senzorů. Různé povrchové struktury zachytávají molekuly měřeného plynu a násobný povrch zvyšuje citlivost senzoru. Nejpoužívanější metody přípravy tenkých vrstev černých kovů zahrnují aplikaci femtosekundových laserových pulzů, leptání slitin kovů kyselinou a napařování v inertní atmosféře. Cílem této práce je probádat možnosti přípravy černých kovů pomocí technologie napařování v inertní atmosféře Argonu o tlaku 100 Pa. Připravené vrstvy černých kovů dále charakterizovat z hlediska morfologických vlastností pomocí skenovací elektronové mikroskopie (SEM) a z hlediska sensorických vlastností stanovením vodivosti vrstvy v závislosti na přítomném plynném analytu. Jako zdrojové kovové materiály byly zvoleny zlato, stříbro, bismut a antimon.

Nano křemík jako složka výbušnin či moderních baterií

Jakub Kopenec (B3)

Školitel: RNDr. Pavel Galář, Ph.D.

S vývojem technologií roste i význam polovodičových nanočástic. Jedním z nejzřetelnějších zástupců těchto materiálů jsou křemíkové nanočástice, které díky své netoxičitě, výborným optickým a elektrickým vlastnostem našli uplatnění v široké škále moderních aplikací. U těchto nanočástic bylo navíc zjištěno, že při jejich syntéze metodou netermálního plazmatu mohou bez další úpravy vázat velké množství vodíků. Přítomný vodík poté mění vlastnosti nanočástic a činí z nich snadno termálně či opticky zažehnatelné látky. Křemíkové nanočástice s takovými vlastnostmi by v budoucnu mohly být použity ve výbušninách nebo by se mohly stát součástí moderní energetiky založené na skladování vodíků. V rámci bakalářské práce mám v plánu testovat vlastnosti nanočástic křemíku připravované již zmíněnou metodou syntézy netermálním plazmatem za účelem jejich využití ve zmíněných aplikacích. Mým cílem bude změnou přidávaného množství vodíku do syntézy vytvářet série vzorků o různé optické a termální stabilitě. Po optimalizaci metodiky jejich přípravy se zaměřím na vysvětlení pozorovaných fyzikálních a chemických vlastností nejvhodnějších nanočástic a to především na základě jejich struktury, energetické struktury a povrchové chemie. První výsledky mého snažení budou součástí konferenční prezentace.



Nano-otisky v kriminalistice

Bc. Ondřej Laniak (M1)

Školitel: Mgr. Anna Fučíková, Ph.D.

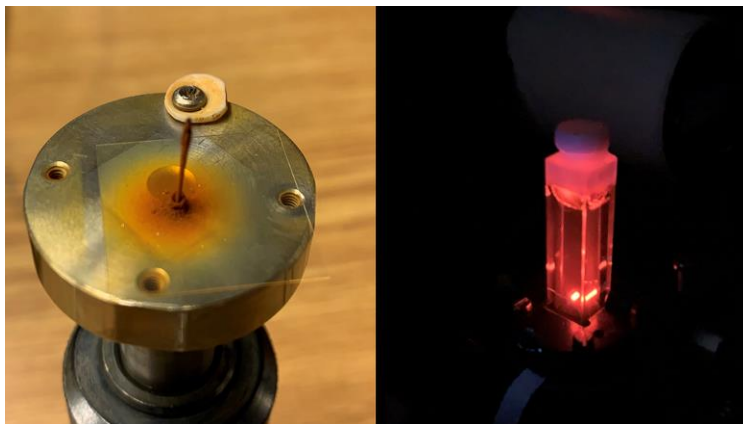
Na místech činu jsou vzorky často v minimálním až mikroskopickém množství, přesto mohou poskytovat obrovské množství informací relevantních pro vyšetřování. V této práci jsem se zaměřil na možnosti využití mikroskopu atomárních sil (AFM) ke zkoumání právě mikro-stop biologického charakteru. Jako reprezentaty těchto stop byla při experimentech použita křídla Šidélka kroužkovaného (*Enallagma cyathigerum*). Křídla vážky jsem používal zejména proto, že jejich nano-struktura je charakteristická pro daného jedince stejně tak, jako jsou otisky prstů charakteristické pro jednotlivé osoby. Cílem práce bylo získání snímku originálu křídla, vyrobení otisku křídla, oskenování tohoto otisku a identifikační porovnání se snímkem originálu. Otisky jsem vyráběl zalitím křídla, fixovaného na podložce, polymerem PDMS. V průběhu experimentů jsem vyzkoušel různé způsoby fixace křídla v Petriho misce pomocí lepicí pásky a také různé hustoty polymeru. Součástí práce bylo také porovnání AC a QI měřících módů AFM.

Příprava a povrchová modifikace křemíkových nanokrystalů metodou netermálního plazmatu

Filip Matějka (B3)

Školitel: RNDr. Pavel Galář, Ph.D.

Makroskopický křemík je nedílnou součástí lidské civilizace. V nano rozměrech má potenciál být ještě využívanější. Křemíkové nanočástice (KN) jsou dobře povrchově terminovatelné, netoxické a tělem částečně metabolizované. Díky kvantovým efektům se KN stávají efektivním zdrojem světla v širokém spektrálním rozsahu. Zmíněné vlastnosti činí KN zajímavými pro medicínské, biologické či optoelektronické aplikace. Tato práce pojednává o přípravě KN nízkotlakým netermálním plazmatem. Při přípravě byly optimalizovány parametry reakční směsi, primárně koncentrace molekulárního vodíku, a parametry výboje, tj. energie a homogenita, za účelem zlepšení vlastností KN a přípravy specifických velikostí KN. Výsledkem byla syntéza krystalických KN o rozměrech od 3 do 10 nm s intenzivní fotoluminiscencí na intervalu 680 až 1050 nm. KN byly převedeny do vodného roztoku a vystaveny atmosférickému netermálnímu plazmatu (úprava plazma aktivovanou vodou). Vysokonapěťové pulzní plasma ve vodném roztoku vytváří radikály a ionty. V kombinaci s reaktivním povrchem KN dochází k úpravě molekulárního vzhledu povrchu na bázi vzniku dusičnanových komplexů. Terminace vede k posílení intenzity fotoluminiscence až 60krát, zlepšení dispergovatelnosti ve vodě a posuvu emise. Povrchová modifikace je dlouhodobě stabilní.



Perspektivy sledování chemických procesů pomocí pokročilých rentgenových zobrazovacích metod

Jindřiška Semerádová (B3)

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

Předmětem mé práce je využití pokročilých rentgenových metod pro pozorování chemických dějů. Tyto metody jsou založeny na rozdílném útlumu, rozptylu a ohybu rentgenového záření v prostředí probíhající chemické reakce. Tuto metodu jsem použila k pozorování vybraných materiálů a růstu kvasinek.

Chemické senzory a forenzní odorologie

Bc. Lucie Vabroušková (M1)

Školitel: Ing. Přemysl Fítl, Ph.D.

Odorologie je věda zabývající se analýzou pachů a je využívána hlavně v kriminalistice pro identifikaci osob a věcí. Jedním z cílů této vědy je nahrazení současných metod, tedy využití speciálně vycvičených psů, přesnějšími přístroji s definovanou konzistentní odezvou. Takovým přístrojem je například sensorové pole chemických sensorů založené na principu změny vodivosti, impedance nebo elektromotorického napětí. V rámci této práce bylo provedeno měření na aparatuře elektronického nosu obsahující sensorové pole stávající z 9 chemických vodivostních sensorů pro měření prezence stopového množství plynných látek na bázi nanodrátů ZnO, CuO a Cu₂O. Na těchto senzorech se zkoumala odezva ve formě změny elektrického odporu pro vybrané látky z řad alkoholů, aldehydů, ketonů a esterů o koncentraci 1000, 5000 a 10000 ppm. Látky byly vybrány tak, aby měly vysokou tenzi par a silnou pachovou signaturu. V rámci práce byla otestována funkčnost a uživatelská přívětivost programu pro ovládání sensorového pole a zároveň citlivost sensorů na použité látky.

Ústav počítačové a řídicí techniky (445)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Iva Nachtigalová, Ph.D.

Aplikovaná informatika a kybernetika

KOMISE

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

Ing. Zuzana Krbcová, Ph.D.

Ing. Jan Vrba

Ing. Iva Nachtigalová, Ph.D.

Ing. Miroslav Dub, Ph.D. (firma SIDAT)

Ing. Roman Škultéty (MSD)

PROGRAM

09:00 [Bc. Jaroslav Cerman](#) (M2, Ing. Mgr. Darina Bártová, Ph.D.)

Robustní metody identifikace a modelování hydrodynamické laboratorní soustavy

09:25 [Bc. Ondřej Golda](#) (M1, Ing. Jan Vrba)

Visualization of technological process

09:50 [Tomáš Jirsa](#) (B3, Ing. Naďa Tylová)

Metodika porovnávání kvality 3D skenování

10:15 [Anna Kovárnová](#) (B2, Ing. Martin Isoz, Ph.D.)

Redukce řádu modelu pomocí vlastního ortogonálního rozkladu a umělých neuronových sítí

10:40 [Bc. Adéla Nováková](#) (M1, Ing. Jan Kohout)

Double-feedback loop control of hydraulic system

11:05 [Bc. Timotej Piták](#) (M2, Ing. Jan Vrba)

Navrhovanie regulatoru pre stavovy model drona

11:30 [Jakub Tomeš](#) (B3, Ing. Naďa Tylová)

Virtual Reality Model Assessment Platform

11:55 [Bc. Naďa Tylová](#) (M1, Ing. Jan Kohout)

Charakteristika hydraulického okruhu

12:20 [Lubomír Volák](#) (B3, Ing. Martin Schätz)

Bezkontaktní monitorování tepové frekvence pomocí RGB kamery

12:45 [Bc. Karel Štícha](#) (M2, Ing. Jan Kohout)

Vývoj mobilní aplikace pro využití v rehabilitaci mimického svalstva

SPONZOŘI SEKCE APLIKOVANÁ INFORMATIKA A KYBERNETIKA



SIDAT
AUTOMATION-INFORMATICS



Filip Kaltman

Robustní metody identifikace a modelování hydrodynamické laboratorní soustavy

Bc. Jaroslav Cerman (M2)

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

V průmyslu je potřeba optimalizovat řadu procesů. K tomu se často využívají zjednodušené modely reálných soustav. Náplní projektu je identifikace modelu hydrodynamické laboratorní soustavy GUNT RT 674 s tlakovým čidlem pro měření výšky hladiny. Soustava slouží jako věrná miniatura průmyslového reaktoru s regulovatelnou výškou hladiny. K soustavě byl připojen počítač přes měřicí kartu NI USB-6001 (National Instruments). Jedná se o zařízení určené pro sběr dat s analogově-digitálním i digitálně-analogovým převodníkem, které snadno spolupracuje se softwarem Matlab (MathWorks). Matlab je v současné době nejlepší nástroj pro numerické výpočty a modelování. Umožňuje také snadnou filtraci naměřených dat. V rámci projektu byla soustava identifikována různými metodami analýzy přechodové charakteristiky. Matematicko-fyzikální analýzou systému bylo zjištěno, že soustava je nelineární a byl určen řád soustavy. Finální model byl nakonec srovnán s naměřenými daty.

Visualization of technological process

Bc. Ondřej Golda (M1)

Školitel: Ing. Jan Vrba

The process of conduction and transfer of heat is very important part of the chemical engineering. Significant part of industry is dealing with this procedure and nowadays it plays a major part in our lives. The heat transfer stations are real life examples of this process. These stations among other things ensure supply of warm water that is used for heating and delivery of process water to flats, houses and also technological plants. The purpose of this project was to create an application that would provide a visualisation, partial control, data acquisition and up to a point capability to control the technological process of heat exchange based on real technical blueprint of the heat exchange station. This idea was based on a mutual communication among programmable logic controller, computer application, test server, database and touch screen panel. This project was processed by using several software tools, nominally SCADA/HMI system PROMOTIC, configuration instrument Unity Pro L, visual software Vijeo Designer and database system MySQL.

Metodika porovnávání kvality 3D skenování

Tomáš Jirsa (B3)

Školitel: Ing. Naďa Tylová

Virtuální 3D modely objektů jsou stále populárnější formou vizualizace a již nacházejí své uplatnění v mnoha oborech. Reálné objekty jsou vzhledem k jejich složitosti nejčastěji převáděny do virtuální podoby pomocí 3D skenování. Kvalita výsledných skenů je uživatelem hodnocena především vizuálně. Tato práce je zaměřená na popis parametrů jednotlivých 3D modelů a jejich využití při vzájemném porovnání. Pro porovnání byly vybrány 2 nejčastěji používané metody 3D skenování – fotogrammetrie a stolní laserový skener. Modely byly nejprve generovány v aplikacích MFStudio a Recap Pro a následně převedeny a zpracovány v prostředí MATLAB. 3D modely jsou tvořeny pomocí vrcholů a stěn. Tyto vlastnosti byly použity pro určení plochy, objemu a osové souměrnosti, které byly využity pro zarovnání modelů a výpočet vzájemných odlišností. Výsledné rozdíly modelů byly pro lepší přehlednost převedeny do barevné škály a vizualizovány jako 3D mapy. Tato metodika může najít své uplatnění při hodnocení kvality 3D tisku a míry zkreslení při úpravách a optimalizacích 3D modelu.

Redukce řádu modelu pomocí vlastního ortogonálního rozkladu a umělých neuronových sítí

Anna Kovárnová (B2)

Školitel: Ing. Martin Isoz, Ph.D.

S rozvojem nástrojů numerické matematiky roste sofistikovanost a komplexita modelů dostupných v inženýrské praxi. Zároveň však roste i výpočetní náročnost vyhodnocení těchto modelů tak, že znemožňuje využití těchto pokročilých modelů pro typicky inženýrské úlohy, jako je optimalizace či řízení procesů. Aplikací technik redukce řádu modelu je ale možné snížit výpočetní náročnost vyhodnocení modelu a zároveň kontrolovaně zachovat většinu jeho přesnosti. Běžné techniky redukce řádu modelu jsou založeny na vlastním ortogonálním rozkladu (POD, anglicky Proper Orthogonal Decomposition) a Galerkinově projekci. Pomocí POD lze zpracovat libovolnou datovou sadu nevhledě na její původ. Ovšem pro Galerkinovu projekci je nutné, aby byl původní model definován soustavou buď algebraických, nebo obyčejných diferenciálních rovnic. V této práci si klademe za cíl rozšířit redukci řádu modelu i na modely, kde definice systému není známa. Na dvou příkladech, von Kármánově vírové stezce a čtvercové kavitě s periodicky se pohybující stěnou, ilustrujeme možnost nahrazení Galerkinovy projekce umělými neuronovými sítěmi. Vyvíjená metoda PODIANN (angl. POD with Interpolation Based on Artificial Neural Networks) umožňuje přípravu modelu redukovaného řádu pouze z dostupných dat, bez znalosti jejich zdroje.

Časový vývoj tlakového pole ...

$$p(t) = 1 \cdot p_{mean} + \eta_0(t) \cdot \psi_0 + \eta_1(t) \cdot \psi_1 + \eta_2(t) \cdot \psi_2 + \eta_3(t) \cdot \psi_3 + \dots$$

= lineární kombinace módů vzniklých vlastním ortogonálním rozkladem uložených dat

Double-feedback loop control of hydraulic system

Bc. Adéla Nováková (M1)

Školitel: Ing. Jan Kohout

Hydraulic systems are usually controlled by changes of pressure and/or flow in the system. Both of these quantities are limited by the hydro-mechanical properties of the system. In the area of limit values, the system may not be able to correctly control the required setting of values of these quantities. The aim of this work is to design a double-feedback loop control of a hydraulic system implemented as a cascade of software-controlled pressure and flow regulators. The work was implemented as a Codesys project in the Pro-FX environment. A laboratory test hydraulic system was set up to carry out the task. The resulting SW was implemented in a PLC HFX20m. The SW is able to send messages via serial communication to the gateway, which controls the opening of valves for pressure and flow control. The created controller can be used to control a real hydraulic system.

Navrhovanie regulatoru pre stavovy model drona

Bc. Timotej Piták (M2)

Školiteľ: Ing. Jan Vrba

Cieľom práce je navrhnuť riadenie pozície a výšky drona manipulovaním uhlových rýchlostí jej rotorov tak, aby dron nasledoval nami zadané, referenčné pozície. Najprv bol navrhnutý LQR regulátor za predpokladu, že poznáme všetky stavové premenné systému. Boli použité 2 varianty: "Reference input" variant a Integračné riadenie. Potom, za predpokladu, že všetky stavové premenné nie sú známe, bol navrhnutý LQG systém s integračným riadením a bol porovnaný so systémom navrhnutým so "Reference input" variantom a metódou umiestnenia pólov. Dron sa hýbal v miestnosti širokej a dlhej 6 metrov a vysokej 3 metre. Dron dosiahol žiadanú pozíciu, ak sa jeho stred dostal do gule okolo pozície. Polomer tejto gule (0,08 m) je maximálna povolená chyba. Robustnosť navrhnutých systémov bola overená pridaním malého závažia. Výsledok prvej časti úlohy je, že integračné riadenie je robustnejšie. Po pripojení závažia sme u "Reference input" metódy videli jasnú regulačnú odchýlku, ktorá pri integračnom riadení nebola. Záver druhej časti úlohy je, že LQG je nielen robustnejšie, ako sme ukázali v predchádzajúcej úlohe, ale proces návrhu je jednoduchší a menej vyčerpávajúci ako metóde umiestnenia pólov.



Virtual Reality Model Assessment Platform

Jakub Tomeš (B3)

Školitel: Ing. Naďa Tylová

Goal of this project is to create a platform that allows the user to effortlessly transfer models to a standalone virtual reality headset and load them into the app without having to connect the headset to a computer. This is achieved by a combination of cloud model repository and a client app that is installed on the headset. The repository can be hosted anywhere and the client application connects to it. The user can then choose the models they want to examine and load them into the headset with one click. The VR client app is created in Unity Engine using the new Unity XR framework and supports the GL Transmission Format (glTF). The Model Repository is built using Express, Node, Typescript and MongoDB.

Charakteristika hydraulického okruhu

Bc. Nad'a Tylová (M1)

Školitel: Ing. Jan Kohout

Hydraulické systémy jsou obvykle řízeny pomocí změn tlaku a průtoku. Obě tyto veličiny jsou limitovány hydro-mechanickými vlastnostmi soustavy. V oblasti limitních hodnot, nemusí být systém schopen správně regulovat požadované nastavení hodnot těchto veličin. V této práci byla zpracována data z laboratorního testovacího hydraulického systému. Během experimentálního měření byla fixována maximální hodnota tlaku v soustavě a průtok byl postupně zvyšován v rámci svého možného rozsahu. Naměřené hodnoty byly porovnány s požadovanou referencí danou nastavením systému. Zpracování dat probíhalo v prostředí MATLAB. Rozdílům mezi nastavenou a skutečnou hodnotou veličin v systému byla přiřazena škála určující míru dodržení požadované hodnoty na výstupu. Výsledkem je charakteristika pracovního rozsahu systému, ve kterém je schopný udržet zadané hodnoty veličin. Tato charakteristika může být využita při navrhování dalších experimentů na této analyzované hydraulické soustavě, a to především při stanovení pracovních rozsahů tlaku a průtoku.

Bezkontaktní monitorování tepové frekvence pomocí RGB kamery

Lubomír Volák (B3)

Školitel: Ing. Martin Schätz

Tato práce si bere za cíl ukázat, že k měření tepové frekvence dospělého člověka není potřeba speciálních zařízení. Hodnotu tepové frekvence získává bezkontaktním měřením a k implementaci využívá programové prostředí MATLAB od americké společnosti MathWorks. Program pomocí běžné webkamery vytváří záznam, konkrétně snímky čela či rtů, s předdefinovaným rozlišením, který následně analyzuje. Zelené složky jednotlivých snímků zprůměruje a vypočtené průměry dále interpoluje pro vhodnou vzorkovací frekvenci. Po provedení frekvenční analýzy pomocí Fourierovy transformace bude nejvýznamnější složka ve frekvenčním spektru odpovídat tepové frekvenci daného člověka.

Vývoj mobilní aplikace pro využití v rehabilitaci mimického svalstva

Bc. Karel Štícha (M2)

Školitel: Ing. Jan Kohout

Rozšíření mobilních technologií jako jsou chytré telefony či tablety mezi širokou veřejnost vytvořilo prostor pro zlepšení zdravotnických služeb. Ve spolupráci s Fakultní nemocnicí Královské Vinohrady vyvíjená aplikace pro mobilní zařízení má sloužit k podpoře léčby, respektive rehabilitace pacientů s parézou lícního nervu. Mezi léčebné procedury patří krom tepelných obkladů, masáží, akupunktury, elektrostimulací nebo psychoterapie také aktivní cvičení mimického svalstva, které může pacient po zaškolení provádět doma samostatně. Aplikace má pak sloužit nejen jako nástroj pro záznam domácího cvičení, ale zejména jako motivační prostředek pro pravidelné cvičení. Jako platforma pro tvorbu mobilní aplikace byl zvolen Xamarin (Microsoft), jenž umožňuje současný vývoj pro operační systémy Android i iOS v moderním programovacím jazyce C#.