



FAKULTA
CHEMICKO-INŽENÝRSKÁ
VŠCHT PRAHA

Studentská Vědecká Konference

2022

24. 11. 2022

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



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 ANALYTICKÁ CHEMIE



NICOLET CZ
MOLECULAR SPECTROSCOPY



ZeNTIVA



vesmír

Analytická chemie I

MÍSTO: A276

KOMISE

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

Ing. Lucie Kolesníková, Ph.D.

Ing. František Králík, Ph.D.

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

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 [Bc. Michaela Červínová](#) (M2, doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.)

Stanovení obsahu ostarinu pomocí kvantitativního ^{19}F NMR

08:50 [Bc. Jakub Harvalík](#) (M1, prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka)

Studium přípravy derivátů močoviny a sledování jejich komplexačních vlastností s vybranými anionty

09:10 [Bc. Daniela Janstová](#) (M2, Mgr. Alla Sinica, Ph.D.)

Ex vivo spektroskopická analýza kolorektálních tkání pro včasnou diagnostiku kolorektálního karcinomu

09:30 [Bc. Zuzana Kočiščáková](#) (M2, Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.)

Využití infračervenej a Ramanovej spektroskopie na analýzu peľových zrn

09:50 [Bc. Vítězslav Mareš](#) (M1, doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.)

Analýza struktury porfyrinových derivátů nesymetrické Trögerovy báze pomocí spektroskopie NMR

10:10 [Bc. Ema Mezihoráková](#) (M2, doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.)

Měření teplotních koeficientů ^1H NMR signálů CH skupin a studium vztahu k chemickému okolí

10:30 [Bc. Oldřich Péza](#) (M1, doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.)

Identifikace molekulové struktury beta-substituovaných porfyrinových derivátů pomocí NMR

vyhlášení výsledků

Stanovení obsahu ostarinu pomocí kvantitativního ^{19}F NMR

Bc. Michaela Červínová (M2)

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

Ostarin patří mezi nejznámější a oblíbené zástupce třídy SARM. Zkratku SARM nesou chemické látky patřící do skupiny selektivních modulátorů androgenního receptoru. V lidském těle působí mechanismy podobné mechanismům androgenně-anabolických steroidů. Jejich výhodou je to, že produkují méně androgenních vedlejších účinků, které vznikají specificky právě po podání anabolických steroidů. Ostarin je stále zkoumán v klinických studiích a dosud jako léčivo není schválen. Kromě toho je uveden na seznamu zakázaných látek Světové antidopingové agentury kvůli možnému zneužití v amatérských a vrcholových sportech. Navzdory tomuto zákazu je ostarin nelegálně uváděn na trh jako doplněk stravy ve formě tablet nebo sypkého prášku. Vážným problémem je, že množství ostarinu uváděného na etiketě mnohdy neodpovídá reálnému složení. Cílem práce je stanovení obsahu ostarinu v jednotlivých vzorcích různých doplňků stravy přístupných na internetu pomocí kvantitativního ^{19}F NMR a srovnání získaných dat s informacemi na obalu. Mimo jiné je tato metoda využita pro potvrzení přítomnosti ostarinu ve vzorcích či nalezení a charakterizaci nečistot z výroby. Charakteristické nečistoty ve vzorku pak představují signaturu vzorku, čehož lze využít pro určení původu vzorku.

Studium přípravy derivátů močoviny a sledování jejich komplexačních vlastností s vybranými anionty

Bc. Jakub Harvalík (M1)

Školitel: prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka

Anionty jsou látky, které se v přírodě přirozeně vyskytují, avšak jejich rovnováha do značné míry závisí na činnosti člověka. Řada z nich tak patří k závažným environmentálním polutantům a látkám negativně ovlivňujícím organismy. V důsledku jejich nadměrného užívání v zemědělství se k nejrozšířenějším polutantům řadí také fosforečnany, které způsobují eutrofizaci vod. V této souvislosti již byla připravena řada syntetických struktur s různými vazebnými motivy, jež využívají ke komplexaci těchto aniontů nevazebné interakce. Nejlepších výsledků pak dosahují především receptory disponující močovinovými motivy. Přestože již byla připravena řada velmi selektivních receptorů, tak se ukazuje, že jejich použitelnost je velmi omezená – zejména kvůli nemožnosti recyklace motivů. Z těchto důvodů se cílem našeho výzkumu stala příprava modifikovaných elektrod. Nejprve však je nutné připravit jednoduché receptory, které ve své struktuře disponují močovinovým vazebným místem spolu s kotvící -SH skupinou. Ty byly syntetizovány a plně charakterizovány, a poté využity k analytickým měřením. Jejich účinnost byla studována pomocí ^1H NMR, respektive UV-VIS titračních experimentů, jež posloužily k vyhodnocení velikosti asociačních konstant pro různé anionty v polárním aprotickém rozpouštědle (DMSO).

Ex vivo spektroskopická analýza kolorektálních tkání pro včasnou diagnostiku kolorektálního karcinomu

Bc. Daniela Janstová (M2)

Školitel: Mgr. Alla Sinica, Ph.D.

Kolorektální karcinom je celosvětově jedním z nejčastějších nádorových onemocnění. Jeho úspěšná léčba je velmi závislá na včasné diagnostice a zahájení terapie. Současná metoda pro diagnostiku, histologie, je subjektivní a časově náročná. Z těchto důvodů je vyvíjena nová diagnostická metoda, využívající k hodnocení Ramanovu spektroskopii. Ta umožňuje rychlou analýzu tkání a posouvá možnosti diagnostického vyšetření od vizuálního hodnocení na úroveň analýzy chemického složení tkáně a lépe popisuje počáteční transformace buněk. Ramanova *ex vivo* analýza tkání může odstranit subjektivitu vyšetření a zkrátit čas pro diagnózu. Studie probíhá ve spolupráci se IV. interní klinikou – gastroenterologie a hepatologie 1. lékařské fakulty a Všeobecné fakultní nemocnice v Praze. Analýza vzorků je prováděna u pacientů účastnících se běžného preventivního vyšetření. Během studie jsou hledány markery vhodné pro spektroskopickou diagnózu kolorektálního karcinomu. Cílem studie je vyvinutí snadné a rychlé diagnostické metody, která by byla snadno využitelná v běžné lékařské praxi.

Využitie infračervenej a Ramanovej spektroskopie na analýzu peľových zŕn

Bc. Zuzana Kočiščáková (M2)

Školiteľ: Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.

Malé, no s obrovským potenciálom. Aj takto by sa dali charakterizovať peľové zrná – mikro-metrické útvary, nevyhnutné pre reprodukciu rastlín. Vyslúžili si niekoľko unikátnych vlastností, ktoré zabezpečujú ochranu samčích gamét uložených v ich sporopolenínovej schránke. Široký rozsah užitočných vlastností peľových zŕn vedie k ich využiteľnosti a aplikáciám vo viacerých vedných odboroch, s čím súvisí potreba ich neustáleho skúmania. Cieľom predkladanej práce je charakterizovať peľové zrná pomocou infračervenej spektroskopie s využitím techniky úplného zoslabeného odrazu a Ramanovej mikro-spektroskopie, a v kombinácii s viacrozmernými štatistickými metódami získať informácie o štruktúre, zložení a medzidruhovej rôznorodosti. Oboma technikami boli získané spektrá peľových zŕn celkovo ôsmich druhov rastlín, a to lipy, ďateliny, facélie, vrby, maku, repky, agátu a pohánky, pričom na získanie Ramanových spektier bol použitý excitačný laser s vlnovou dĺžkou 785 nm. Aj napriek tomu, že Ramanove spektrá sú zaťažené fluorescenciou, bolo možné získať z nich spektrálne informácie charakteristické pre dané druhy. Na základe rozdielov v biochemickom zložení je taktiež možné dosiahnuť klasifikáciu peľových zŕn podľa jednotlivých druhov.

Analýza struktury porfyrinových derivátů nesymetrické Trögerovy báze pomocí spektroskopie NMR

Bc. Vítězslav Mareš (M1)

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

Předkládaná práce se věnuje přípravě a strukturní analýze porfyrinových derivátů nesymetrické Trögerovy báze, které mohou být využitelné jako molekulové pinzety pro chirální separace pomocí vysokoúčinné kapalinové chromatografie (HPLC). Jejich molekulová struktura má vhodnou geometrii, která umožňuje stereospecifické mezimolekulární interakce s různými chirálními analyty (např. aminokyselinami) a dokáže tak jejich enantiomery rozlišovat na molekulární úrovni. Cílem této práce bylo připravit, izolovat, přechistit a strukturně charakterizovat tetrakis(fenyl)porfyrinový derivát nesymetrické Trögerovy báze. Látka byla připravena ve formě nikelnatého komplexu a ve formě volné báze. Izolace cílených látek a meziproduktů jejich přípravy byla provedena pomocí sloupcové chromatografie a jejich čistota sledována pomocí metod TLC a NMR spektroskopie. U izolovaných produktů bylo provedeno přiřazení jejich signálů NMR s využitím ^1H NMR spekter včetně jejich teplotní závislosti, $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR a 2D korelačních (^1H - ^1H COSY, ^1H - ^1H DQ COSY, ^1H - ^1H Long range COSY, ^1H - ^1H NOESY, ^1H - ^{13}C HSQC a ^1H - ^{13}C HMBC) spekter NMR.

Měření teplotních koeficientů ^1H NMR signálů CH skupin a studium vztahu k chemickému okolí

Bc. Ema Mezihoráková (M2)

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

Chemický posun je závislý na řadě vlivů, mezi které patří i teplota. Pro reprodukovatelnost chemického posunu je proto nezbytné měřit NMR spektra při stabilní teplotě. Praktickým ukazatelem této závislosti je teplotní koeficient, tedy změna chemického posunu důsledkem změny teploty $d\delta/dT$. Tyto teplotní koeficienty v ^1H NMR byly v minulosti studovány zejména pro signály vodíků vázaných na heteroatom (kyslík, dusík či síra), kdy jsou hodnoty teplotních koeficientů velké a korelují se zapojením těchto atomů do vodíkových vazeb. Pro jádra vodíků vázaných na uhlík jsou hodnoty teplotních koeficientů malé a jejich vztah ke struktuře molekuly je téměř neznámý. Cílem mé práce je měřit teplotní koeficienty pro vodíky vázané na uhlík a studovat jejich vztah k molekulové struktuře studovaných látek.

Identifikace molekulové struktury beta-substituovaných porfyrinových derivátů pomocí NMR

Bc. Oldřich Péza (M1)

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

Předkládaná práce se věnuje přípravě a studiu molekulárních receptorů odvozených odbis-Trögerových bází, které mají porfyrinové jádro ve svém strukturním motivu. Tyto receptory by mohly najít uplatnění v senzorové analýze, chemické katalýze nebo medicíně jako fotosenzitizéry v PDT. Pro přípravu těchto receptorů bylo nutné izolovat a identifikovat výchozí porfyrinové deriváty, kterými jsou izomery β -dinitrovaných metaloporfyrinů. Identifikace těchto izomerů probíhala pomocí 1D a 2D NMR technik.

Analytická chemie II

MÍSTO: POSLUCHÁRNA A21 (A-239)

KOMISE

doc. Ing. Antonín Kaňa, Ph.D. (předseda)

Ing. Jan Koucký, Ph.D.

Ing. Magda Vosmanská, CSc.

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 [Bc. Anna Amirianová](#) (M2, doc. RNDr. Dr. David Sýkora)

Vývoj analytické metody pro analýzu metabolitů u mykobakterií

08:50 [Bc. Lenka Filipiaková](#) (M2, doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.)

Stanovenie rádionuklidov v pôde Kunratického lesa rádioanalytickými metodami

09:10 [Bc. Daniela Minčáková](#) (M2, doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.)

Využitie duálnych chirálnych selektorov na separáciu halogénovaných kationov kapilárnou elektroforézou

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

Vývoj metody pro stanovení trimekainu a jeho genotoxických nečistot

09:50 [Bc. Lada Prostějovská](#) (M2, prof. RNDr. Štěpán Urban, CSc.)

Vliv výskytu diabetu 1. a 2. typu na pachovou signaturu

10:10 [Bc. Mária Vernerová](#) (M2, prof. RNDr. Štěpán Urban, CSc.)

Teplotní stabilita pachové signatury člověka

10:30 [Bc. Václav Znamínko](#) (M2, Ing. Martin Člupek, Ph.D.)

Sorpce cesia a stroncia na cementové výplňové materiály

vyhlášení výsledků

Vývoj analytické metody pro analýzu metabolitů u mykobakterií

Bc. Anna Amirianová (M2)

Školitel: doc. RNDr. Dr. David Sýkora

Bakterií *Mycobacterium tuberculosis*, původcem tuberkulózy, je v současnosti nakažena až třetina veškeré světové populace a každoročně způsobuje více než 1,5 milionu úmrtí. Nejen infekčnost, ale i stále vzrůstající problém antibiotické rezistence u této bakterie je dalším důvodem pro vývoj nových cílených chemoterapeutik proti tuberkulóze. Cílem projektu bylo vyvinout separační metodu umožňující analýzu nukleotidů v divokém a v mutantním modelovém kmenu *Mycobacterium smegmatis* s upravenou inosin-5'-monofosfát dehydrogenasou (IMPDH), což je klíčový enzym v biosyntéze guaninových nukleotidů. Podařilo se vyvinout kvantitativní metodu kapalinové chromatografie ve spojení s tandemovou hmotnostní spektrometrií (LC-MS). K samotné separaci byla použita HILIC zwitteriontová kolona. Metoda byla částečně validována pro následující parametry, limit detekce a stanovitelnosti, kalibrační závislost, přesnost a preciznost. Následně byla metoda aplikována na analýzu reálných vzorků vybraných bakteriálních kmenů. Získaná data potvrzují, že přítomnost upravené IMPDH vede k významné změně hladiny nukleotidů. Dalším krokem je vývoj metody pro necílenou metabolomickou analýzu využívající vysoce citlivý hmotnostní spektrometr Orbitrap pro identifikaci širšího spektra metabolitů.

Stanovenie rádionuklidov v pôde Kunratického lesa rádioanalytickými metódami

Bc. Lenka Filipiaková (M2)

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

Prvky s nestabilným jadrom, ktoré podliehajú samovoľnej premene, sa nachádzajú medzi bežnými environmentálnymi vzorkami. Príkladmi environmentálnych vzoriek môžu byť voda, vzduch, či ako konkrétne v tejto práci, pôda. Vďaka rôznemu pôdnemu podložiu alebo kvôli priemyselnej výrobe je zastúpenie rádionuklidov v českých pôdach veľmi rozmanité. Pre správne skúmanie je potreba pôdu upraviť, zhomogenizovať a vysušiť. Veľkú úlohu hrá v skúmaní pôdy aj odobraný horizont. V rámci tejto práce bola vyvinutá metóda pre stanovenie rádionuklidov v pôde z Kunratického lesa, ktorá je síce blízko frekventovanej cesty a vybudovanej infraštruktúry, ale nemá v blízkosti žiadnu priemyselnú jednotku. Na tejto lokalite boli optimalizované množstvá odberu, hĺbka horizontov aj podmienky merania. Meranie jednotlivých pôdných horizontov prebiehalo gama spektrometrom s polovodičovým detektorom a alfa detektorom, ktorý bol použitý pre meranie radónu.

Využitie duálnych chirálnych selektorov na separáciu halogénovaných katinónov kapilárnou elektroforézou

Bc. Daniela Minčáková (M2)

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

Syntetické katinóny patria medzi psychoaktívne látky a tvoria druhú najväčšiu skupinu na drogovom trhu. Popularitu si získali najmä vďaka svojim účinkom podobným amfetamínu. Trh sa neustále vyvíja a zavádzanie nových funkčných skupín do molekuly katinónu značne sťažuje ich identifikáciu. Preto je potrebné nájsť vhodné podmienky na separáciu a identifikáciu jednotlivých katinónov. Táto práca je zameraná na chirálnu separáciu piatich halogénovaných katinónov pomocou cyklodextrínov (CD) ako chirálnych selektorov. CD poskytujú vysokú separačnú účinnosť, sú dobre rozpustné v polárnych rozpúšťadlách, stabilné v širokom rozsahu pH a cenovo dostupné. V tejto práci bolo testovaných šesť CD s rôznymi koncentráciami a rôznym pH základného elektrolytu. Z testovaných CD (α -CD, β -CD, γ -CD, karboxymetylovaný β -CD, karboxymetylovaný γ -CD a 2-hydroxypropylovaný β -CD) boli najefektívnejšie α -CD a karboxymetylovaný β -CD (CM- β -CD). Tieto CD čiastočne alebo úplne oddelili testované katinóny a následne bolo určené poradie separácie jednotlivých katinónov. Ďalej bola na chirálnu separáciu použitá duálna zmes CD zložená z α -CD a CM- β -CD o rôznych pomeroch koncentrácií daných CD.

Vývoj metody pro stanovení trimekainu a jeho genotoxických nečistot

Bc. Pavla Nekvapilová (M2)

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

Tato práce se zabývá vývojem metody pro stanovení účinné látky trimekain a jeho genotoxických nečistot pomocí kapilární elektroforézy s UV detekcí. Trimekain nachází uplatnění jako lokální anestetikum například v chirurgii či v zubním lékařství. Cílem vyvinuté metody je snížení bezpečnostního rizika pro pacienta, který trimekain užívá. Schopnost metody separovat dané nečistoty byla testována pomocí referenčních standardů rozpuštěných ve vodě či methanolu. Kvůli rozdílným vlastnostem jednotlivých nečistot byla jako elektrolyt použita směs vodného roztoku pufru a methanolu o poměru 1:1. Dále byl optimalizován typ použitého cyklodextrinu (CD). Testované byly β -CD, sulfonovaný β -CD (SBCD), karboxymethylovaný β -CD (CMBCD), 2-hydroxypropylovaný β -CD, γ -CD a karboxymethylovaný γ -CD (CMGCD) o koncentraci 10 a 5 mmol/l v octanovém pufru o pH 5. Jako účinné se jevily SBCD, CMBCD a CMGCD a byly dále použity pro zkoumání vlivu odlišného pH základního elektrolytu (2,5; 5; 7) a vyšší koncentrace CD (40 a 20 mmol/l). Nejlepší separace bylo dosaženo pomocí základního elektrolytu o pH 5, který obsahoval 10 mmol/l CMBCD rozpuštěného v octanovém pufru. Pomocí UV spekter bylo také určeno pořadí separace jednotlivých nečistot. Vyvinutá metoda bude dále validována dle doporučení ICH(Q2)R1.

Vliv výskytu diabetu 1. a 2. typu na pachovou signaturu

Bc. Lada Prostějovská (M2)

Školitel: prof. RNDr. Štěpán Urban, CSc.

Lidský pach je soubor velkého množství molekul o různé koncentraci, které se liší svými fyzikálními a chemickými vlastnostmi. Lidský pach je ovlivňován životním stylem, stravou, metabolismem, mikrobiologickou činností, kosmetikou, vnějšími vlivy prostředí, nemocemi a drogami, ale také geneticky stálou složkou, která je v čase poměrně neměnná. Předpokládá se, že právě tato geneticky daná složka pachu by mohla umožnit jednoznačnou identifikaci jedince a je označována jako pachová signatura. Chemické složení lidského pachu je individuální a identifikace jednotlivých sloučenin může přispět orgánům činným v trestním řízení pro skupinovou forenzní identifikaci jedince, ale také v lékařství, kde takové sloučeniny mohou sloužit jako biomarkery nemocí. Zavedení rutinních metod by následně mohlo pomoci i ve screeningu celé řady nemocí, kde hlavní výhodou metody odběru pachu by byl její neinvazivní charakter. Cílem práce je zjistit, jestli lze z pachu člověka rozlišit člověka trpícího onemocněním diabetes mellitus od zdravého člověka, a jestli lze od sebe rozlišit jedince s diabetem mellitus I. typu od diabetu mellitus II. typu.

Teplotní stabilita pachové signatury člověka

Bc. Mária Vernerová (M2)

Školitel: prof. RNDr. Štěpán Urban, CSc.

Lidský pach je tvořen několika tisíci různých molekul. Předpokládá se, že část těchto molekul si zachovává téměř neměnnou relativní koncentraci po celou dobu života daného jedince. Právě tyto molekuly tvoří tzv. pachovou signaturu a jsou využívány při identifikaci osob. V rámci této práce byla zkoumána stabilita pachové signatury při různých podmínkách skladování. Pachové vzorky byly odebrány z dlaní dobrovolníků za použití skleněného sorbentu. Odebraný směsný vzorek byl následně rozdělen na menší části, které byly skladovány za různých podmínek. Polovina vzorků byla ozářena UV světlem, druhá nikoliv. Část vzorků byla po danou dobu skladována v ethanolu, část byla skladována bez rozpouštědla. Další zásadní rozdíl byl v teplotě, při které byly vzorky skladovány. Extrakce vzorků a jejich následná analýza pomocí GC×GC-TOF byla provedena s různým časovým odstupem ode dne jejich odběru. Získaná data byla vyhodnocena za použití statistických metod. Na základě výsledků této práce bude možné upravit podmínky skladování odebraných pachových vzorků a zachovat tak jejich stabilitu po delší časové období.

Sorpce cesia a stroncia na cementové výplňové materiály

Bc. Václav Znamínko (M2)

Školitel: Ing. Martin Člupek, Ph.D.

Vyřazováním jaderných zařízení budou vznikat různé druhy radioaktivního odpadu (RAO), včetně vysoceaktivního odpadu. Tento druh odpadu lze ukládat jen v hlubinném úložišti RAO. Aby se zabránilo úniku radioaktivních látek do okolí, je důležité nalézt vhodné výplňové materiály obalových souborů RAO. Cílem této práce je studovat sorpci stroncia a cesia na cementové materiály, nelézt dobu potřebnou pro ustanovení rovnováhy v systému. Experimenty byly prováděny na čtyřech materiálech: cementové pastě (CEM), cementové pastě s přídavkem bentonitu (AFM), cementové pastě s přídavkem nanoželeza (NNM) a syntetickém geopolymery (GP). Jednalo se o sorpční experimenty loužícího typu, jako kapalná fáze byla použita syntetická granitická voda s přídavkem $^{85}\text{SrCl}_2$ nebo $^{137}\text{CsCl}$. Byly studovány dvě síťové frakce materiálů (<0,5 mm a 1–2 mm) a dva poměry kapalné ku pevné fázi (5 a 10 ml/g). Pro porovnání jednotlivých materiálů byl vypočítán lineární distribuční koeficient (K_d). Nejlepších výsledků bylo dosaženo pro materiál GP, hodnota K_d byla v řádu stovek mg/l a rovnováha se ustálila po 1 dnu pro Cs a po týdnu pro Sr. U ostatních materiálů se rovnováha ustálila během 1 dne pro Cs a po 1-2 měsících pro Sr. Hodnota K_d byla od desetin po desítky mg/l a klesala pro materiály v tomto pořadí AFM>CEM≈NNM.

Analytická chemie III

MÍSTO: POSLUCHÁRNA A105 (A-152)

KOMISE

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

Ing. Veronika Škeříková, Ph.D.

doc. Mgr. Taťjana Šiškanová, CSc.

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

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 [Karolína Amblerová](#) (B3, doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.)

Bis-Trögerova báze jako receptor pro analýzu chirálních látek

08:50 [Lada Fialová](#) (B3, doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.)

*Stanovení konstant stability mefedronu a jeho analogů s
karboxymethylovaným β -cyklodextrinem kapilární elektroforézou*

09:10 [Zuzana Jalovcová](#) (B3, doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.)

Identifikace meziproduktů přípravy Trögerových bazí pomocí NMR spektroskopie

09:30 [Vendula Kotrčová](#) (B3, Ing. Martin Havlík, Ph.D.)

*Vývoj barevné chirální molekulové pinzety pro forenzní analýzu enantiomerních
směsí*

09:50 [Hana Kučerová](#) (B3, Ing. Antonín Kaňa, Ph.D.)

*Hodnocení homogenity referenčních materiálů na mikroskopické úrovni pomocí
LA-ICP-MS*

10:10 [Anna Malíková](#) (B3, doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.)

Spektrální studie solvatochromní odezvy stilbenových derivátů v roztoku

10:30 [Barbora Strasserová](#) (B3, prof. Ing. Oto Mestek, CSc.)

*Spektrální interference při stanovení prvků vzácných zemin hmotnostní
spektrometrií s indukčně vázaným plazmatem*

10:50 [Daniel Šlemar](#) (B3, doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.)

Analýza plastifikátorů pomocí GC-MS

vyhlášení výsledků

Bis-Trögerova báze jako receptor pro analýzu chirálních látek

Karolína Amblerová (B3)

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

Mezi nejčastěji používané metody separace chirálních látek patří vysokoúčinná kapalinová chromatografie (HPLC) s chirální stacionární fází. Tato stacionární fáze je obvykle tvořena silikagelem, na kterém je kovalentně navázán čistý enantiomer chirální látky (tzv. chirální selektor). Vzhledem k tomu, že existuje celá řada strukturně rozličných chirálních látek s řadou možností interakce, je snahou vyvíjet nové chirální stacionární fáze pro jejich separaci. Mezi chirální selektory, které by mohly najít využití pro separaci, patří bis-Trögerovy báze (bis-TB). Bis-TB má dva diastereoizomery, z nichž jeden má tvar molekulární pinzety, která je schopna významné interakce zejména s planárními, elektronově-deficitními molekulami. Cílem práce je připravit bis-TB, která bude na silikagelovou stacionární fázi připojena za středovou část molekuly prostřednictvím vhodné spojky (Obr 1.). Takto připravená chirální stacionární fáze bude testována pro dělení enantiomerů chirálních látek obsahující elektron-deficitní aromatické strukturní motivy.

Stanovení konstant stability mefedronu a jeho analogů s karboxymethylovaným β -cyklodextrinem kapilární elektroforézou

Lada Fialová (B3)

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

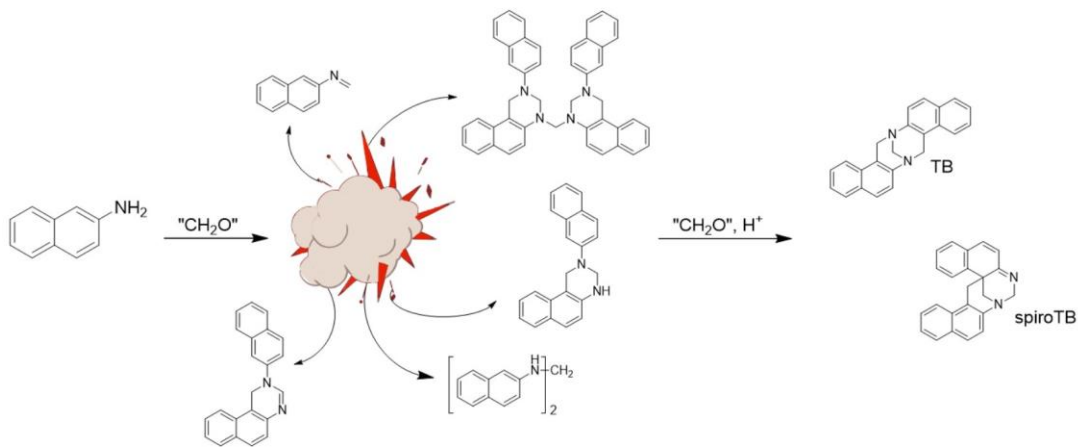
V současné době jsou mezi látkami zneužívanými pro své psychoaktivní účinky hodně rozšířené deriváty kathinonů. Samotný kathinon je alkaloid, který se přirozeně vyskytuje v listech keře katy jedlé (*Catha edulis*) jako (*S*)-enantiomer. Při chemické syntéze derivátů kathinonu těchto látek však dochází ke vzniku racemické směsi, přičemž jednotlivé enantiomery se mohou lišit svými psychoaktivními vlastnostmi. Jednou z metod umožňující chirální separaci, a tím i studium vlastností jednotlivých enantiomerů, je kapilární elektroforéza. Tato práce se nejprve zabývá optimalizací pH elektrolytu pro chirální separaci jednotlivých vybraných derivátů kathinonu, konkrétně mefedronu a jeho analogů 2-methyl-*N*-methylkathinon, 3-methyl-*N*-methylkathinon a 3,4-dimethyl-*N*-methylkathinon pomocí kapilární elektroforézy. Jako základní elektrolyt byl použit fosforečnanový pufr o koncentraci 50 mmol/l o daném pH s chirálním selektorem, kterým byl karboxymethylovaný β -cyklodextrin (CM- β -CD). Za optimálních podmínek byly kathinony analyzovány za použití základních elektrolytů s koncentrací CM- β -CD 0; 1; 2; 3; 4; 5; 6; 7; 8; 10; 12; 14; 17 a 20 mmol/l. Analýzou naměřených dat byly vypočteny podmíněné konstanty stability všech vybraných kathinonů s CM- β -CD.

Identifikace meziproduktů přípravy Trögerovýchází pomocí NMR spektroskopie

Zuzana Jalovcová (B3)

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

Trögerova báze (TB) byla poprvé objevena v roce 1887 Juliusem Trögerem jako produkt reakce *p*-toluidinu s formaldehydem v kyselém prostředí. V roce 2010 byl identifikován její isomer, který ve své unikátní struktuře obsahuje sp^3 uhlík, tento isomer byl následně pojmenován spiro-Trögerova báze (spiroTB). Vznik spiroTB však nebyl doposud plně objasněn. Identifikace a studium reaktivity produktů a meziproduktů vedoucí k formování TB a spiroTB by mohla přispět k objasnění mechanismu vzniku spiroTB. Tato práce se zabývá identifikací a charakterizací produktů reakce naftyl-2-aminu s vodným roztokem methanalu v neutrálním prostředí a studiem reakcí těchto produktů za podmínek vzniku TB a spiroTB.

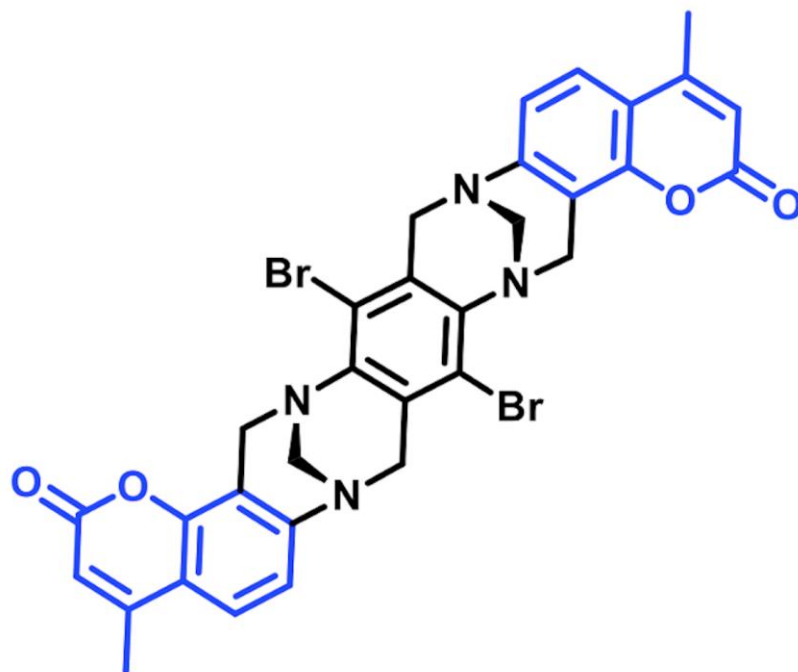


Vývoj barevné chirální molekulové pinzety pro forenzní analýzu enantiomerních směsí

Vendula Kotrčová (B3)

Školitel: Ing. Martin Havlík, Ph.D.

Vývoj barevné chirální molekulové pinzety pro forenzní analýzu enantiomerních směsí
Vedoucí: Dolenský Bohumil doc. Ing. Ph.D.
Chirální molekulové pinzety odvozené od bis-Trögerovy báze (TB) mohou nalézt využití jako receptory chirálních sloučenin. Cílem této práce je připravit chirální molekulovou pinzetu, která bude modifikována solvatochromním substituentem. Tento substituent by způsoboval barevnou změnu při interakci receptoru s enantiomery chirálně čistých látek. Připravená výchozí molekulární pinzeta s kumarinovou substitucí byla plně charakterizována pomocí metody nukleární magnetické resonance (NMR). Pro přiřazení ^1H a ^{13}C signálů NMR byla využita 1D (^1H a ^{13}C { ^1H } NMR) a 2D korelační (^1H - ^1H COSY, ^1H - ^1H Long Range COSY, ^1H - ^1H NOESY, ^1H - ^{13}C HSQC a ^1H - ^{13}C HMBC) spektra.



Hodnocení homogenity referenčních materiálů na mikroskopické úrovni pomocí LA-ICP-MS

Hana Kučerová (B3)

Školitel: Ing. Antonín Kaňa, Ph.D.

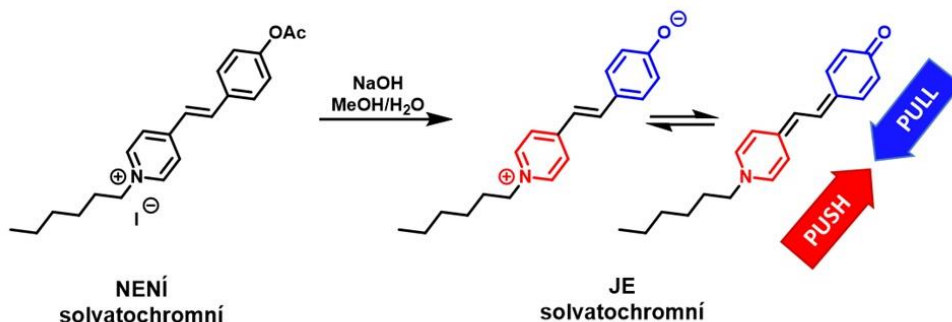
Laserová ablace ve spojení s hmotnostní spektrometrií s indukčně vázaným plazmatem je univerzální metoda pro analýzu pevných vzorků na mikroskopické úrovni. Referenční materiály používané pro kalibraci této metody tak musí být vysoce homogenní, což se v praxi ukazuje jako úskalí. Ukazuje se, že směrodatná odchylka jako klasický statistický parametr není nejlepším nástrojem pro hodnocení homogenity. Tato práce se tak zaměřuje na testování nového přístupu hodnocení homogenity referenčních materiálů na mikroskopické úrovni pomocí obrazové analýzy založené na koincidenční matici stupňů šedi (GLCM; Gray Level Co-Occurrence Matrix). V práci byly použity čtyři certifikované referenční materiály, z nichž jeden referenční materiál bylo sklo, které je považováno za homogenní a sloužilo tak jako kontrolní vzorek. Z ostatních referenčních materiálů (sušené mléko, tkáň mušle a jehličí) byly vytvořeny tablety, vybraná část povrchu byla ablatována a dále analyzována. Homogenita distribuce prvků v jednotlivých referenčních materiálech byla porovnána na základě parametrů získaných z příslušné GLCM matice.

Spektrální studie solvatochromní odezvy stilbenových derivátů v roztoku

Anna Malíková (B3)

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

Předkládaná práce se věnuje spektrální studii solvatochromního chování derivátů stilbazolu v roztoku. V rámci této práce byly připraveny látky (*E*)-4-(4-acetoxystyryl)-1-hexylpyridin-1-ium jodid (není solvatochromní) a (*E*)-4-(2-(1-hexylpyridin-1-ium-4-yl)vinyl)fenolát (je solvatochromní, push-pull systém). Připravené látky byly izolovány a přečištěny pomocí sloupcové chromatografie. U čistých látek bylo provedeno úplné přiřazení jejich signálů NMR. K přiřazení byla využita 1D (^1H a $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR) a 2D korelační (^1H - ^1H COSY, ^1H - ^1H LR COSY, ^1H - ^1H NOESY, ^1H - ^{13}C HSQC a ^1H - ^{13}C HMBC) spektra NMR. U čistých a charakterizovaných látek byla naměřena UV-Vis a fluorescenční spektra v rozpouštědlech, která se liší svou dielektrickou konstantou. Deriváty stilbazolu budou v dalším kroku využity pro kovalentní modifikaci povrchu UV-Vis kyvet, které by tak měly být využitelné pro měření UV-Vis spekter nebarevných látek.



Spektrální interference při stanovení prvků vzácných zemin hmotnostní spektrometrií s indukčně vázaným plazmatem

Barbora Strasserová (B3)

Školitel: prof. Ing. Oto Mestek, CSc.

Kovy vzácných zemin jsou skupinou prvků, kterou tvoří prvky Sc, Y a lanthanoidy (La, Ce, Pr, Nd, Pm, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb a Lu). Obsah těchto prvků bývá v rudách velmi malý, proto je jejich těžba obtížná a méně častá. Jejich největší naleziště se nalézají v současné době v Číně (konkrétně důl Bayan Obo). Jedním z potenciálních zdrojů kovů vzácných zemin jsou hlubokomořské polymetalické (manganové) konkrce, které můžeme nalézt např. v oblasti Clarion-Clipperton v Tichém oceánu. Studium těchto konkrací se na VŠCHT zabývá Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství. Jednou z metod analýzy prvků v těchto konkracích je hmotnostní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem, která umožní stanovit stopové koncentrace prvků. Analýza lanthanoidů je však zatížena spektrálními interferencemi zejména oxidových iontů barya a dalších prvků. Cílem této práce je studium velikosti těchto interferencí.

Analýza plastifikátorů pomocí GC-MS

Daniel Šlemar (B3)

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

Plastifikátory jsou komerčně prodávané příměsi, které se využívají při přípravě betonových stavebních hmot. Molekuly plastifikátoru (nejčastěji přírodní i syntetické polymery) se vážou do cementové matrice a mění tak mechanické a fyzikálně-chemické vlastnosti materiálu. Ve studii je zkoumán plastifikátor ISOLA od výrobce CEMEX Czech Republic, s.r.o., který by mohl být využit při stavbě hlubinných uložišť vyhořelého jaderného paliva. Kvůli přísným bezpečnostním kritériím je třeba, aby materiál, který je při stavbě takovýchto objektů používán, odolal i krajním podmínkám. Ve studii jsou proto zkoumány vzorky, které byly dlouhodobě vystaveny zvýšené teplotě, zvýšenému pH nebo radiaci. Analýza plynu nad kapalným vzorkem je prováděna metodou plynové chromatografie s hmotnostní spektrometrií. Dávkování je prováděno metodou head-space. Analyty identifikované ze stresovaných vzorků jsou porovnány s originálním plastifikátorem. Cílem studie je zjistit, zdali je míra degradace dostatečně nízká na to, aby mohl být plastifikátor ISOLA použit při stavbě hlubinných uložišť.

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



OptiXs



vesmír

Fyzikální chemie I

MÍSTO: A11

KOMISE

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

Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.

Ing. Vojtěch Štejf, Ph.D.

Ing. Jan Praus (JSP International, s.r.o.)

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Eva Didenko](#) (B3, RNDr. Eva Muchová, Ph.D.)

Fotochemie modelových kyaninů

09:20 [Bc. Martin Dinh](#) (M1, prof. Ing. Michal Fulem, Ph.D.)

Vývoj systémů pro dodávání protinádorových léčiv: Kombinovaná experimentální a výpočetní studie

09:40 [Stanislav Kočí](#) (B3, doc. Ing. Ondřej Vopička, Ph.D.)

Separační membrány z fotopolymerů

10:00 [Bc. Veronika Kostková](#) (M1, Ing. Ctirad Červinka, Ph.D.)

First-principles modeling of polymorphism of active pharmaceutical substances

10:20 [Anna Mašíňová](#) (B3, prof. RNDr. Bc. Petr Slavíček, Ph.D.)

Unexpected properties of dative bond

10:40 [Bc. Elia Pavliš](#) (M1, Ing. Martin Klajmon, Ph.D.)

Predikce kompatibility léčiv a polymerů pomocí PC-SAFT bez interakčních koeficientů

11:00 [Tereza Šimsová](#) (B3, prof. Ing. Michal Fulem, Ph.D.)

Molekulární mobilita amorfních lékových formulací

11:20 [Tomáš Volný](#) (B3, Ing. Ctirad Červinka, Ph.D.)

Adsorption and mass transport processes in novel porous materials with nanoscale architecture

vyhlášení výsledků

Fotochemie modelových kyaninů

Eva Didenko (B3)

Školitel: RNDr. Eva Muchová, Ph.D.

Kyaninová barviva našla své uplatnění v nejrůznějších oblastech lidského života. Důvodem je jejich fluorescenční a senzibilizující vlastnosti. Tohle je také důvod, proč by kyaniny mohly být důležité pro rozvoj fotochemie a kvantové chemie. Ve své práci pomocí kvantově chemických metod studuji vlastnosti a chování modelových kyaninů v základním a excitovaných stavech. První část práce je věnována fotochemii kyaninů, dále práce bude pokračovat studiem molekulové dynamiky a vyhodnocení výsledků.

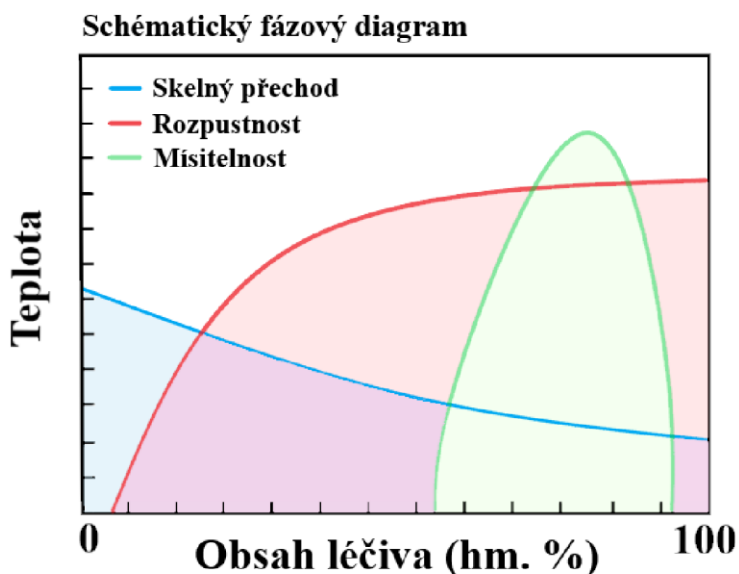
Vývoj systémů pro dodávání protinádorových léčiv:

Kombinovaná experimentální a výpočetní studie

Bc. Martin Dinh (M1)

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

Polymerní pevná amorfnní disperze je účinným způsobem, jak zvýšit biodostupnost protinádorových léčiv v organismu. K úspěšnému návrhu takové lékové formulace je klíčová znalost kompatibility léčiva s polymerem, která se přímo odráží ve fázovém chování jejich směsi. Studie kombinuje a srovnává dva možné přístupy v určování fázového chování: experimentální metody založené na diferenciální skenovací kalorimetrii a teoretický výpočet kvantově-chemickou metodou COSMO-RS. Studovanými systémy jsou léčiva kolchicin, simvastatin, paracetamol, paklitaxel, biodegradovatelný kopolymer poly(D,L-laktid-co-glykolid) a poly(oxyetylen). Zjištěné fázové chování je ověřeno analýzou stability lékových formulací v čase. K přípravě formulací jsou využity metoda lisování za tepla a enkapsulace léčiva do nanočástic. Součástí práce je také studium uvolňování léčiva z takto připravených formulací.



Separační membrány z fotopolymerů

Stanislav Kočí (B3)

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

Předmětem práce je experimentální ověření možnosti přípravy tenkých filmů (separačních membrán) z polymerních sítí připravených řízenou a neřízenou fotoiniciovanou radikálovou polymerizací telechelických oligomerů, a studium jejich vlastností. Polymerizací oligomeru polyethylenglykol diakrylát (PEGDA) byly připraveny filmy s použitím fotoiniciátoru 1-hydroxycyclohexyl fenyl keton, UV záření o vlnové délce 254 nm a činidla pro řízenou radikálovou polymerizaci s přenosem řetězce (RAFT). Vlastnosti připravených filmů byly studovány měřením sorpčních izoterem pro sorpci vodní páry při teplotách 25 °C a 40 °C a sorpce kapalné vody, pro kterou jsou k dispozici literární data. To umožnilo posoudit vliv RAFT činidla na síťovou hustotu a hydrofilitu polymeru. Připravené membrány byly mechanicky odolné, což umožňuje, abych v budoucnu studoval pervaporativní separaci izomerů xylenu polárními membránami z polymerů obsahujících etylenoxidové jednotky a dále optimalizoval jejich přípravu.

First-principles modeling of polymorphism of active pharmaceutical substances

Bc. Veronika Kostková (M1)

Školitel: Ing. Ctirad Červinka, Ph.D.

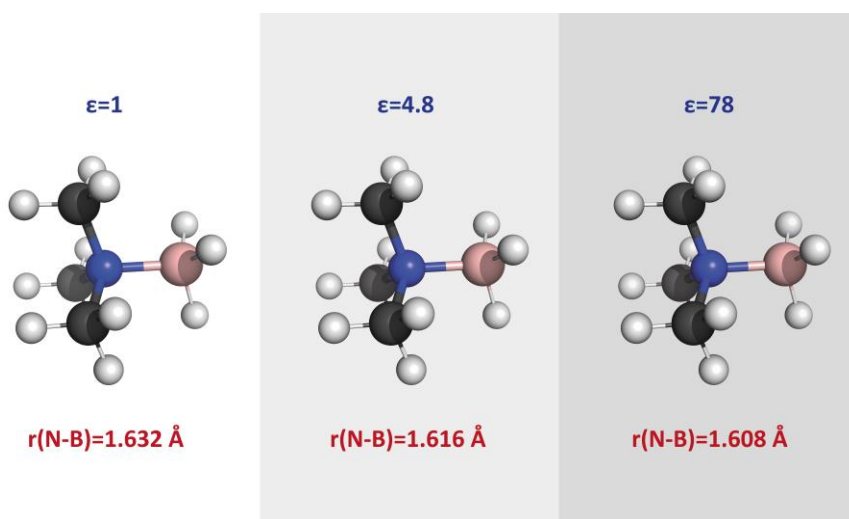
There are many substances among pharmaceuticals, agrochemicals, semi-conductors, and others that have an ability to form multiple crystal structures. These so-called polymorphs can differ significantly in their chemical-physical properties. Hence, it is important to have a knowledge of polymorphs of a substance, their thermodynamical and kinetical stabilities, and other relevant properties. Twenty years ago, development of computational predictions of polymorphism as an alternative to experiments began. Although a lot of progress must be made for the computations to match the reliability of the experiments, computational methods can be useful in cases of dangerous or expensive experiments. Major problem of polymorphism predictions is the high computational demand. Therefore, in this work, I compared two computational methods, broadly used density functional theory (DFT) and semi-empiric density functional tight-binding method. Also, I investigated whether their combination is meaningful for prediction of thermodynamic properties of selected polymorphs of active pharmaceutical substances, flufenamic acid and sulfathiazole. It is shown that the results from DFT are in good agreement with experiments, while accuracy of the other approaches differ considerably for the two substances.

Unexpected properties of dative bond

Anna Mašínová (B3)

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

Dative bonding is a specific interaction in which both electrons involved in the bond come from the same atom. This type of bond is more commonly known as a coordination covalent bond in compounds containing metal ions. In this work, we have focused on systems that do not contain metal ions, but systems with a dative bond made between two p-elements, in which the ability of the carbon to participate in the dative bond as an electron acceptor is exercised. This phenomenon has been investigated by *ab initio* computational chemistry methods on complexes of fullerene and a nitrogen-containing molecule to form an N-C dative bond. More recently, we have investigated the effect of solvent on the strength of the dative bond. The solvation bonds were described by the implicit COSMO solvation model. Solvents with different dielectric constants were used in the study. We expected the same behavior as exhibited by non-covalent and covalent bonds, i.e., that the bond weakens with increasing value of the dielectric constant. However, our results showed the opposite behavior, i.e., a strengthening of the dative complexes. Our results were confirmed by experimental measurements. These results may be of use e.g. in the pharmaceutical industry (in the development of new drugs or their delivery).



Predikce kompatibility léčiv a polymerů pomocí PC-SAFT bez interakčních koeficientů

Bc. Elia Pavliš (M1)

Školitel: Ing. Martin Klajmon, Ph.D.

Řada nově navrhovaných léčiv je špatně rozpustná ve vodě. Jedním ze způsobů, jak tuto aplikační překážku obejít, je formulace amorfni pevné disperze, kde jsou molekuly léčiva zabudovány do struktury polymerního nosiče. Vhodný nosič je v současné době nutné navrhnout pro každou látku zvlášť na základě drahých a časově náročných experimentů. Proces návrhu by velmi usnadnil předběžný screening kompatibility polymerů s léčivem pomocí vhodného výpočetního nástroje, jakým by mohla být právě PC-SAFT. Kvantitativně dobrých výsledků lze dosáhnout pomocí PC-SAFT s tzv. binárními interakčními koeficienty fitovanými na experimentální data. V případě zcela nových systémů ale tento postup není vždy proveditelný. Kvalita „čistých“ PC-SAFT predikcí pro systémy léčiv a polymerů zatím nebyla prozkoumána v dostatečně velkém rozsahu. Proto bylo cílem práce posoudit, zda je PC-SAFT bez interakčních koeficientů pro screeningové výpočty vhodná. Pro více než 30 systémů léčivo–polymer byly spočítány křivky rozpustnosti a mísitelnosti a predikované hodnoty byly srovnány s existujícími experimentálními daty. Pro některé systémy byl odhad řazení úspěšný, celkové výsledky ale naznačují, že čisté predikce nejsou obecně natolik spolehlivé, aby bylo možné zvolit vhodné polymerní kandidáty jen na jejich základě.

Molekulární mobilita amorfních lékových formulací

Tereza Šimsová (B3)

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

Řada nově vyvíjených i stávajících léčiv vykazuje v krystalickém stavu velmi malou rozpustnost ve vodě, čímž je snížena jejich biodostupnost. Vývoj lékových formulací vedoucích ke zvýšení biodostupnosti ve vodě málo rozpustných léčiv je proto v současné době předmětem intenzivního výzkumu. Jednou z možných formulačních strategií je převedení krystalického léčiva do jeho amorfní formy. Amorfní lékové formulace mají požadovanou vyšší biodostupnost, ale jedná se často pouze o kineticky stabilizované systémy. Tato práce se zabývá studiem molekulární mobility amorfních systémů pomocí vybraných kalorimetrických protokolů, pomocí nichž jsou získávány informace o relaxační entalpii a čase. Pomocí těchto veličin lze ve spojení s vhodnými modely pro popis relaxačního času v závislosti na teplotě predikovat dobu expirace či vhodné podmínky pro skladování kineticky stabilizovaných formulací. V této práci jsou porovnány dva kalorimetrické protokoly a molekulární mobilita pro dvě modelová léčiva (indometacin a paracetamol), která vykazují rozdílnou schopnost tvořit amorfní fázi (tzv. „glass-forming ability“).

Adsorption and mass transport processes in novel porous materials with nanoscale architecture

Tomáš Volný (B3)

Školitel: Ing. Ctirad Červinka, Ph.D.

Porous materials such as zeolites are widely used in chemistry as catalysts, adsorbents, and molecular sieves due to the properties of their channel systems and large accessible areas. A novel experimental method ADOR (Assembly, Disassembly, Organize, Reassembly) leads to new structures with tunable architecture, e.g., the IPC materials of the UTL family. Some of those systems show interesting properties in separation and catalysis. In those novel materials, the adsorption and mass transport processes are studied on the MD level. As the results show, the quantitative prediction of adsorption heats and diffusion rates may be beyond the capability of computational approaches based on empirical force fields. Hence, two possible ways to remedy this situation have been explored – adjusting the method by parametrization of force fields on DFT data and correcting MD results by a recently developed QM/MM correction scheme.

Fyzikální chemie II

MÍSTO: B26 (DVEŘE Č. B3419)

KOMISE

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

Ing. Marcela Tkadlecová, CSc.

Dr. Ing. Pavel Vrbka

Ing. Martin Růžička (ORLEN Unipetrol)

PROGRAM

09:00 **zahájení**

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

Preferential binding of Hofmeister salts to ethyl tert-butyl ether vs methyl tert-butyl ether

09:20 [Bc. Lucie Draslarová](#) (M2, Ing. Ctirad Červinka, Ph.D.)

Theoretical predictions of crystal cohesion of essential biogenic compounds

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

SERS studie orientace riboflavinu na zlatém mikrostrukturovaném povrchu

10:00 [Bc. Matěj Kmetík](#) (M2, Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.)

Nanoskopické studium modifikovaných PVDF membrán

10:20 [Bc. Denisa Lacinová](#) (M2, Ing. Daniel Ondo, Ph.D.)

Vliv sodných solí na vodné roztoky étherů ethylenglykolu

10:40 [Bc. Vendula Palatová](#) (M2, Ing. Pavel Morávek, Ph.D.)

Vliv solí na rovnováhu N-isopropylakrylamid - voda

11:00 [Bc. Vladimír Pouzar](#) (M1, Ing. Vojtěch Štejf, Ph.D.)

*Rekonsiliace sublimačních entalpií třech kalorimetrických standardů:
bifenyly, trans-stilbenu a kyseliny benzoové*

11:20 [Bc. Zuzana Součková](#) (M2, Dr. Ing. Pavel Vrbka)

Chování MTBE ve vodě s přísávkem směsného aditiva

vyhlášení výsledků

Preferential binding of Hofmeister salts to ethyl tert-butyl ether vs methyl tert-butyl ether

Bc. Tereza Dolečková (M2)

Školitel: RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.

Ethyl *tert*-butyl ether (ETBE) and methyl *tert*-butyl ether (MTBE) are chemicals with very similar physico-chemical characteristics and applications. Both are added to petrol in order to increase the octane number, improve the combustion process, and thus reduce emissions of hydrocarbons and carbon monoxide. Their basic physico-chemical properties are good miscibility with petrol and moderate solubility in water. It was established that solubility can be modulated by the addition of salts, yet the microscopic insight of salt-solute interactions has not been fully researched. Employing the apparatus of statistical thermodynamics on molecular dynamics simulation data, we describe the behaviour of ETBE and MTBE in a series of aqueous solutions of various Hofmeister salts in terms of preferential excess or depletion. Decomposing the solute surface at the level of functional groups, we quantify ion-specific preferential binding to polar and nonpolar domains of ETBE and MTBE. The trends are compared and the potential applicability to predict the salt-specific solubility of other ethers is discussed.

Theoretical predictions of crystal cohesion of essential biogenic compounds

Bc. Lucie Draslarová (M2)

Školitel: Ing. Ctirad Červinka, Ph.D.

Essential biogenic compounds, e.g. vitamins, are valuable substances for our body, even though we still know little about the physico-chemical properties of their molecular crystals. In order to model biochemical processes in our bodies, theoretical calculations of selected thermodynamic properties bring us valuable information. Main focus of this work is laid on vitamin B3 being an amid of nicotinic acid, vitamin B7 (biotin), and vitamin K3 (menadione), the latter being the only liposoluble vitamin among all the species considered in my thesis. Quantum-chemical calculations are performed for the ideal-crystalline phase of the vitamins on the PBE-D3/PAW level of theory, which is combined with quasi-harmonic approximation, efficiently accounting for anharmonicity of vibration degrees of freedom of the crystal. To increase the accuracy of calculated cohesion energies, ab initio fragment-based refinement, correcting pair interaction energies with advanced wave function methods, is used. Entropy, heat capacity, and density for the crystals at finite temperatures are finally computed. To acquire reliable reference data for validation of my calculations, my work includes also experimental determinations of the heat capacities using SETARAM μ -DSC IIIa calorimeter.

SERS studie orientace riboflavinu na zlatém mikrostrukturovaném povrchu

Bc. Radek Homola (M2)

Školitel: Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.

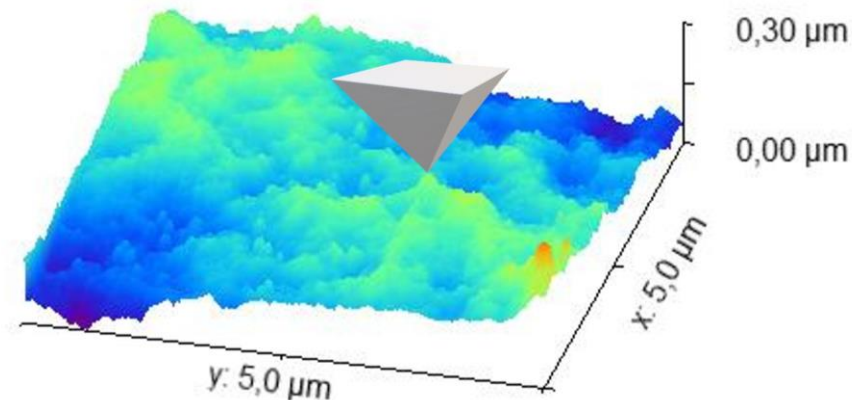
Studium interakce biomolekul s povrchem plasmonických kovů je zásadní pro vývoj nových typů senzorů. Klíčový je především mechanismus sorpce biomolekuly na substrát (fyzikální/chemická adsorpce) a prostorová orientace biomolekuly vůči povrchu. V této práci se testoval modelový systém riboflavinu (vitamín B₂) adsorbovaného na zlatém substrátu. Ten byl vytvořen galvanickým pokovováním. Molekula riboflavinu obsahuje ve své struktuře několik funkčních skupin, přes které se může adsorbovat na zlatý povrch. Povrch zlata je navíc velmi členitý, což zabraňuje vytvoření uspořádané monovrstvy, a umožňuje molekulám riboflavinu vázat se různým způsobem. Pro zkoumání adsorpce riboflavinu je velmi vhodná spektroskopie povrchem zesíleného Ramanova rozptylu (SERS). Tato metoda využívá drsnosti povrchu, který umožňuje díky jevu plasmonové rezonance zvýšení intenzity Ramanova rozptylu až o několik řádů v závislosti na vlnové délce budícího záření. Ze získaných signálů a základních povrchových výběrových pravidel je možné odhadnout orientaci a způsob adsorpce molekul riboflavinu. Při porovnání s teoreticky vypočítanými spektry lze potvrdit zastoupení různých orientací v konkrétních místech na povrchu vzorku. Morfologie povrchu byla studována pomocí mikroskopických technik.

Nanoskopické studium modifikovaných PVDF membrán

Bc. Matěj Kmetík (M2)

Školitel: Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.

Polymery jsou látky moderního života a v současné době je snaha vyvinout nové materiály, které vykazují specifické vlastnosti. V této práci byl studován polyvinylidenfluorid (PVDF) s bočními řetězci kvartérní amoniové skupiny (QMDA) a methakrylooxyethylfosforylcholinu (MPC). Jedná se o vysoce hydrofobní materiál, který se využívá pro mikrobioaplikace. Samotný PVDF a jeho kopolymery mají vysokou chemickou, ale i tepelnou odolnost, nejsou však odolné vůči působení mikroorganismů. Přídavek QMDA dává membránám antimikrobiální vlastnosti a MPC zajišťuje biokompatibilitu polymeru. Připravené membrány PVDF byly analyzovány pomocí techniky skenovací infračervené mikroskopie blízkého pole, jež umožňuje studium morfologie, fyzikálních a chemických vlastností povrchu materiálu s nanorozlišením. Díky této technice bylo možné sledovat i výskyt agregátů výchozích látek. Bylo zkoumáno pět typů membrán, které se lišily poměrem přidaných skupin MPC a QMDA. Plošné skeny byly zaznamenávány při vlnočtech 974, 1000, 1637 a 1720 cm^{-1} , které odpovídají absorpčním pásům PVDF a bočních řetězců, což nám umožnilo pozorovat strukturu a optické vlastnosti membrán, které jsou dány jejich chemickým složením. Na základě těchto dat byl posuzován vliv přidávaných skupin na povrchové vlastnosti membrány.



Vliv sodných solí na vodné roztoky étherů ethylenglykolu

Bc. Denisa Lacinová (M2)

Školitel: Ing. Daniel Ondo, Ph.D.

Tato práce prezentuje výsledky experimentálního měření vlivu sodných solí NaCl, Na₂SO₄ a NaSCN na étery ethylenglykolu. V rámci této studie byly studovány étery různé délky a těkavosti z vodných roztoků: monoglyme, diglyme, tetraglyme a polyethylenglykol 100 kg/mol. Monoglyme a diglyme byly měřeny metodou headspace plynové chromatografie, tetraglyme pomocí osmometrie v parní fázi. Nejméně těkavý řetězec polyethylenglykol byl studován zákalovou metodou a diferenciální skenovací kalorimetrií. Z výsledků měření vodných roztoků monoglymu, diglymu a tetraglymu byly vyhodnoceny vysolovací konstanty. Efekt teploty na těkavost vodných roztoků byl ve všech případech velmi nízký. U roztoků monoglymu, diglymu a tetraglymu byl pozorován vysolovací efekt od nejsilnějšího po nejslabší v pořadí Na₂SO₄, NaCl a NaSCN. V jediném případě se projevil efekt vsolování, a to u vodného roztoku polyethylenglykolu s NaSCN.

Vliv solí na rovnováhu N-isopropylakrylamid - voda

Bc. Vendula Palatová (M2)

Školitel: Ing. Pavel Morávek, Ph.D.

N-isopropylakrylamid (NIPAM) je významnou látkou především pro výrobu termoresponzivních polymerů. Vodný roztok poly-N-isopropylakrylamidu (pNIPAM) vykazuje dolní kritickou rozpouštěcí teplotu kolem 32 °C. Díky této vlastnosti jsou zkoumány možnosti použití pNIPAMu ve tkáňovém inženýrství či farmacii jako nosiče léčiv. Vlastnosti polymeru lze odhadnout ze simulací založených na interakcích monomeru s různými látkami. V literatuře jsou dostupná data popisující binární systém NIPAM – voda, data popisující interakce s jinými látkami dosud nebyla publikována. Tato práce se zabývá experimentálním stanovením rovnováhy kapalina – kapalina v ternárních systémech NIPAM – NaCl – voda, NIPAM – NaSCN – voda a NIPAM – GdnHCl – voda při teplotě 25 °C. Získaná experimentální data byla použita k vyhodnocení parametrů NRTL modelu, čímž byl získán termodynamický popis těchto systémů.

Rekonsiliace sublimačních entalpií třech kalorimetrických standardů: bifenyly, trans-stilbenu a kyseliny benzoové

Bc. Vladimír Pouzar (M1)

Školitel: Ing. Vojtěch Štejf, Ph.D.

V této práci jsem se zaměřil na přesný popis tlaků nasycených par a sublimačních entalpií bifenyly, *trans*-stilbenu a kyseliny benzoové. Pro tyto látky lze najít v literatuře několik na sobě nezávislých a poměrně konzistentních měření, a proto byly v roce 1999 doporučeny jako kalorimetrické standardy pro sublimační entalpii [1]. Některá použitá data jsou ale staršího původu a při podrobnějším zpracování a použití pokročilých datově-analytických metod jsou mezi nimi znatelné rozpory. Proto by bylo vhodné provést revizi. V této práci jsem se zaměřil na tři výše zmíněné látky a změřil jejich tlaky nasycených par spolu s výpočtem tepelné kapacity ve stavu ideálního plynu. Dále jsem provedl literární rešerši, abych našel co největší množství termodynamických dat. Použitím metody simultánní korelace, získám jejich popis s menší nejistotou než při běžném zpracování. Pomocí termodynamické závislosti tlaků nasycených par spočítám také sublimační entalpie, které mohu porovnat s předchozím doporučením a navrhnout je jako novou referenční hodnotu. [1] R. Sabbah, A. Xu-wu, J.S. Chickos, M.L.P. Leitão, M.V. Roux, L.A. Torres, Reference materials for Calorimetry and Differential Thermal Analysis. [In: Thermochim. Acta, Thermochim. Acta, 331 (1999) 93-204.

Chování MTBE ve vodě s přidavkem směsného aditiva

Bc. Zuzana Součková (M2)

Školitel: Dr. Ing. Pavel Vrbka

Fyzikálně-chemické vlastnosti, například rozpustnost malých molekul nebo zákalovou teplotu biomolekul, lze ve vodných roztocích ovlivňovat přidavkem solí. Vliv soli lze řídit lineárním vztahem, tzv. Sečenovou rovnicí. Účinek směsi aditiv je nejčastěji modelován jako lineární kombinace příspěvků jednotlivých solí. Nedávné experimenty studující kolaps termocitlivých polymerů však ukázaly značně neaditivní chování ve směsi silně vsolující soli a silně vysolující soli. Otázkou zůstává, zda neaditivní chování lze pozorovat již pro jednotlivé stavy polymeru nebo až na úrovni ovlivňování rovnováhy kolapsu. První z možností byla studována v rámci této práce, kde byl zvolen slabě polární rozpuštěnec tert-butyl-methyl-ether, jehož limitní aktivitní koeficient lze přesně určit pomocí inert gas stripping metody. Limitní aktivitní koeficienty byly stanoveny ve směsných roztocích silně vysolujícího Na_2SO_4 a slabě vysolujícího NaSCN o různých koncentracích. Přítomnost a míra neaditivního efektu byly vyhodnoceny porovnáním s aditivním modelem.

Fyzikální chemie III

MÍSTO: A125

KOMISE

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

Ing. Martin Klajmon, Ph.D.

RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Vladislav Aulich](#) (B2, Ing. Ctirad Červinka, Ph.D.)

Molekulárně dynamické simulace biokompatibilních polymerů pro návrh amorfních formulací farmakochemik

09:20 [Karolína Fárníková](#) (B3, Mgr. Ing. Eva Krupičková Pluhařová, Ph.D.)

Modelling of the Influence of Solvent on Enantioselectivity of Lipase CALB

09:40 [Patrik Kula](#) (B3, prof. Mgr. Pavel Jungwirth, CSc., DSc.)

The shape of critical interfaces

10:00 [Tibor Malinský](#) (B2, prof. Ing. Michal Fulem, Ph.D.)

Vývoj lékové formulace paclitaxelu ve formě pevné amorfní disperze: Fázové chování s vybranými biokompatibilními polymery

10:20 [Lukáš Peterka](#) (B3, prof. RNDr. Bc. Petr Slavíček, Ph.D.)

Teoretické studium molekuly bilirubinu

10:40 [Veronika Šritterová](#) (B3, Ing. Ctirad Červinka, Ph.D.)

Molecular simulations of the structure of porous metal-organic liquids

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

Electronic structure of ferrocenes: liquid phase photoemission vs. quantum theory

11:20 [Vít Turčin](#) (B1, prof. Mgr. Pavel Jungwirth, CSc., DSc.)

Ab-initio molecular dynamics of a solvated electron in small ammonia clusters

vyhlášení výsledků

Molekulárně dynamické simulace biokompatibilních polymerů pro návrh amorfních formulací farmakochemik

Vladislav Aulich (B2)

Školitel: Ing. Ctirad Červinka, Ph.D.

Limited bioavailability of numerous active pharmaceutical ingredients (APIs) caused by a poor solubility of their crystals in water impedes their wider use. Amorphous dispersions with biocompatible polymers offer a solution to overcome this issue. We aim at modeling a binary system containing sulfathiazole as an example of poorly soluble API, and polylactic acid (PLA) as a representative of a biocompatible polymer. Molecular dynamics simulations are used to investigate the properties of these substances. At first we start with simulating a polymer and API separately to validate various simulation settings and find out the best arrangement. For PLA, the effect of chain length, polydispersity, thermal history and initial conformation is studied. Further calculations are provided to obtain the glass transition temperature (T_g), densities, and the root mean square distance of the polymer chain termini. Force field files for sulfathiazole and PLA used during the simulations are then verified by comparison with experimental values.

Modelling of the Influence of Solvent on Enantioselectivity of Lipase CALB

Karolína Fárníková (B3)

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

Lipases are enzymes that catalyze hydrolysis of the ester bonds in fats. They are an essential part of lipid metabolism of the living organisms, but they also have industrial applications. Due to their ability to function in both water and organic solvents, they can be utilized for synthetic reactions such as transesterification or aminolysis. Their activity, chemo-, regio- and enantioselectivity are highly valued. Enantioselectivity is the ability of an enzyme to distinguish between the two enantiomers (not identical mirror images) and favor only one for the reactions. Interestingly, it can be affected by solvent, which is the subject of our research. To obtain molecular level insight into the solvent effects on enantioselectivity of *Candida Antarctica* lipase B, we used molecular dynamics simulations. We generated trajectories for the lipase with bound substrates in three different solvents and analyzed the type and number of interactions of substrates with their environment. This will allow us to better understand the catalytic abilities of lipase for synthetic purposes.

The shape of critical interfaces

Patrik Kula (B3)

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

Density profiles of liquid-vapor interfaces far from critical point (T_c) are commonly interpreted in the context of capillary wave theory (CWT). We investigate the behavior of interfaces close to T_c , and the validity of CWT at high temperatures. The first model is the CWT-predicted sharp surface, while the second one assumes a flat region that smoothly transitions between the liquid and vapor densities. We analyze MD simulations by directly comparing them to the two model interfaces at different temperatures. We compute the distributions and the normal-direction profiles of a range of properties, such as the number of neighboring atoms within a certain radius, the Voronoi volume of the particles along with its asphericity and the intrinsic surface.

Vývoj lékové formulace paclitaxelu ve formě pevné amorfní disperze: Fázové chování s vybranými biokompatibilními polymery

Tibor Malinský (B2)

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

The oral bioavailability of many drugs is very limited due to their low aqueous solubility when present in the crystalline form. One of the approaches to improve the oral bioavailability is the transformation of crystalline phase into amorphous state. However, pure amorphous forms tend to recrystallize in a very short time due to their metastability. Therefore, it is important to stabilize amorphous drugs using suitable biocompatible excipients such as polymers. So called amorphous solid dispersions (ASDs), in which drug is mixed with a polymer at the molecular level belong among the most promising strategies for enhancing the oral bioavailability. In this study, the thermodynamic and kinetic phase behavior of paclitaxel with selected biocompatible polymers was investigated to identify the most promising excipient for the development of paclitaxel formulation in a form of ASD. The solubility of paclitaxel in polymers, defining the thermodynamic stability of ASDs, and glass transition temperatures, defining the kinetic stability of ASDs, were studied by differential scanning calorimetry. The experimental solubility data were compared with the prediction using the quantum chemical model COSMO-RS as part of the evaluation of its performance in modeling drug-polymer phase diagrams.

Teoretické studium molekuly bilirubinu

Lukáš Peterka (B3)

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

Žlučové barvivo bilirubin je lineární tetrapyrrol, který přirozeně vzniká v tělech savců jako konečný produkt katabolismu hemu. Vysoká koncentrace bilirubinu v těle je příčinou novorozenecké žloutenky, která se standardně léčí fototerapií. Při ní se molekuly bilirubinu v důsledku interakce se zářením přeměňují na polárnější produkty, které tělo snadněji vyloučí. V této práci jsou provedeny první kroky ke studiu mechanismu této fotochemické reakce pomocí metod kvantové chemie a molekulových simulací. V první fázi mého projektu byla provedena konformační analýza molekuly bilirubinu. Dále byly vypočteny energie zbývajících konfigurací molekuly. Byla také studována molekula lumirubinu, strukturního isomeru bilirubinu. V další fázi byl studován bilirubin v excitovaném stavu a analyzovány elektronové přechody. Výpočty základních stavů byly prováděny pomocí kombinací předběžných optimalizací semiempirickou metodou PM6 a následnou optimalizací DFT metodou B3LYP s bází 6-31g*, excitované stavy byly vypočteny metodou TD-DFT. Na závěr byla provedena dynamická simulace molekuly v základním stavu a simulace molekuly v excitovaném stavu metodou OM3. Konečným cílem práce je objasnění mechanismu fotochemické reakce bilirubinu a návrh ultrarychlých laserových experimentů k jejímu potvrzení.

Molecular simulations of the structure of porous metal-organic liquids

Veronika Šritterová (B3)

Školitel: Ing. Ctirad Červinka, Ph.D.

Porous liquids (PLs) represent a new group of materials as they combine the permanent porosity of solid sorbents and the fluid properties of liquids. This work presents a molecular dynamics simulation addressing structural and thermodynamic properties of metal-organic frameworks (MOFs) and ionic liquids (ILs) with potential to compose a porous liquid. ILs with varying molecular sizes and a particular MOF pattern substituted with several metal ions are considered. Properties of both incriminated material classes are examined separately. To validate the accuracy of predictions of structural parameters, densities are evaluated for several temperatures and pressures and compared with their experimental counterparts. While a close agreement of theory and experiment is reached for ILs, the used force field for the MOFs is unable to reproduce the negative thermal expansion. It is shown that the ion pairs are presumably too voluminous to enter the cavities of MOFs. The prediction is based on effective molecular dimensions of ILs, the size of which exceeds the available aperture dimensions in the considered MOFs. That leaves potential for adding structured voids into liquids which is highly attractive in terms of promising applications including gas capture, catalysis, and separations.

Electronic structure of ferrocenes: liquid phase photoemission vs. quantum theory

Tomáš Albert Štefanov (B3)

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

Ferrocene is an organometallic compound, formed by a central Fe atom and two η^5 -cyclopentadienyl ligands. It is used in applications as a ligand scaffold, a non-toxic substitute for lead additives in fuels and as a standard electrode in electrochemistry. In my work, I focus on exploring the electronic structure of ferrocene using novel technologies of liquid state PES. The work aims at a theoretical interpretation of XAS obtained with this new technique. I specifically concentrate on the metallic L-edge, which arises as a result of the excitation of electrons from the 2p orbitals of the metal into the 3d orbitals, respectively into molecular orbitals with 3d character. For this purpose, I use techniques based on DFT as well as more demanding multireference approaches (CASSCF) using program ORCA. I focus on the influence of the type of solvent used, the conformation, the type of functional and the substituents. I have also performed calculations taking into account relativistic effects and thermal motion of the molecule using the Wigner sampling technique. We then compared the theoretically predicted spectra with the experimentally obtained spectra measured at the BESSY II synchrotron at the Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie using the liquid flat-jets technique.

Ab-initio molecular dynamics of a solvated electron in small ammonia clusters

Vít Turčín (B1)

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

Liquid ammonia dissolves alkali metals, producing blue or bronze solutions depending on concentration. These solutions consist of alkali metal cations and electrons localized in solvent cavities between solvent molecules. They are used in organic chemistry, for instance in the Birch reduction. It is known from the experiments that the smallest stable cluster containing a solvated electron, is composed of 13 ammonia molecules. On the other hand, the reported theoretical calculations on ideal clusters at 0 K show that the needed number of ammonia molecules is 6. Previously performed gas-phase 0 K optimizations of symmetric clusters, containing from 2 to 8 ammonia molecules with one excess electron have shown, that 4-5 ammonia molecules can stabilize one excess electron. However, these 0 K ideal structures don't reflect the real finite temperature experimental structures and therefore carry no information about their electronic stability. *Ab-initio* molecular dynamics simulation of the 2 to 48 ammonia molecules with excess electron was performed in order to obtain the thermal structures of the small experimental clusters. The obtained structures were used to study the electronic stability of the finite temperature clusters by calculating their vertical detachment energy (VDE).

Fyzikální chemie IV

MÍSTO: A402

KOMISE

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

RNDr. Eva Muchová, Ph.D.

Ing. Ctirad Červinka, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Bc. Josef Cikhart](#) (M2, RNDr. Michal Kolář, Ph.D.)

Studium konformačního chování peptidů v nevodném prostředí

09:20 [Bc. Lukáš Jiříšně](#) (M2, Ing. Martin Klajmon, Ph.D.)

Stavová rovnice SAFT- γ Mie a farmaceutika: Současný stav a preliminární výpočty

09:40 [Bc. Aneta Leskourová](#) (M2, RNDr. Michal Kolář, Ph.D.)

Zhrubený model pro simulace ribozomů

10:00 [Bc. Tomáš Ovad](#) (M2, prof. RNDr. Bc. Petr Slavíček, Ph.D.)

Electron vs. photon impact excitation: the case of dielectric gases

10:20 [Bc. Martin Procházka](#) (M1, prof. RNDr. Bc. Petr Slavíček, Ph.D.)

Calculating redox potentials: QM vs. photoemission spectroscopy approaches

10:40 [Bc. Lucie Tučková](#) (M2, Doc. Mgr. Michal Straka, Ph.D.)

Molekuly s anti-Hundovským pořadím prvních excitovaných stavu jako kandidáti pro 5. generaci OLED: teoretická studie

11:00 [Bc. Gabriela Želonková](#) (M1, RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.)

From volumetric to enthalpic properties of neopentanol

vyhlášení výsledků

Studium konformačního chování peptidů v nevodném prostředí

Bc. Josef Cikhart (M2)

Školitel: RNDr. Michal Kolář, Ph.D.

Proteins are crucial for all physiological processes in a cell. They are translated from messenger ribonucleic acid (mRNA) on the ribosome, where they emerge through the ribosomal exit tunnel as nascent polypeptide chains. These chains of amino acids may interact with the ribosomal exit tunnel causing significant changes in translation rates and consequently, cell physiology. A recently identified nascent chain, VemP, facilitates translational arrest and has been the subject of an experimental study of its structure through SESCA analysis of circular dichroism spectra in solutions of 2,2,2-trifluoroethanol (TFE). This work aims to rationalize this experiment by means of molecular dynamics simulations. Also, we introduce a methodology of representing the experimental conditions *in silico*.

Stavová rovnice SAFT-γ Mie a farmaceutika: Současný stav a preliminární výpočty

Bc. Lukáš Jiříšně (M2)

Školitel: Ing. Martin Klajmon, Ph.D.

Stavová rovnice SAFT-γ Mie je v současnosti jedním z nejprogresivnějších modelů z rodiny SAFT. Teoretické základy, flexibilita v popisu molekulární struktury a interakcí a skupinově-příspěvkový charakter této rovnice jsou dobrými vlastnostmi, které ovšem nutně nezaručují kvalitu predikce pro široké spektrum látek. SAFT-γ Mie je, podobně jako ostatní SAFT rovnice, velmi závislá na parametrizaci. Ve své práci se zaměřuji na fungování SAFT-γ Mie při použití na komplexní systémy s léčivými. Aplikací SAFT-γ Mie na léčiva je v literatuře zatím omezeně, a proto nejprve zanalyzuji současný stav. Dále srovnám odhady hustoty, tlaku par a tepelné kapacity pěti čistých modelových léčiv s experimentálními daty a také jejich rozpustnosti v řadě rozpouštědel. Na základě obdržených výpočetních výsledků demonstruji rozdíly mezi odhady získanými ze SAFT-γ Mie a odhady pomocí rovnice PC-SAFT, která doposud farmaceutickým aplikacím dominovala.

Zhrubený model pro simulace ribozomů

Bc. Aneta Leskourová (M2)

Školitel: RNDr. Michal Kolář, Ph.D.

Ribozom je klíčový biomolekulární komplex zodpovědný za syntézu bílkovin ve všech živých organismech. Děje spojené s ribozomem probíhají na časových škálách od pikosekund po sekundy, což je obtížné zachytit jedinou experimentální technikou. Kombinace několika technik je mnohdy důležitá pro vytvoření detailního a robustního obrázku o studovaném ději. Počítačové simulace mohou sloužit jako vhodný propojovací činitel. Pro simulace takto velkých systémů je často výhodné použít zhrubené modely, ve kterých jednotlivé částice reprezentují skupiny několika atomů. Má práce si klade za cíl takovýto zhrubený model pro simulaci ribozomů vytvořit a otestovat jeho stabilitu během simulací. V tomto textu je podán popis vybraného zhrubeného modelu Martini. Model Martini i několik jeho alternativních verzí jsou použity k simulaci jednoduchého testovacího proteinu (T4 lysozymu). Jednotlivé simulace jsou porovnány mezi sebou a vzhledem k experimentální struktuře lysozymu a výsledky analýz jsou použity pro určení dalších kroků při vytváření zhrubeného modelu ribozomu.

Electron vs. photon impact excitation: the case of dielectric gases

Bc. Tomáš Ovad (M2)

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

Electron–molecule collisions are of great interest in science and technology. However, obtaining the scattering cross sections still poses a very challenging task, both theoretically and experimentally. In this study, I focus on the electron-induced chemistry of dielectric gases, C_4F_7N and $C_5F_{10}O$. The electron-impact excitation and fragmentation of these molecules is still rather poorly understood, although they are promising greener alternatives to SF_6 in gas-insulated equipment. In case of C_4F_7N , photoabsorption and electron energy loss spectra were measured by our experimental colleagues. The results implied a surprisingly significant difference in excited states populations upon photon and electron impact excitation. We confirmed these differences by calculating the photoabsorption and electron cross sections *ab initio*, based on the Born approximation and reflection principle. Furthermore, I modelled the time evolution of C_4F_7N in different initial excited states and suggested the main fragments to be expected in the discharge. Currently, I am testing these calculations for the $C_5F_{10}O$ molecule, where no experimental reference is available.

Calculating redox potentials: QM vs. photoemission spectroscopy approaches

Bc. Martin Procházka (M1)

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

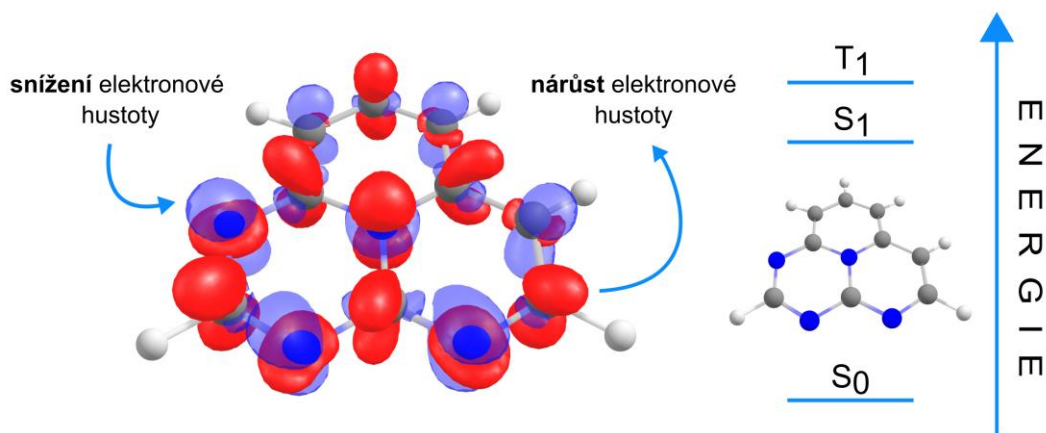
Redox reactions are ubiquitous in natural processes. Experimental determination of their key characteristic, redox potential, is often impractical, e.g. for reactions involving unstable species or subsequent protolytic equilibria. Reliable theoretical modelling of these reactions is, therefore, desirable both for understanding natural and technological processes. Using quantum chemistry methods we can obtain redox potentials by calculating the Gibbs free energies of the reaction. The calculated values depend strongly on the method chosen, and the error can be quite large. Since a majority of relevant reactions occur in an aqueous solution, it is crucial to have models that describe the solvated species sufficiently. Moreover, redox potentials become pH-dependent once proton transfer is involved. In this work, I employ several methods of modeling redox potentials of L-ascorbic acid and anti-cancer drug nimorazole. The long term goal of the present project is to extract the electrochemical data for these (and other) systems using the photoemission spectroscopy techniques in the liquid phase. In the present work, I discuss the possible connection between the electrochemical and spectroscopy worlds. This represents a big challenge for us regarding our future work in this field.

Molekuly s anti-Hundovským pořadím prvních excitovaných stavu jako kandidáti pro 5. generaci OLED: teoretická studie

Bc. Lucie Tučková (M2)

Školitel: Doc. Mgr. Michal Straka, Ph.D.

Molekuly s invertovaným pořadím prvního excitovaného singletu a tripletu představují materiály pro 5. generaci organických světlo vyzařující zařízení (OLED). Jejich hlavní výhodou v porovnání s emitory předchozích generací je jejich vysoká stabilita a nízká cena při současném zachování výborných kvantových výtěžků. S využitím metod výpočtení chemie byly studovány excitační energie π -konjugovaných N-subsituovaných systému, u kterých je pořadí prvního singletového a tripletového excitovaného stavu opačné oproti tomu vyplývajícímu z Hundova pravidla. Přestože použité *ab initio* metody se shodují na inverzi singletu a tripletu, na úrovni časově závislé teorie funkcionálu hustoty je tripletový stav identifikován chybně jako energeticky nižší než stav singletní. V rámci této práce je osvětleno, které excitace přispívají k inverzi prvních excitovaných stavů, a jsou navrženy metody vhodné pro další studium podobných systémů.

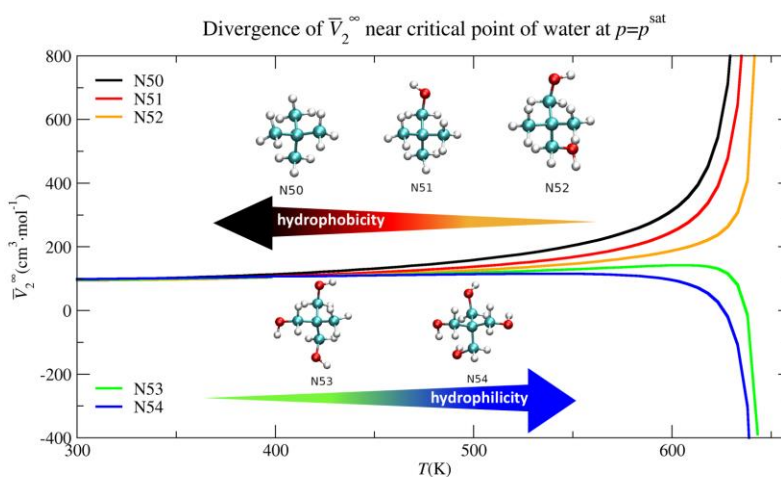


From volumetric to enthalpic properties of neopentanol

Bc. Gabriela Želonková (M1)

Školitel: RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.

The aim of this work is to broaden our microscopic understanding of the volumetric and enthalpic properties of solutes in aqueous solutions reflecting their hydrophilic and hydrophobic interactions. By means of molecular dynamics simulations we investigate series of neopentanol molecules, gradually substituting methyl- with the hydroxymethyl- groups. Building on our previous excellent agreement of limiting partial molar volumes with experimental data at mild temperatures, we focus in this work on conditions near the critical point of water, which are exceptionally difficult to study experimentally. The analysis of volumetric properties answered a long-standing question, whether highly polar solutes act at the critical region as hydrophobic or ionic species. To that end, the partial molar volumes were determined by finite differences and fitted by Sedlbauer's equation of state. This flexible model, applicable up to the critical point, accounts for the possible divergence of the partial molar volume toward positive or negative infinity. Finally, using the same set of simulation data, we outlined the calorimetric properties of neopentanol series and observed the qualitative difference in the limiting hydration enthalpy of hydrophobic and hydrophilic solutes in the critical region.



Ústav chemického inženýrství (409)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

doc. Dr. Ing. Pavlína Basařová

SEZNAM SEKČÍ

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

SPONZOŘI ÚSTAVU CHEMICKÉHO INŽENÝRSTVÍ

ZENTIVA



Chemical Engineering I

MÍSTO: B141B

KOMISE

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

Ing. Edyta Paula Adrián, Ph.D.

Ing. Filip Hládek

Ing. Lucie Mašková

zástupce sponzora

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 [Bc. Viet Tomáš Nguyen](#) (M1, Ing. Edyta Paula Adrián, Ph.D.)

Mikroskopické strukturování povrchů pro tkáňové inženýrství/Microscopic surface patterning for tissue engineering applications

08:50 [Bc. Tetyana Zheleznyak](#) (M2, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Modeling of PNA-SCR system with heat exchanger for abatement of NO_x emissions during cold start

09:10 [Gwendal Tardivel](#) (B3, prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha)

Hydrodynamics measurements in multiple impeller pilot-plant reactor

09:30 [Colin Fauchadour](#) (M2, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Filtration of particulate matter in exhaust aftertreatment filters

09:50 [Bc. Terezie Císařová](#) (M1, Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D.)

Computational stalking of hypothetical ladderane membrane behaviour

10:30 [Jan Sochor](#) (B2, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

Stabilization of suspension produced by anti-solvent precipitation in spray dried matrix

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

Affordable turbulence modelling with immersed boundary method

11:10 [Bc. David Horký](#) (M2, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)

Triboelectric separation of plastic waste: how to get from batch to continuous process?

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

Manufacturing of multi-drug personalized medicine by solvent impregnation

11:50 [Bc. Zbyněk Tomiška](#) (M2, Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.)

Cahn-Hilliard modelling of hollow fibers morphogenesis

vyhlášení výsledků

Mikroskopické strukturování povrchů pro tkáňové inženýrství/Microscopic surface patterning for tissue engineering applications

Bc. Viet Tomáš Nguyen (M1)

Školitel: Ing. Edyta Paula Adrián, Ph.D.

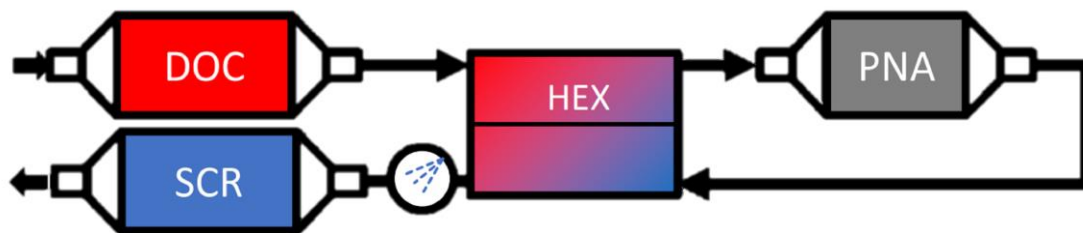
With the rapid advancement of technologies and studies of different kinds, humankind has been able to benefit from such progress. One of the most prominent examples of this progress would be the improvement of living standards and medical treatments that enable one to live a longer and healthier life compared to what was only a few decades ago. However, not even modern medicine has solutions for diseases that damage organs to such an extent, that the only way to save a patient is to have the affected organs replaced by transplanting a new organ, from a donor. To tackle the shortage of organs and tissues from donors, many have been putting their hopes into tissue engineering. As all of the tissue engineering applications require a vast number of healthy cells, numerous studies regarding cell culture have been conducted in order to improve their quality, viability and functionality. Generally, cells are cultivated on flat petri dishes and laboratory flasks. Nonetheless, it has been proven that cells show better proliferation on substrates with surface patterning. Thusly, this work focuses on preparation of surfaces with microscopic surface patterning enhancing cell proliferation and differentiation.

Modeling of PNA-SCR system with heat exchanger for abatement of NO_x emissions during cold start

Bc. Tetyana Zheleznyak (M2)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Combined exhaust aftertreatment systems including a passive NO_x adsorber (PNA) followed by a catalyst for selective catalytic reduction of NO_x (SCR) provide a promising solution for meeting the upcoming strict NO_x emission limits for Diesel engines. The basic idea is that PNA adsorbs NO_x during the cold start and releases it when the downstream SCR (including the urea injection unit) reaches its operating temperature. However, the NO_x desorption from PNA may occur earlier than the SCR unit is heated up, resulting in an undesired NO_x slip. In this contribution I present a simulation study exploring the cold-start performance of a PNA–SCR system extended with a counter-current heat exchanger (HEX). The heat recuperation accelerates the SCR heat-up while slowing down the increase of the PNA temperature, which effectively delays the NO_x desorption peak from the PNA and increases the chances that the desorbed NO_x are completely reduced in the SCR. Three different PNA formulations are considered: Pd/BEA zeolite (BEA-PNA), Pd/SSZ-13 zeolite (SSZ13-PNA), and PtPd/ceria-zirconia-alumina (CZA-PNA). These adsorbers are studied in combination with two different SCR formulations: V₂O₅/WO₃/TiO₂ (V-SCR) and Cu/SSZ-13 (Cu-SCR). A new 1D model is developed for the heat exchanger device.



Hydrodynamics measurements in multiple impeller pilot-plant reactor

Gwendal Tardivel (B3)

Školitel: prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha

Mass transfer is one of the fundamental phenomena of the process industry, adopted in chemical processes worldwide. The mass transfer processes are often carried out in stirred tank reactors due to the ability easily vary operational conditions. One of the purposes of mechanical agitation is to disperse the gas phase in the liquid. The finer the dispersion, the more interfacial area will increase and therefore the more material transfer is promoted. The advantage of using an agitated vessel as a reactor type is that it is more efficient when high liquid retention is required. To intensify the contact between a small amount of gas and a large amount of liquid, we often use mechanically agitated gas-liquid reactors with single or multiple impeller configurations on common shaft. The fact to have more than one impeller allows having a better hydrodynamic properties such as distribution of shear stress, energy dissipation, improved liquid circulation and better gas distribution. This work aims to measure residence time distribution, which is an important parameter for the evaluation of exchange flows between impeller sections, i.e. for individual impeller regions. This is gained by probes measuring conductivity.

Filtration of particulate matter in exhaust aftertreatment filters

Colin Fauchadour (M2)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Particulate matter emitted from combustion engines consists of elemental carbon particles which agglomerate and adsorb other compounds. The soot particles have a negative impact on the environment and thus must be removed. This can be done using ceramic particulate filters composed of parallel channels that are alternately plugged at one end. Exhaust gas is forced to pass through the porous wall and soot is trapped on the walls. The captured soot is then oxidized, and the filter is regenerated. Mathematical modeling is an important part of the filter design targeting on high filtration efficiency and reasonably low pressure drop. The soot size distribution allows for two types of filtration: deep filtration and cake filtration. The applied model assumes three mechanisms: interception, inertial impaction and Brownian diffusion. It can predict the filtration of particulate matter along the reactor but also the soot oxidation reactions into CO and CO₂. In this work, the developed model is verified by performing multiple simulations of filtration and regeneration under various operating conditions and filter configurations.

Computational stalking of hypothetical ladderane membrane behaviour

Bc. Terezie Císařová (M1)

Školitel: Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D.

Molecular dynamics (MD) as a prediction tool has been used for molecular systems ranging from a bunch of atoms to the whole biosystems. It permits us to observe the configuration development of the system in time and to compute various descriptive data just with the knowledge of a few parameters and initial system configuration. This work is engaged in predicting the behaviour of the ladderane-phospholipid bilayer by MD methods. A Ladderane phospholipid is a structure with possibly beneficial influence when integrated into the liposome membrane. Liposomes are spherical nanocapsules used as drug carriers that facilitate the drug distribution in organism. However, they often suffer from spontaneous leakage of encapsulated drugs. The permeability of liposomes at different temperatures is given by their phospholipid composition. Thus, we want to predict the potential extraordinary behaviour of liposomes with incorporated ladderanes. By MD methods, we can obtain data like area per lipid, thickness of the bilayer, lateral diffusion etc. Results are then used to interpret experimental data. With both approaches, it may be predicted whether liposomal structures such as ladderanes are suitable for liposome creation and possibly explain their so-far unknown purpose in annamox bacteria.

Stabilization of suspension produced by anti-solvent precipitation in spray dried matrix

Jan Sochor (B2)

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

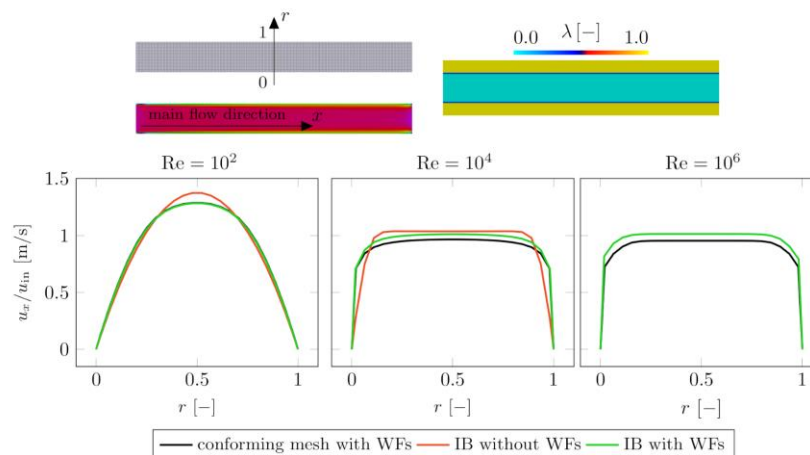
Spray drying is a method of turning liquid material into dry powder of fine particle size. Thanks to its scalability, simplicity, and cost efficiency it is widely used in pharmaceutical industry as a method of improving bioavailability of drugs and as a step to tableting. The somewhat novel “three-fluid nozzle” uses two different inlet feeds, which get combined in the nozzle tip and subsequently atomized. The aim of my work is combining spray drying with in-situ anti-solvent precipitation, a common particle size reduction method, using different parameters (such as solvent/anti-solvent ratio, temperature...) with the three-fluid nozzle to make the powder that is easier to handle, due to improved flow properties and further improve bioavailability of drugs, which can be achieved by improved wettability and dispersibility of the powder and low drug particle size.

Affordable turbulence modelling with immersed boundary method

Bc. Lucie Kubíčková (M2)

Školitel: Ing. Martin Isoz, Ph.D.

Immersed boundary method (IBM) is a simulation approach used in computational fluid dynamics. The core idea is that the simulated part geometry is not directly represented via a complex conforming computational domain, but it is projected onto a simple domain by a scalar field (λ) and adjustment of governing equations. Thus, the time spent on mesh generation is substantially reduced. It is advantageous to use the IBM in geometry optimizations, where having a single mesh and updating only the scalar field allows for a massive optimization speed-up. Nonetheless, there is a problem with simulation of the fluid behavior in the boundary layer near the immersed walls. In general, this problem can be solved by a mesh refinement close to the IB. However, this destroys the mesh independence on the specific geometry. Moreover, the more turbulent the flow is the finer mesh is required and the simulation time rapidly increases making any optimization unaffordable. Hence, in this work, we aim to avoid this problem by using established turbulence models where the turbulent behavior is approximated using closure variables and specific boundary conditions, wall functions (WFs). The main contribution of the work lies in design and implementation of the wall functions into our custom IBM variant.



Triboelectric separation of plastic waste: how to get from batch to continuous process?

Bc. David Horký (M2)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Electrostatic charging of material surfaces during mutual friction is a well-known phenomenon. It occurs not only in industry but also in everyday life, and it causes various problems, such as undesired discharges that may ignite fires or cause explosions. However, static electricity can be useful in many processes, for example, in a triboelectric separator of plastic waste. A crucial step towards using the separator on an industrial scale is transforming it from a batch to a continuous process. This transformation's main issue lies in the not-fully understood mechanism of triboelectric charging. It may be influenced by various factors, such as atmospheric humidity, chemical additives on the surface of the charged materials, or even an external electric field. These factors influence the resulting polarity and absolute value of surface charge, and thus it is necessary to satisfyingly understand them to make the process effective. In our experiments, the effect of an external electric field and its direction on the resulting saturation charge was studied. Additionally, conductive polymers were used as charging materials and their influence on the charging mechanism was examined. Knowledge gained in this research may help to transfer triboelectric separation to a continuous process.

Manufacturing of multi-drug personalized medicine by solvent impregnation

Bc. Zuzana Hlavačková (M2)

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

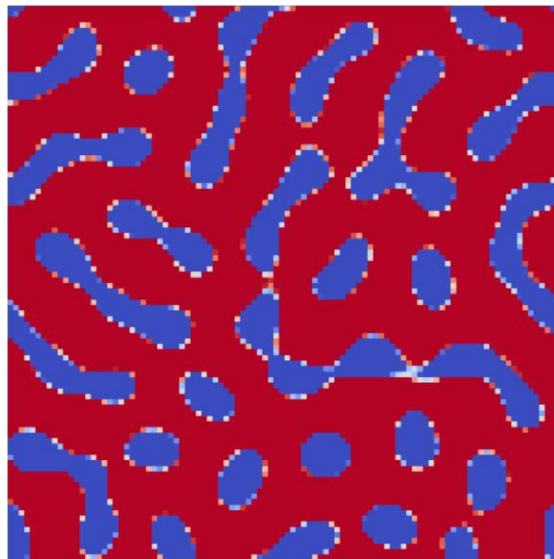
The current ways of drug manufacture are based on large-scale production with a few dosage strength variations. The dosage strength often differs from the patient-specific needs, which leads to the patient being constantly slightly underdosed or overdosed. Patients often get drugs prescribed in various combinations with other drugs. This results in low compliance of the patients. The aim of personalized medicine is to create drugs that are tailored to each patient using patient-specific information. Promising ways of creating such medicine are minitablets or drop-on-demand (DoD) technique and others. The tablets in this work were prepared, using the DoD technique, by layer-by-layer precise droplet loading from a solution of the desired active pharmaceutical ingredient (API). Placebo tablets containing a high amount of mesoporous silica were used as a substrate. The pores of mesoporous silica are big enough to capture the API and small enough to prevent the API from recrystallisation. Therefore, the API remains in its amorphous form. The aim of this work was to study the dissolution profiles from tablets containing combinations of two and three APIs prepared by the DoD method and to study the interactions of APIs between each other.

Cahn-Hilliard modelling of hollow fibers morphogenesis

Bc. Zbyněk Tomiška (M2)

Školitel: Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.

Hollow fibers are one of the most popular membrane materials used for a gas separation. The advantage of hollow fibers, in comparison to different membrane materials, is their large membrane surface per module volume. The problem studied in this work is mathematical modelling of a formation of the hollow fiber. The mechanism of the morphogenesis is that two concentric streams of polymer solution and antisolvent are gushed from two concentric nozzles. During the downward fall, the two streams are mixed and consequently form thin tube of porous polymer with the hole inside originating from the inner nozzle. The developed dynamic, spatially 2D simulation describing morphogenesis of the hollow fiber is based on Cahn-Hilliard model of spontaneous phase separation. The primary goal of this work is an extension of Cahn-Hilliard model with balance of momentum, i.e. description of convective flow, which should allow us to predict morphological features (e.g. finger-like pores) that cannot be captured by purely diffusion-based model.



Chemické inženýrství II

MÍSTO: BS4

KOMISE

doc. Dr. Ing. Milan Jahoda (předseda)

Ing. Jiří Lindner, Ph.D.

Ing. David Gráf

Ing. Jakub Staš

zástupce sponzora

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 [Samuel Uhliarik](#) (B3, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

Vývoj minitabletiék pre zvýšenie adherencie v liečbe hypertenzie

08:50 [Klára Třísková](#) (B3, Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.)

Modifikované nanokrystaly pro cílené doručování léčiv

09:10 [Michal Neuwirth](#) (B3, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.)

Příprava kompozitních nosičů léčiv v průtočném systému

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

Dynamické modelování vývoje fázového rozhraní

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

Kapacitní deionizace v systémech s nanostrukturovanými elektrodami

10:30 [Bára Pinčáková](#) (B3, RNDr. Ivan Řehoř, Ph.D.)

Undulační pohyb hydrogelových mikropřevodců

10:50 [Matyáš Khýr](#) (B2, Ing. Martin Isoz, Ph.D.)

Verifikace a aplikace dynamického řešiče pro neizotermní reaktivní proudění

11:10 [Matěj Honzík](#) (B2, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Vliv přítomnosti pevných částic v katalytickém filtru na oxidaci CO

11:30 [Hynek Housar](#) (B2, prof. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.)

Příprava a optimalizace CBD emulzí

vyhlášení výsledků

Vývoj minitablietiek pre zvýšenie adherencie v liečbe hypertenzie

Samuel Uhliarik (B3)

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

Adherencia liečby, alebo aj miera ochoty pacienta sa liečiť, je v dnešnej dobe veľmi dôležitou súčasťou úspešnej terapie. Najmä u ľudí s množstvom liekov dochádza k zabúdaniu a vynechaniu dávky lieku. Naším cieľom je zredukovať množstvo excipientov v pevnej liekovej forme a tým zároveň znížiť počet tabliet. Toto je docielené pomocou formulácie minitabliet, ktoré majú podobné zloženie ako originál, no s dramaticky vyšším obsahom účinnej látky, ktorej uvoľňovanie je ale totožné s originálom. Vďaka ich veľkosti pod 3mm sme schopní do jednej želatínovej kapsule vložiť viacero minitabliet tak, aby výsledná dávka zodpovedala priamo pacientovi na mieru. Taktiež sú minitablety vhodné aj pri kombinovanej terapii, nakoľko do kapsule je možno vložiť viacero minitabliet s rôznou účinnou látkou. Táto skutočnosť sa napríklad využíva pri liečbe hypertenzie, kde je kombinácia rôznych účinných látok bežnou praxou.

Modifikované nanokrystaly pro cílené doručování léčiv

Klára Třísková (B3)

Školitel: Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.

Nanokrystaly mají v medicíně širokou škálu možných uplatnění, ať už pro jejich schopnost zvyšovat rozpustnost a tím biodostupnost léčiv, nebo pro možnost cíleného doručování léčiv. Proto je ovšem nutné nanokrystaly vhodným způsobem stabilizovat. Optimalizace přípravy nanokrystalů proběhla na základě předchozího výzkumu kurkuminových nanokrystalů metodou mokrého mletí. Pro přípravu pokročilých nanokrystalů schopných spolehlivě zajistit cílené doručování účinných látek je testována kovalentní modifikace, kterou umožňuje například polymer pHPMA reagující s látkami obsahujícími aminoskupiny. Při hledání vhodných léčiv pro tento typ stabilizace byl testován hydrochlorothiazid, u kterého došlo při pokusu o namletí nanokrystalů ke vzniku polydisperzní směsi a ukázal se tak být nevhodnou látkou pro tyto účely. Příprava nanokrystalů ibrutinibu byla úspěšná a bude další testovanou látkou pro vytvoření kovalentní stabilizace.

Příprava kompozitních nosičů léčiv v průtočném systému

Michal Neuwirth (B3)

Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

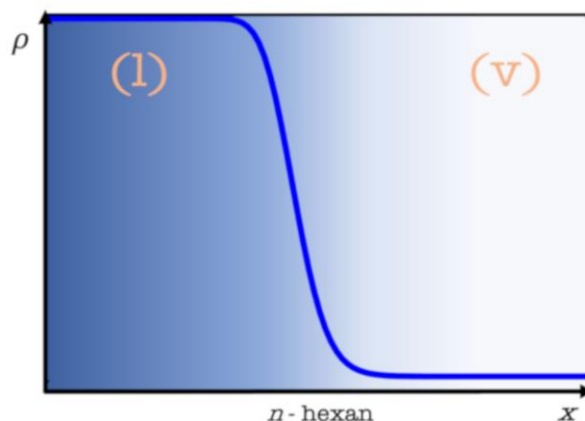
Jedním z problémů nových léčiv je jejich špatná rozpustnost ve vodě, což má za následek nutnost větší dávky, která zvyšuje riziko vedlejších účinků. Snížení dávky se dá docílit použitím amorfní formy těchto léčiv, která je více rozpustná než jejich krystalická forma a využitím nano-nosičů léčiv. Mezi nejpoužívanější nano-nosiče patří liposomy. Nevýhoda liposomů spočívá v jejich malé kapacitě pro hydrofobní látky. Zvýšení kapacity lze dosáhnout využitím kompozitního nosiče, kde se léčiva adsorbují do pórů nanočástic oxidu křemičitého, místo aby se adsorbovala na stěnu liposomu a do jeho vodné kavity. Nanočástice SiO_2 se poté obalí liposomem, který zabrání předčasnému uvolnění léčiv. Takto připravené kompozitní částice se nazývají LCSNs (lipid coated silica nanoclusters). Předešlý výzkum LCSNs dokázal vylepšit vsádkovou přípravu, ta ale stále nabízí pouze úzké parametrické okno pro přípravu, proto se nabízí průtočné systémy. Cílem práce je připravit LCSNs v průtoku, kdy se v principu jedná o antisolventní precipitaci modifikovanou pro LCSNs. Důležitými předpoklady jsou správně zvolené parametry, které se zjistí experimentálně.

Dynamické modelování vývoje fázového rozhraní

Anna Šmídová (B3)

Školitel: Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.

Popis dějů na fázovém rozhraní hraje důležitou roli u matematických modelů, které simulují přípravu hetero-fázových či porézních materiálů s definovanou morfologií, například se jedná o polymerní pěny, porézní membrány či houževnaté polymery. Důležitým vstupním parametrem těchto modelů je mezifázové napětí separujících se nemísitelných kapalin. Tento parametr je často experimentálně nedostupný a v matematických modelech bývá pouze odhadován. Cílem této práce je *ab initio* predikce povrchového a mezifázového napětí pro různě komplikované chemické systémy, aby tyto veličiny mohly být prakticky využity při simulaci utváření hetero-fázových polymerních materiálů. V rámci tohoto příspěvku se zabýváme řešením jednosložkových systémů kapalina-pára, jejichž volná energie je popsána pomocí Van der Waalsovy stavové rovnice. Integrací Cahnovy–Hilliardovy rovnice získáváme ustálený profil hustoty na fázovém rozhraní, s jehož pomocí odhadujeme povrchové napětí v daném systému. V tuto chvíli model umožňuje predikci povrchového napětí za běžných teplot pro jednoduché uhlovodíky v solidní shodě s experimentálními hodnotami, v budoucnu bude rozšířen o další složky a volná energie systému bude popsána Floryho-Hugginsovou teorií vhodnou pro termodynamický popis systémů polymer-rozpouštědlo.



Kapacitní deionizace v systémech s nanostrukturovanými elektrodami

Richard Lego (B3)

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

V sušších oblastech Země, kde je nedostatek sladké vody (koncentrace soli < 1 g/L), se dá po určitém zhodnocení využít voda slaná (koncentrace soli ~ 35 g/L). Zhodnocení slané vody spočívá mimo jiné ve snížení koncentrace soli na hladinu sladké vody, což může být provedeno například kapacitní deionizací (KDI). KDI je rychle se rozvíjející elektrokinetická separační metoda uplatňovaná při deionizaci roztoků, jako je například slaná nebo odpadní voda. Spočívá v umístění vnějšího napětí mezi elektrody, mezi kterými se nachází roztok s rozpuštěnými ionty. V důsledku protékajícího elektrického proudu mezi elektrodami migrují rozpuštěné ionty k jedné či druhé elektrodě, kde se dočasně uloží, a ze zařízení odtéká deionizovaný roztok. Motivací pro KDI je její energetická úspornost oproti rozšířeně používané reversní osmóze při deionizaci zředěnějších roztoků, jako je například brakická voda (koncentrace soli $\sim 1-10$ g/L). Na druhou stranu, nevýhodou KDI je neschopnost separovat nenabitě složky v roztoku. Hlavním cílem tohoto projektu je navrhnout a sestavit zařízení pro KDI brakické vody s využitím nanostrukturovaných elektrod, pomocí kterého lze studovat děje přítomné při KDI a testovat vliv různých nanomateriálů a procesních nastavení na účinnost zařízení.

Undulační pohyb hydrogelových mikroplavců

Bára Pinčáková (B3)

Školitel: RNDr. Ivan Řehoř, Ph.D.

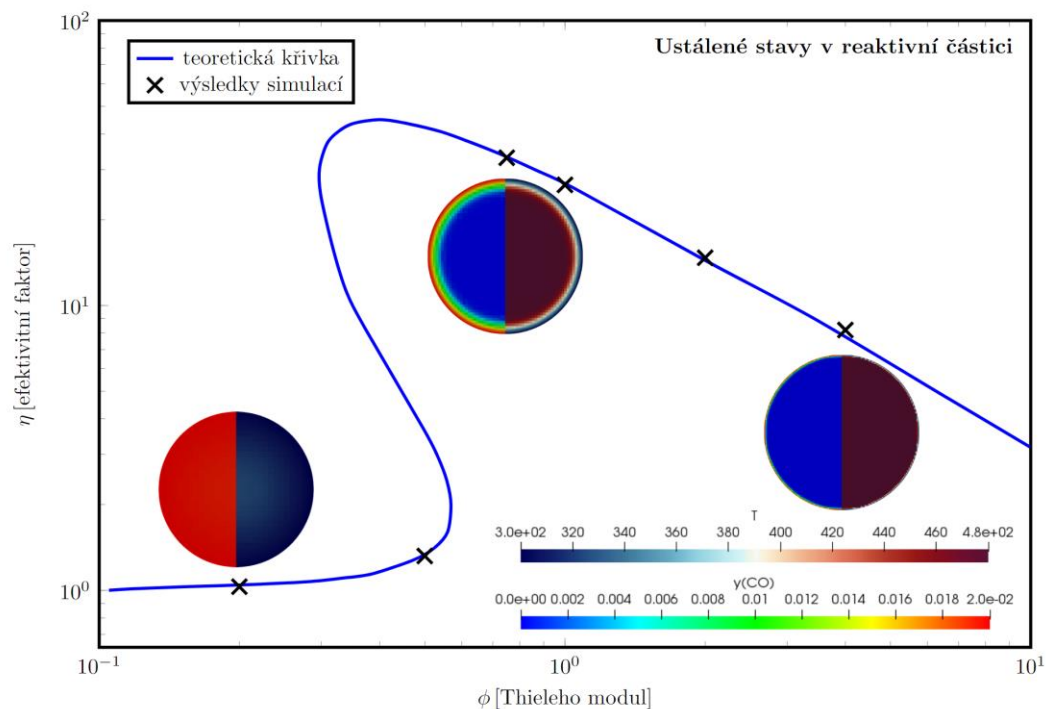
Cílem mojí práce je experimentální vytvoření hydrogelových mikroplavců, kteří by byli schopní se pohybovat ve vodném roztoku prostřednictvím undulačního pohybu. Schopnost vyrobit malé pohyblivé roboty, kterým dokážeme přiřadit různé funkce v mikrofluidních systémech by se jednou dala použít v bioinženýrství, mikrofluidice a mikrovýrobě. Obor mikrorobotiky dlouhodobě usiluje o napodobení mikroorganismů, které se mohou lehce pohybovat ve vodném prostředí a zároveň na něj reagovat, avšak robot složený z pevných součástí o velikosti mikrometrů není v takovém prostředí životaschopný. Zkoumaní mikroplavci jsou objekty o velikosti několik desítek mikronů, které vyrábíme pomocí tzv. stop-flow litografie (SFL). Část robota je tvořená z termoresponzivního hydrogelu obsahující nanočástice zlata, která se při fototermickém zahříváním laserem reverzibilně smršťuje. Každé smrštění způsobí pohyb dvou elastických ramen, které jsou na jedné straně spojené právě tímto hydrogelem. Podařilo se mi prokázat, že při vhodném složení, kompozici a délky pulzu laserem ramena vykonávají undulační pohyb, který je neregistrován a tudíž způsobuje dopředný pohyb mikroplavce. Experimenty probíhají zatím pouze na dně, ale bude následovat prověření pohybu mikroplavce, který se bude vznášet v roztoku.

Verifikace a aplikace dynamického řešiče pro neizotermní reaktivní proudění

Matyáš Khýr (B2)

Školitel: Ing. Martin Isoz, Ph.D.

Více než 80 % produktů světového chemického průmyslu je vyráběno za přispění heterogenně katalyzovaných reakcí. A ať už se jedná o oxichloraci ethylenu prováděnou v trubkovém reaktoru plněném Raschigovými kroužky nebo o konverzi znečišťujících plynů v katalytických filtrech výfukových systémů automobilů, je dostupnost přesných, verifikovaných a validovaných modelů heterogenně katalyzovaných reaktorů stěžejní pro návrh a optimalizaci těchto procesů. Cílem naší práce je připravit sérii modelových úloh k verifikaci klíčových komponent našeho dříve vyvinutého konečně-objemového řešiče pro přímou numerickou simulaci neizotermních dějů probíhajících v katalytických reaktorech. Konkrétně jsme se zaměřili na spojení vnitřního transportu hmoty a tepla uvnitř porézních médií s vnějším transportem v proudícím plynu a na představení modelové aplikace.



Vliv přítomnosti pevných částic v katalytickém filtru na oxidaci CO

Matěj Honzík (B2)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

S ohledem na stále přísnější normy na obsah škodlivin vypouštěných do ovzduší se výrobci automobilů v posledních letech snaží o minimalizaci zastoupení těchto látek ve výfukových plynech. Jako nejlepší způsob se ukazují katalytické filtry pevných částic, které regulují jak škodlivé plyny, tak částice vznikající při spalování paliva. Při používání filtrů dochází k zanášení sazemi. Parametr, charakterizující množství zachycených sazí, se nazývá filtrační účinnost. Další důležitým parametrem je katalytická aktivita, přičemž zachycené pevné částice znesnadňují plynné směsi přístup ke katalytické vrstvě. Tato práce se zaměřuje na katalytickou oxidaci CO v závislosti na zanesení filtru sazemi. Pozorovaná závislost konverze CO na teplotě a zanesení sazemi byla naměřena pro několik vzorků katalytických filtrů, lišících se mikrostrukturou naneseného katalyzátoru. Porovnání zápalných křivek CO na čistém a zaneseném filtru umožnilo vyhodnotit negativní efekt pevných částic na katalytickou aktivitu jednotlivých vzorků a vybrat nejvhodnější mikrostrukturu katalyzátoru.

Příprava a optimalizace CBD emulzí

Hynek Housar (B2)

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

Příprava a optimalizace CBD emulzí Kanabinoidy jsou skupinou přírodních látek, která je obsažena hlavně v konopí setém. Obecně bychom je mohli rozdělit na fytokanabinoidy (původem z rostlin), endokanabinoidy (přírozená součást nervového systému živočichů) a syntetické kanabinoidy. V současnosti se kanabinoidy začaly dostávat do čím dál většího povědomí společnosti, businessu a marketingu, a to i přes jejich ne zcela ověřené zdravotní účinky. Nejznámějšími zástupci jsou Δ^9 -tetrahydrokanabinol (THC) a canabidiol (CBD), kde CBD na rozdíl od THC psychoaktivní účinky nemá. Rostlinné kanabinoidy se v těle váží na přírodní receptory endokanabinoidního systému nervové soustavy, kde působí jako neurotransmitery. Působením na nervový systém se CBD přisuzují analgetické, protizánětlivé a antiepileptické účinky, které by v budoucnu mohly být využity pro léčbu např. revmatoidní artritidy. Způsoby aplikace CBD jsou omezené kvůli jeho vysoké lipofilitě a nízké biodostupnosti. Výhodou je jeho formulace ve formě vodné emulze, jejíž příprava a optimalizace byly cílem této práce. Podařilo se připravit emulzi o stejném složení a různou distribucí kapek změnou metody a procesních parametrů. Následně testována biodostupnost CBD in vivo.

Chemické inženýrství III

MÍSTO: BS9

KOMISE

doc. Ing. Zdeněk Grof, Ph.D. (předseda)

Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.

Ing. Patrik Bouřa

zástupce sponzora

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 [Adéla Eva Novotná](#) (B3, RNDr. Ivan Řehoř, Ph.D.)

Hydrogelové mikrorotory

08:50 [Adéla Kavalová](#) (B3, Ing. Martin Isoz, Ph.D.)

Vývoj CFD modelu rozpadu paprsku tekutiny pro aplikaci v proudových čerpadlech

09:10 [Šimon Hudínek](#) (B2, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Modelování zachytu sazí ve filtrech pevných částic

09:30 [Adriana Augustínová](#) (B3, doc. Ing. Jitka Čejková, Ph.D.)

Kontrola rastu zmesných chemobroinických štruktúr

09:50 [Karolína Slonková](#) (B3, Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.)

Vývoj depotní formulace schopné řízeného vylučování antibiotik ve fyziologických podmínkách

10:30 [Kryštof Dorňák](#) (B3, Ing. Edyta Paula Adrián, Ph.D.)

Příprava tepelně-responzivních strukturovaných povrchů

10:50 [Michail Zajcev](#) (B3, Ing. Petr Mazúr, Ph.D.)

Vliv teploty a stavu nabití na parametry ekvivaletního obvodu článku pro diagnostiku baterií Li-ion

11:10 [Marek Martinian Kolátor](#) (B3, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Změna mikrostruktury filtru pevných částic při opakované regeneraci

11:30 [Vojtěch Hampl](#) (B2, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

Využití nanokrystalů při formulaci účinných farmaceutických látek

vyhlášení výsledků

Hydrogelové mikrorotory

Adéla Eva Novotná (B3)

Školitel: RNDr. Ivan Řehoř, Ph.D.

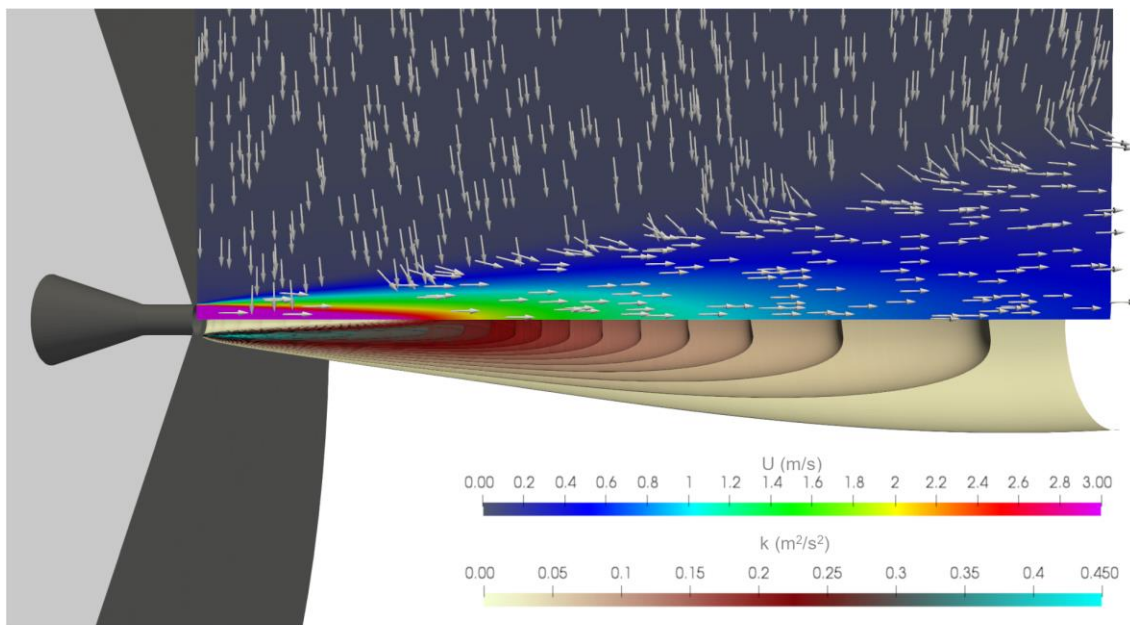
Předmětem mého projektu je experimentálně prozkoumat rotaci hydrogelových mikrorotorů okolo jejich vlastní osy a následně navrhnout mechanismus jejich rotace ve spolupráci s UTIA. Předmětné mikrorotory jsou objekty o velikosti desítek mikronů schopné rotovat při opakovaném smršťování a rozpínání. Sestávají se z termoresponzivního hydrogelu obsahujícího zlaté nanočástice, a jsou vyráběny pomocí tzv. stop flow litografie. Rotor má tvar kříže se zahnutými rameny, je tedy chirální ve 2D – pravo- či levotočivý. Při vystavení pulzu světla dochází k reverzibilnímu smrštění a rozepnutí a následkem tohoto dojde k pootočení rotoru okolo osy. Směr rotace není pevně dán chiralitou rotoru, ale je možno ho ovlivnit délkou pulzu osvitu laserem. Cílem práce je nejen určit geometrické (počet a zahnutí ramen) a experimentální (délka pulzu) parametry, ovlivňující rychlost a směr rotace, ale také zkusit alespoň kvalitativně popsat mechanicky princip rotace, který v tuto chvíli není zřejmý. Již dříve byl skupinou dr. Řehoře vyvinut obdobný mikrorobot, vykonávající translaci, tudíž rotace představuje fundamentálně komplementární mód pohybu. Takovéto mikrorotory by mohly sloužit jako čerpadla či ventily v mikrofluidních zařízeních, či by mohly být využity pro manipulaci a třídění buněk.

Vývoj CFD modelu rozpadu paprsku tekutiny pro aplikaci v proudových čerpadlech

Adéla Kavalová (B3)

Školitel: Ing. Martin Isoz, Ph.D.

K atomizaci neboli rozpad paprsku tekutiny dochází, když se vysokorychlostní tekutina po průchodu tryskou potká s tekutinou relativně nehybnou. Při rozpadu paprsku strmě roste kontaktní povrch mezi tekutinami, což má významný vliv na rychlost přestupu tepla a hmoty. Tohoto jevu se využívá například u spalovacích motorů, sprejových sušáren či bezpečnostních hasících zařízení. Přesný mechanismus atomizace však není zcela znám a jeho určení bylo a je předmětem mnoha studií. Z důvodu obtížně získatelných experimentálních dat je kladen důraz na doplnění informací pomocí numerických simulací. Cílem této práce je vytvořit simulaci paprsku tekutiny za účelem studia mechanismu jeho rozpadu v proudových čerpadlech. Konkrétně byl vyvinut numerický model jednofázového turbulentního proudění v osově-symetrické geometrii. Hlavní část práce byla zaměřena na určení citlivosti modelu na simulační parametry, například na jemnost sítě, okrajové podmínky, či výběr modelu turbulence. V navazující práci použijeme získané zkušenosti ke konstrukci složitějších modelů jako jsou modely s dvoufázovým prouděním, trojrozměrnou geometrií či LES přístupem k turbulenci.

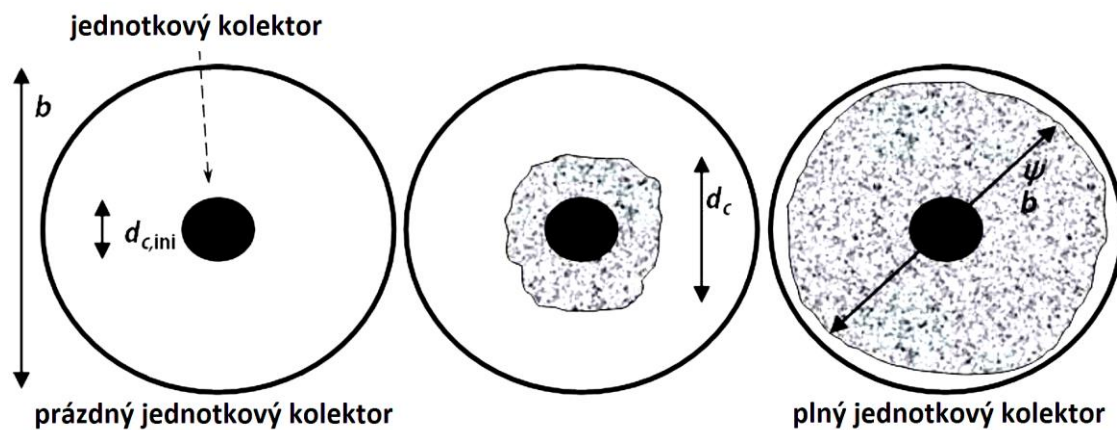


Modelování zachytu sazí ve filtrech pevných částic

Šimon Hudínek (B2)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Nežádoucím vedlejším produktem spalovacích motorů jsou mimo jiné mikroskopické částice sazí. K jejich odstranění slouží filtry pevných částic, které musejí být efektivní a zároveň bez výrazné tlakové ztráty. Využívá se polopropustných kanálků z porézního materiálu, které zajistí maximální filtrační účinnost za minimální tlakové ztráty. Emisní limity pro pevné částice se stále zpřísňují, a proto je nutné filtry průběžně zdokonalovat. Jako nástroj pro jejich optimalizaci se využívají počítačové simulace, díky kterým lze omezit nákladné experimenty. Tato práce se zaměřuje na simulace s pomocí 1D modelu filtru pevných částic, který na základě vstupních parametrů předpovídá tlakovou ztrátu a filtrační účinnost. Filtrace je vyhodnocena pomocí modelu jednotkových kolektorů, kdy je porézní stěna filtru popsána jako vrstva koulí o odpovídajícím průměru. V této práci ověřujeme přesnost těchto simulací srovnáním s výstupy z detailního 3D modelu, který využívá rekonstrukci skutečné morfologie porézní stěny filtru získanou z rentgenové tomografie.



Kontrola rastu zmesných chemobroinických štruktúr

Adriana Augustínová (B3)

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

Hoci chemické záhradky boli objavené už v sedemnástom storočí, tieto nerovnovážne fyzikálno-chemické systémy neboli vedcami podrobne opísané ani študované. Až v posledných desaťročiach sa toto štúdium samoorganizovaných štruktúr polopriepustných membrán pevných látok a kvapalín oživilo. Nadobudnuté poznatky umožnili proces rastu čiastočne kontrolovať. Vo svojej práci sa zameriam na opis vlastností (vzhľad, čas rastu, vnútorná štruktúra atď.) polykryštálov, kvapalných roztokov a guľôčok, ktoré budú použité ako zárodok, z 2. periódy a 4. skupiny periodickej tabuľky. Zatiaľ čo nedávny výskum sa zamerával na kontrolu samotného rastu štruktúr, málo prác zahŕňalo dôkladné štúdium ich morfológie, chemického zloženia a mikroštruktúry pre jednotlivé periódy a skupiny. Ak by sme dokázali presne určiť vlastnosti samotných semien a ich binárnych zlúčenín, mohli by sme s väčšou pravdepodobnosťou predpovedať a následne navrhnúť správanie zložitejších štruktúr. Získané poznatky sa dajú využiť v budúcej praxi pri 3D tlači a tvorbe komplexných materiálov.

Vývoj depotní formulace schopné řízeného vylučování antibiotik ve fyziologických podmínkách

Karolína Slonková (B3)

Školitel: Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.

Tato práce vychází z projektu zaměřeného na přípravu kompozitních mikročástic responzivních na magnetické pole, které byly schopné řízeně vylučovat léčivo na vnější podnět. Mikročástice byly složeny z jádra obsahujícího suspenzi antibiotika norfloxacinu a vosku, který je za laboratorní teploty tuhý ($T_t = 35\text{ °C}$). Obal byl tvořen alginátem, zesíťovaným vápenatými ionty, obsahujícím magnetické nanočástice železa ($SAR = 509,8\text{ W/g}$). Aktuální výzkum se zabývá vylepšením této depotní formulace pro využití ve fyziologickém prostředí. Vosk v jádře byl nahrazen voskem tuhým nejen při laboratorní, ale i při fyziologické teplotě ($T_t = 42\text{ °C}$). Byly zkoumány nejvhodnější podmínky pro mletí krystalů antibiotika a vytvoření suspenze antibiotikum-vosk. Problémem, kterým se tato práce dále zabývá, je nestabilita iontového zesíťování a možná ztráta gelových vlastností alginátu ve fyziologickém prostředí. Z tohoto důvodu byl syntetizován methakrylovaný alginát, který je možné kovalentně zesíťovat pomocí UV záření. Zvýšená odolnost kovalentně zesíťovaného alginátu byla pozorována již po vystavení UV záření pouze na 10 sekund. Hlavním cílem práce je potvrzení vylepšených vlastností kompozitních mikročástic, testování jejich antibakteriálních vlastností a odolnosti vůči fyziologickým podmínkám.

Příprava tepelně-responzivních strukturovaných povrchů

Kryštof Dornák (B3)

Školitel: Ing. Edyta Paula Adrián, Ph.D.

S expandující lidskou populací se krom jiného neustále zvyšuje poptávka po orgánech vhodných k transplantaci. Darovaných orgánů je však trvalý nedostatek a na mnohé pacienty se zkrátka nedostane. Tento zřejmý problém se snaží řešit tkáňové inženýrství, a to produkcí orgánů umělých. K úspěšnému výrobnímu procesu je ovšem potřeba nesčetného množství buněk, jejichž efektivní pěstování i následné sklizení představuje nelehký inženýrský problém. Je známo, že mikrostruktura povrchu, na kterém buňky rostou, výrazně ovlivňuje jejich proliferaci. Taktéž máme k dispozici polymery, které při změně teploty v intervalu slučujícím se se životaschopností buněk, tzn. blízko běžným teplotám lidského těla, podstatně mění svou afinitu k vodě, což vede k uvolnění buněk dříve pevně přisedlých. Cílem tohoto projektu je tedy kombinací fotolitografie a měkké litografie připravit takový strukturovaný povrch, na němž buňky porostou kýženým způsobem, a jehož termoresponzivní vlastnosti významně ulehčí jejich sklizení.

Vliv teploty a stavu nabití na parametry ekvivaletního obvodu článku pro diagnostiku baterií Li-ion

Michail Zajcev (B3)

Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

V celosvětovém měřítku je trend dekarbonizace ekonomiky, zřikávání se fosilních paliv a přechodu k čistším zdrojům energie. Tento trend lze pozorovat například v sektoru automobility, kde je znatelný přechod k vozům poháněných elektřinou. Ač jsou používané baterie na bázi lithia v pokročilém stádiu vývoje, stále jsou citlivé a jejich nesprávný provoz či charakterizace může vést k rychlejší degradaci, ekonomickým i enviromentálním ztrátám a v krajních případech i k tragickým haváriím. Pro pochopení chování baterií v různých podmínkách lze využít různé elektrochemické metody, jako je impedanční spektroskopie. Tato neinvazivní metoda, založená na perturbaci článku střídavým proudem či napětím různých frekvencí a pozorováním impedanční odezvy článku, může poskytnout cenné informace o vnitřních procesech v článku baterie. Různé elektrochemické či fyzikální procesy probíhají se specifickými časovými konstantami a jejich odezvy se tedy výrazně projevují pouze v určitém rozmezí frekvencí. V této práci bude studována závislost parametrů EIS spekter na provozních parametrech baterie (teplotě či stavu nabití) s cílem posoudit stabilitu těchto procesů za zvolených podmínek. Získané závislosti budou následně použity pro odhadování životnosti baterií při různých provozních podmínkách.

Změna mikrostruktury filtru pevných částic při opakované regeneraci

Marek Martinian Kolátor (B3)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Znečištění ovzduší je jedním z největších problémů dnešní společnosti. Dopravní sektor stále produkuje velké množství emisí. Moderní automobily redukuje vypouštěné množství škodlivých látek do ovzduší pomocí filtrů pevných částic s katalytickou vrstvou. Toto zařízení kombinuje schopnost katalyzátoru snížit plynné emise s funkcí filtru pevných částic. Optimální nanesení katalytické vrstvy do filtru je kritické pro správnou funkci. Musí co nejlépe zachovat nízké tlakové ztráty a současně vysokou filtrační účinnost a konverzi škodlivin během celého životního cyklu. Při jízdě je ovšem filtr pevných částic zanášen sazemí. Aby se předešlo ucpání, provádí se regenerace, jejímž cílem je spálit nahromaděné pevné částice při zvýšené teplotě. Vysoká teplota však může vyvolat změny v mikrostruktuře katalytické vrstvy a způsobit její deaktivaci. Vzorky katalytických filtrů s různou počáteční mikrostrukturou byly v laboratoři za kontrolovaných podmínek vystaveny zvýšené teplotě při regeneraci byl reprodukován a vliv na morfologii katalytické vrstvy byl vyhodnocen pomocí snímků z rastrovacího elektronového mikroskopu.

Využití nanokrystalů při formulaci účinných farmaceutických látek

Vojtěch Hampl (B2)

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

V současné době jsou vyvíjeny nové účinné farmaceutické látky, které jsou ve většině případů prakticky nerozpustné ve vodném prostředí. S touto vlastností jsou spojené další problémy, jako nízká biologická dostupnost, nutnost zvýšeného dávkování, potřeba velkého množství pomocných látek či vyšší ekonomická a technologická nákladnost. Možným řešením tohoto problému je formulace účinných látek ve formě nanokrystalů, které mají extrémně velký poměr povrch-objem, díky kterému je jejich rozpustnost mnohonásobně větší a je jí dosaženo rychleji. Tato práce se zabývá přípravou nanokrystalů, jejich úpravou a formulací do lékové formy. Cílem práce je dosáhnout univerzálního postupu pro formulaci špatně rozpustných látek. Jako testovací látka byl zvolen candesartan cilexetil, ze kterého jsou připravovány nanokrystaly metodou mokrého mletí se stabilizátory – surfaktanty, které zabraňují aglomeraci a Ostwaldovu zrání nanokrystalů. Vzniklá suspenze nanokrystalů se upravuje pomocí lyofilizace, přičemž se zkoumá vliv protektantů na vlastnosti vzniklých nanokrystalů či aglomerátů; nebo je přímo využita na formulaci pomocí vlhké granulace. Dále jsou tyto vzorky podrobeny disolučním testům a srovnáním s původní formulací používaného léčiva.

Chemické inženýrství IV

MÍSTO: B 06

KOMISE

RNDr. Ivan Řehoř, Ph.D. (předseda)

Ing. Vladislav Nevoral, Ph. D.

Ing. Ondřej Kašpar, Ph.D.

Ing. Adam Waněk

zástupce sponzora

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 [Tomáš Čurda](#) (B2, RNDr. Ivan Řehoř, Ph.D.)

Influencing the Temporal Dynamics of Actuation Cycles of Hydrogel Microrobots by Incorporating pores into the Hydrogel Structure

08:50 [Zuzana Coufalová](#) (B2, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Vliv zanášení na tlakovou ztrátu a filtrační účinnost katalytického filtru

09:10 [Dalimil Ott](#) (B3, Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.)

Modelování a optimalizace průmyslové výroby kyseliny poly(mléčné)

09:30 [Denisa Dendisová](#) (B3, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)

Upgrade polyolefin waste by fractionation recycling methods

09:50 [Rostislav Huňa](#) (B3, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.)

Optimalizace potahování částic ve fluidním loži a redukce elektrostatického náboje

10:30 [Ludmila Řiháková](#) (B3, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)

Solvent-based recycling of polyolefins: systematic study of polymer additives removal

10:50 [Adam Sedláčik](#) (B3, Ing. Petr Mazúr, Ph.D.)

Zinko-vzduchové prietokové batérie; úskalie depozície zinku

11:10 [Jakub Ježek](#) (B3, Ing. Jan Haidl, Ph.D.)

Experimentální validace simulace proudění v míchaném reaktoru

11:30 [Pavel Zeman](#) (B2, Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.)

Nanočástice pro rentgenovou fotodynamickou terapii

vyhlášení výsledků

Influencing the Temporal Dynamics of Actuation Cycles of Hydrogel Microrobots by Incorporating pores into the Hydrogel Structure

Tomáš Čurda (B2)

Školitel: RNDr. Ivan Řehoř, Ph.D.

The ability to manipulate objects on a micro-scale will find use in a wide variety of fields. However, scaling down the components, we use in macro robotics, into dimensions below 1 mm might be challenging if not impossible. Therefore, we seek inspiration from nature and try to mimic motion techniques different organisms have evolved. Most of the research in the microrobotic field focuses on the development of soft responsive materials which actuate due to an outside stimulus such as electromagnetic radiation, pH, or chemical reactions. Our hydrogel robots, composed of thermo-responsive polymer poly-(N-isopropylacrylamide) filled with gold nanoparticles and powered by green laser light, exploit friction hysteresis to crawl over surfaces. At this point, we are able to achieve controlled steering of individual “U”-shaped microcrawlers by irradiating just one of their two “legs”. The aim of my research is to fully understand the impact of the integration of pores into the PNIPAM structure on the gels collapsing and reswelling dynamics and thus accomplish controlled steering of multiple crawlers just by using pulses of a defocused laser beam of different lengths. My other aim is to use these porous structures to induce peristaltic motion in rectangular microcrawlers.

Vliv zanášení na tlakovou ztrátu a filtrační účinnost katalytického filtru

Zuzana Coufalová (B2)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Limity škodlivin v emisích produkovaných automobily se spalovacími motory se stále zpřísňují. Posuzovány jsou nejen hodnoty toxických složek, ale i oxidu uhličitého, kvůli jeho podílu na skleníkovém efektu. V současnosti jsou používány katalytické filtry pevných částic, které jsou schopny zachytit pevné částice o velikosti v řádu desítek nanometrů a zároveň odstranit toxické plynné emise. V této práci byly studovány dva základní parametry filtru: tlaková ztráta a filtrační účinnost. Byly zkoumány čtyři vzorky, které se lišily strukturou nanesené aktivní vrstvy. První vzorek byl bez katalytické vrstvy, druhý obsahoval katalyzátor pouze ve stěně filtru, třetí pouze na stěně a čtvrtý kombinaci katalyzátoru uvnitř a na stěně filtru. S rostoucím podílem částic na stěně se zvyšovala tlaková ztráta, ale zároveň i filtrační účinnost. Nejnížší tlakovou ztrátu lze pozorovat na prázdném vzorku bez aktivní vrstvy, který má však nejhorší filtrační účinnost. Kombinované rozmístění katalytické vrstvy umožnilo dosáhnout vysoké filtrační účinnosti při zachování poměrně nízké tlakové ztráty.

Modelování a optimalizace průmyslové výroby kyseliny poly(mléčné)

Dalimil Ott (B3)

Školitel: Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.

Kvůli jejich environmentální perzistenci a problematické recyklovatelnosti se pro tradiční plasty (polyolefiny, polystyren aj.) v posledních letech intenzivně hledají kompostovatelné alternativy. Jednou z nejslibnějších je poly(mléčná) kyselina, PLA. Jedná se o polyester, termoplast, vyráběný z biomasy, např. škrobu. Tento je enzymatickou glykolýzou štěpen v jednotky glukózy, z nichž je mléčnou fermentací získávána kyselina mléčná, ta je následnou předpolymerací, resp. kondenzací, přeměněna v její cyklický dimer laktid, který je nakonec pomocí tzv. polymerace za otevření kruhu (ROP, ring-opening polymerization) přeměněn v polymer PLA. Jedním z důvodů, proč se PLA zatím průmyslově neprodukuje v tak velkém měřítku, jsou její nedostatečné aplikační vlastnosti. Tato práce pojednává o optimalizaci průmyslové výroby PLA procesem ROP s využitím matematického modelování. Navazuje na již vzniklý výpočetní model, který dále rozvíjí pro praktičtější účely jeho vlastní aplikace zahrnutím globálně-optimalizačního algoritmu, jenž umožňuje nalézt vhodné podmínky a recepturu polymerace tak, aby bylo na konci reakce dosaženo maximální konverze monomeru a zároveň předem zadaných kýžených molekulárních vlastností polymeru (střední molekulová hmotnost a polydisperzita).

Upgrade polyolefin waste by fractionation recycling methods

Denisa Dendisová (B3)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Commonly used polyolefins such as polyethylene and polypropylene are not used in their pure form, they contain different dyes, pigments, stabilizers, antioxidants, flame-retardants, etc. to enhance their properties. However, these trace ingredients impair the process of polymer recycling. According to a 2021 survey European countries recycle only around 30% of plastic waste. Our aim is to develop a simple recycling process and help solving the global problem of plastic pollution. We are thus developing a method based on fractionation, i.e. separation of polymer into different chain-length fractions using suitable solvents. The experiments were carried out using our in-house-built apparatus under different conditions (e.g., temperature, pressure, solvent) in order to optimize the process parameters and maximize the yield of obtained pure polymer. The chain-length distribution of the original and processed polyolefin samples is evaluated through gel permeation chromatography (GPC). Differential scanning calorimetry (DSC) was also used to obtain polymer melting points and enthalpy. In the subsequent work we will focus on investigating mechanical properties of the resultant purified polyolefins.

Optimalizace potahování částic ve fluidním loži a redukce elektrostatického náboje

Rostislav Huňa (B3)

Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Úloha potahování částic pomocí fluidního lože významně roste pro účely personalizované medicíny a řízeného uvolňování léčiv ve farmaceutickém průmyslu, avšak tento citlivý proces je výrazně limitován tvorbou statické elektřiny. Elektrostatický náboj má vliv na aglomeraci dvou a více částic a znemožňuje kvalitní procesy potahování jednotlivých částic i sušení produktu. Tato práce se zabývá metodou redukce statické elektřiny během fluidace spočívající v přidání elektrolytu do nástřikového vodného roztoku polymeru. Částice potažené vodivými ionty se rychleji vybíjejí, čímž je zajištěna vysoká homogenita fluidace, nevytvářejí se hluchá místa a celý proces je tím stabilnější. Pro účely této práce byly použity částice mikrokrytalické celulózy, které byly nástřikovány roztokem vzniklým z 5% w/w vodného roztoku polymeru HPMC E5 (hydroxypropylmethylcelulózy), do kterého byl následně přidán chlorid sodný (2, 3 a 4 % w/w). Metoda byla verifikována přípravou a následným srovnáním změřeného měrného náboje připravených formulací potažených různě koncentrovanými roztoky elektrolytu. Metoda zároveň umožnila potažení částic o původní velikosti pouze 100 μm , což doposud nebylo vzhledem k velkému poměru povrch/hmotnost, způsobujícího značné nabíjení, možné.

Solvent-based recycling of polyolefins: systematic study of polymer additives removal

Ludmila Řiháková (B3)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

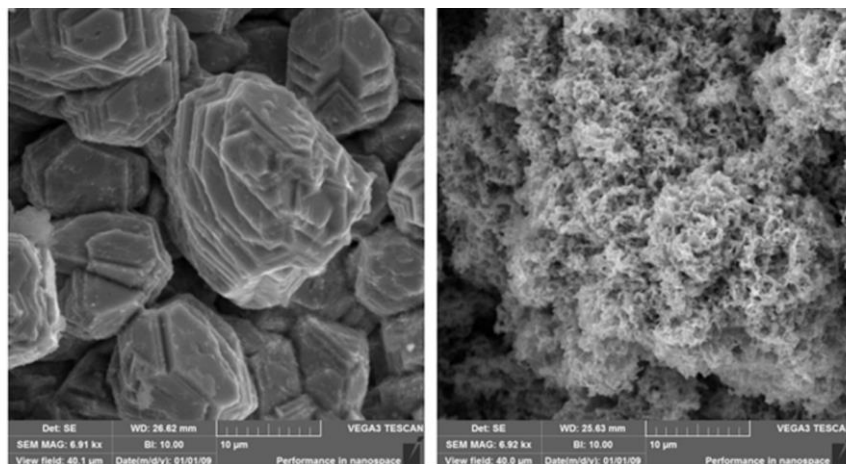
Polyolefins play an essential role in everyday life, with the production being enormous and rising every year. Up to now, no efficient way has been found to recycle polyolefins into original polymers. This work is focused on depriving polyolefins of their additives by their dissolution in organic solvents. The used solvents should be readily available and naturally harmless, e.g., limonene and cumene. However, our preliminary study also used cyclohexane and xylene. Glycerin and ethylene glycol are used as extraction agents. We carry out a systematic study by dissolving polyolefins under various conditions, e.g., the additional pressure of a gas, temperature, type, and composition of the solvent, in order to find out the best way to refine the polyolefin sample and thus obtain a close-to nascent polymer. To verify how well we removed all additives, we used confocal Raman spectroscopy. Applying this method requires the polymer samples with defined additives content to create a calibration set. Then we can analyze Raman spectra intensity for each experimental condition. The experimental results will be used to develop an ecological and functional way of recycling polyolefins.

Zinko-vzduchové prietokové batérie; úskalie depozície zinku

Adam Sedlačík (B3)

Školiteľ: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Pomaly ale isto ľudstvo dospieva do obdobia, keď potrebuje hľadať ekologické a lacné riešenia problémov pre čoraz viac technológií. Pre batérie sa ako jedno zo sľubných riešení ponúkajú zinko-vzduchové prietokové batérie (ZVPB). Ukladanie energie v týchto batériách je uskutočnené elektrolytickým vylučovaním zinku zo zinočnatých iónov rozpustených v alkalickom roztoku KOH. Jedným z hlavných problémov, ktoré ovplyvňujú životnosť ZVPB, je nehomogénna depozícia zinku pri nabíjaní batérie. V predchádzajúcom výskume bolo zistené, že sa Zn v alkalickom prostredí deponuje v 3 rôznych morfológiách, pričom najvhodnejšou morfológiou pre účely ZVPB je kryštalická štruktúra, kvôli nízkej pórovitosti a dobrej priľnavosti k substrátu. Cieľom mojej práce je stanoviť rozmedzie prúdových hustôt pre kryštalickú štruktúru na rozličných substrátoch. Depozícia zinku z prúdiaceho alkalického elektrolytu prebiehala v galvanostatickom režime a nadeponované vrstvy boli následne analyzované pod SEM na základe metodiky vyvinutej v našom laboratóriu. Týmto spôsobom bola vykonaná séria experimentov pri zvýšenej teplote 40 °C na rôznych depozitných substrátoch (niklu, medi a dvoch upravených uhlíko-polymérnych kompozitoch). Porovnaním získaných výsledkov určíme, ktorý substrát je najvhodnejší na deponovanie.



Porovnanie kryštalickej štruktúry (vľavo) a mechovej štruktúry (vpravo) pomocou SEM.

Experimentální validace simulace proudění v míchaném reaktoru

Jakub Ježek (B3)

Školitel: Ing. Jan Haidl, Ph.D.

Průmyslové návrhy míchaných nádob se stále častěji opírají o numerické simulace proudění. Ty umožňují optimalizovat návrh zařízení, vizualizovat tokové veličiny, identifikovat problematické oblasti nádoby a otestovat možnosti jejich odstranění. Pro standardní míchané nádoby je tento přístup dostatečně experimentálně ověřen a je tak považován za spolehlivý. Pro nestandardní konfigurace je však stále nutné výsledky simulací experimentálně validovat. Práce navazuje na předchozí výzkum zaměřený na experimentální a numerické studium míchání v atypickém bioreaktoru s magneticky unášeným míchadlem. Režim proudění v reaktoru zasahuje jak do laminární, tak i turbulentní oblasti, v důsledku čehož dochází ke značným rozdílům mezi výsledky experimentů a simulací. Nastavení simulací je tedy třeba kalibrovat proti detailním experimentálním datům. Tato data budou získána kombinací tří technik charakterizace proudění, konkrétně kolorimetrií, konduktometrií a particle tracking velocimetry (PTV). Práce prezentuje srovnání doby homogenizace stanovené sledováním průběhu rozmíchání stopovací látky technikami kolorimetrie a konduktometrie. Na datech je ukázáno, že tyto standardní techniky měření v atypické konfiguraci poskytují výrazně odlišné výsledky v důsledku tvorby stabilního středového víru.

Nanočástice pro rentgenovou fotodynamickou terapii

Pavel Zeman (B2)

Školitel: Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.

Nanoparticles for x-ray induced photodynamic therapy X-ray photodynamic therapy uses radiosensitizers (RSs) for production of reactive oxygen species. Water insoluble RSs must be effectively transported to treated areas. This research focuses on preparation of phospholipid-stabilized RS (RSs synthesized in Academy of Sciences of the Czech Republic) nanoparticles (NPs). These NPs showed outstanding results and properties (phototoxicity, stability) which were never reached during previous research. NPs were prepared by antisolvent precipitation method. Sonication bath and sonic needle were used in the process. Mean particle sizes of 500 nm were reached, however this preparation procedure leads to high polydispersity. Phototoxicity of NPs' was tested on HeLa cells. Comparison of NPs' toxicity while in dark with while being irradiated with wavelengths of 300-500 nm showed that NPs are harmless while remaining effective if being irradiated.

Chemické inženýrství V

MÍSTO: B028

KOMISE

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

Ing. Mária Zedníková, Ph.D.

Ing. Jakub Klimošek

Ing. Dan Trunov

zástupce sponzora

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 [Bc. Martin Roudný](#) (M1, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.)

Příprava kompozitních částic nanokrystalů a liposomů

08:50 [Bc. Vladislav Shirokov](#) (M1, doc. Dr. Ing. Pavlína Basařová)

Studium faktorů ovlivňujících chování bublin v probublávané koloně

09:10 [Bc. Jan Moravčík](#) (M1, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.)

Vliv fyzikálních a procesních parametrů na průběh potahování částic ve fluidním loži

09:30 [Bc. Jan Ižovský](#) (M1, prof. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.)

Příprava a charakterizace koamorfnních forem léčiva

09:50 [Bc. Kryštof Majer](#) (M1, doc. Dr. Ing. Milan Jahoda)

Inženýrská aplikace pro stanovení reakční kinetiky tepelného rozkladu pevných materiálů

10:30 [Bc. Anna Kovárnová](#) (M1, Ing. Martin Isoz, Ph.D.)

Redukce řádu modelu v konvekcí řízených systémech

10:50 [Bc. Jan Svoboda](#) (M2, Ing. Petr Mazúr, Ph.D.)

Transport složek elektrolytů přes iontovýměnnou membránu organické redoxní průtočné baterie

11:10 [Bc. Tereza Hamsová](#) (M2, Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.)

Matematické modelování pro zefektivnění návrhu protierozních opatření

11:30 [Bc. Ondřej Šimůnek](#) (M2, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Dvojitá katalytická vrstva pro zlepšení účinnosti filtru pevných částic

11:50 [Bc. Anna Hoigrová](#) (M2, Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.)

Stanovení axiální disperze na vysokokapacitní strukturované výplni MellaPak252Y

vyhlášení výsledků

Příprava kompozitních částic nanokrystalů a liposomů

Bc. Martin Roudný (M1)

Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Účinnost podaného léčiva se odvíjí od jeho biodostupnosti, tedy množství, které je schopno přejít do krevního oběhu a zde dále působit. Ta je ovlivněna mnoha faktory, počínaje cestou podání léku a jeho formulací, přes aktuální stav pacienta až po fyzikálně-chemické vlastnosti samotné účinné látky jako její permeabilita a rozpustnost. Převážná většina účinných látek je ve vodě špatně rozpustná, a proto je vyvíjena značná snaha rozpustnost těchto léčiv zvýšit. Toho může být dosaženo formulací účinných látek do nanokrystalů, přičemž je zvýšením poměru povrch-objem a snížením ekvivalentního poloměru částice dosaženo zvýšení rozpustnosti. Současně lze nanokrystaly použít v kombinaci s liposomy, které pomocí svojí fosfolipidové dvouvrstvy poskytují zapouzdřeným nanokrystalům tzv. „gate-keeping“ efekt, a tak zpomalují uvolňování zapouzdřeného léčiva. Tématem této práce byla příprava kompozitních částic liposomů a nanokrystalů pro léčiva ivacaftor, tadafil a irinotecan. Nejprve byly z vybraných fosfolipidů připraveny liposomy a jednotlivé účinné látky namlety na nanokrystaly technikou mokrého mletí. Jejich následnou koextruzí došlo k zapouzdření nejmenších krystalků a porovnáním disoluce odlišně formulovaných účinných látek byly zjištěny makroskopické vlastnosti tohoto systému.

Studium faktorů ovlivňujících chování bublin v probublávané koloně

Bc. Vladislav Shirokov (M1)

Školitel: doc. Dr. Ing. Pavlína Basařová

Vícefázové systémy jako jsou probublávané kolony nebo fermentory mají v chemickém průmyslu hodně aplikací. Při aeraci v nich dochází k transportu hmoty přes fázové rozhraní, což je povrch bublin. Znalost chování bublin je proto velice důležitá pro dosažení co nejvyšší efektivity a modelování hydrodynamiky těchto procesů. Vlastnosti bublin jsou dány fyzikálními vlastnostmi vsádky, charakterem použitého zařízení a průtokem plynu. Experimenty se nejčastěji provádějí na menších kolonách, kde se chování bublin sleduje videokamerou. Cílem této práce bylo studium vlivu viskozity a rychlosti vstupujícího plynu na vlastnosti bublin ve vodných roztocích glycerolu. Experimentálně se ukázalo, že rychlost plynu v distributoru plynu (zde otvor ve dnu kolony) výrazně ovlivňovala velikost, tvar a rychlost bublin. Naopak malý nárůst viskozity v jednotkách procent se na vlastnostech bublin téměř neprojevil. Získaná data byla porovnána s údaji na velké koloně a s teoretickými modely.

Vliv fyzikálních a procesních parametrů na průběh potahování částic ve fluidním loži

Bc. Jan Moravčík (M1)

Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Řízené uvolňování léčiv patří k velkým výzvám současného farmaceutického průmyslu. K řízenému uvolňování mohou být například použity potahované vícevrstvé částice vyrobené ve fluidním loži vybaveném Wursterem. Podle nastavení horního nebo spodního nástřiku probíhá proces sušení, aglomerace nebo potahování částic. Proces potahování probíhá ve velmi úzkém intervalu provozních podmínek (mezi aglomerací a sušením), který je velmi citlivý a vzájemná závislost parametrů způsobí, že i malá změna může celý proces narušit. Pro aglomeraci je typické využití horní trysky, ale dochází k ní i při použití spodní trysky, přičemž proces ovlivňují: rychlost rozstřiku roztoku, teplota a rychlost proudění vzduchu, viskozita a pojivové vlastnosti roztoku. Navzdory mnoha studiím není možné přesně určit mezní procesní podmínky mezi potahováním a aglomerací částic. Pro přesnější určení závislosti je třeba rozšířený sběr procesních dat a parametrů roztoků a materiálů. Cílem této práce je proměřit jednotlivé závislosti, a také hraniční podmínky mezi potahováním a aglomerací. Na závěr budou vyrobeny ukázkové částice a provedeny testy jejich rozpustnosti.

Příprava a charakterizace koamorfních forem léčiva

Bc. Jan Ižovský (M1)

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

Koamorfní lékové pevné formy jsou tvořené kombinací dvou (či více) složek, z nichž jedna je účinná látka a druhá je koformer, které po úpravě tvoří homogenní amorfní systém. Tvorba koamorfních forem léčiva se ve farmaceutickém průmyslu stala velmi populární, kvůli své schopnosti zvyšovat rozpustnost a stabilitu výsledných forem. Tato práce je zaměřena na přípravu koamorfních forem léčiva a jejich následnou analýzu stanovující jejich rozpustnost ve vodném prostředí a kompozici. Přípravu koamorfní formy léčiva lze provést více způsoby, z nichž byla zvolena metoda přípravy pomocí šokového chlazení (quench cooling). Bylo připraveno několik koamorfních pevných forem, které byly následně charakterizovány pomocí několika metod jako je XRD, DSC a FTIR. Rozpustnost byla měřena pomocí kapalinové chromatografie (UPLC) a permeabilita za pomoci difúzní cely (UV/VIS). Získané výsledky poukazují na komplexní vliv procesních parametrů na rozpustnost, permeabilitu a kompozici.

Inženýrská aplikace pro stanovení reakční kinetiky tepelného rozkladu pevných materiálů

Bc. Kryštof Majer (M1)

Školitel: doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

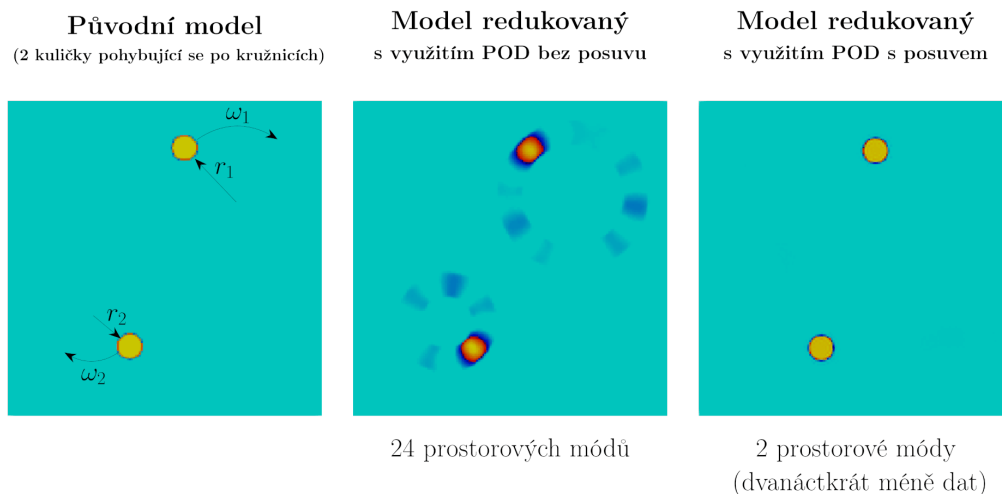
Matematický model šíření předpovídá průběh požáru, čímž umožňuje navrhovat bezpečnostní opatření v situacích, kdy není možné provedení požární zkoušky, případně snížit počet těchto finančně nákladných zkoušek. Model šíření požáru vyžaduje zadání značného množství vstupních parametrů. Tyto parametry, jako jsou fyzikální a tepelné vlastnosti hořících materiálů, ale i kinetika jejich hoření, by měly vycházet z co nejpresnějších vstupních dat. Právě popis kinetiky rozkladu hořících materiálů je velmi obtížný, ovšem naprosto zásadní pro přesný model hoření. Při rozkladu velké části pevných materiálů dochází k příliš vysokému počtu navzájem se ovlivňujících reakcí, jejichž popis je potřeba zjednodušit pro využití v matematických modelech. K tomuto účelu se nejčastěji celý rozklad popíše pouze jednou fiktivní reakcí pro každou významnou složku ve zkoumaném materiálu. V rámci této práce je představena vytvořená počítačová aplikace, umožňující rychlé vyhodnocení zjednodušených reakčních schémat tepelného rozkladu, a dále popis jednotlivých reakcí pomocí konstant Arrheniovy rovnice. Jako vstupní data aplikace využívá experimentálně naměřená data z termogravimetrické analýzy. Aplikace byla vytvořena v programovacím jazyce Python a disponuje grafickým rozhraním pro usnadnění použití.

Redukce řádu modelu v konvekci řízených systémech

Bc. Anna Kovárnová (M1)

Školitel: Ing. Martin Isoz, Ph.D.

V průmyslu i inženýrské praxi jsou značně rozšířené systémy řízené konvekci, v provozech typu usazování či fluidace pak systémy typu tekutina-částice. Simulace těchto systémů ale kladou vysoké nároky na potřebný výpočetní čas, což komplikuje jejich využití při optimalizaci či řízení procesů. Jedním z nástrojů umožňujících snížit výpočetní náročnost opakovaného vyhodnocování modelů se změnou parametrů jsou techniky redukce řádu modelu. Klasické metody redukce typu vlastní ortogonální rozvoj (POD) kombinovaný s Galerkinovou projekcí (GP) ale pro systémy s konvekci nelze efektivně využít, neboť se tyto systémy nedají aproximovat superpozicí několika málo v čase neměnných prostorových módů. Systémy tekutina-částice zase většinou nelze popsat jednou soustavou parciálních diferenciálních rovnic, což znemožňuje použití GP. V této práci sledujeme dva cíle, (i) zavést časově závislý transportní operátor, po jehož aplikaci konvekci řízený systém přechází do stojatého stavu a POD tak lze užít daleko efektivněji, a (ii) nahradit GP umělou neuronovou sítí, která dává jako výstup redukovaný model spojitý v čase. Vyvíjená metoda je ilustrována na příkladech z výpočetní dynamiky tekutin, se zaměřením na systémy tekutina-částice s rotací, kde byl v poslední době proveden největší posun.



Transport složek elektrolytů přes iontovýměnnou membránu organické redoxní průtočné baterie

Bc. Jan Svoboda (M2)

Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Probíhající dekarbonizace energetického a dopravního sektoru přináší naléhavou potřebu levných a bezpečných stacionárních úložišť energie s dlouhou životností. Průtočné baterie na bázi organických redoxních látek se jeví jako slibná alternativa ke stávajícímu řešení využívajícímu soli vanadu. Využití organických látek rozpustných ve vodě nabízí řadu technicko-ekonomických výhod oproti vanadovým elektrolytům, jako jsou vyšší dostupnost výchozích surovin, nižší toxicita a možnost ladění elektrochemických a dalších fyzikálně-chemických vlastností pomocí strukturních modifikací. Většímu zapojení těchto technologií však stále brání zejména omezená stabilita těchto baterií. Kromě degradace aktivních látek elektrolytů je pokles kapacity baterie do velké míry způsoben rovněž vzájemnou permeací složek elektrolytů přes iontovýměnnou membránu oddělující anolyt a katolyt a další parazitické děje. V tomto příspěvku jsou shrnuty dosavadní výsledky experimentálního studia vlivu vlastností iontovýměnné membrány, složení elektrolytů a provozních podmínek baterie na její výkon a pokles kapacity získané v naší laboratoři pomocí rozšířené aparatury umožňující on-line monitoring klíčových parametrů.

Matematické modelování pro zefektivnění návrhu protierozních opatření

Bc. Tereza Hamsová (M2)

Školitel: Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.

Vodní eroze půdy je proces, při kterém dochází k narušování půdního povrchu působením vody, které vede k transportu půdních částic na jiné místo a k jejich následnému usazování. Následkem toho je zemědělská půda ochuzena o její nejurodnější část, dochází ke snížení propustnosti půdy pro vodu nebo zhoršení chemických vlastností půdy, což vede k potřebě vyššího hnojení. Aby se předešlo těmto problémům, je potřeba zavádět protierozní opatření. K návrhu těchto opatření lze použít odtokový model SMODERP (Simulační Model povrchového ODtoku a Erozního Procesu) vyvinutý našimi kolegy na Fakultě stavební ČVUT, kde základní odvození povrchových procesů vychází z rovnice kontinuity a pohybové rovnice. Výpočet je řešen metodou konečných diferencí na pravidelné, prostorově dvourozměrné rastrové síti popisující krajinný reliéf. V bilanci každého prostorového elementu jsou přítomny tři základní příspěvky – infiltrace vody do půdy, efektivní srážka a přitekklé/odteklé množství vody. V současné podobě je model založen na explicitní metodě integrace, což způsobuje časovou náročnost při výpočtu větší oblasti. Konečným cílem této práce je transformace stávajícího modelu do implicitní podoby a testování případného urychlení výpočtu.

Dvojitá katalytická vrstva pro zlepšení účinnosti filtru pevných částic

Bc. Ondřej Šimůnek (M2)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Během nedokonalého spalování vznikají v automobilových motorech nežádoucí plynné emise a pevné částice. Pro odstranění těchto emisí se využívají filtry pevných částic a katalyzátory. Efektivní řešení nám nabízí kombinace těchto dvou zařízení, tzv. katalytický filtr pevných částic. Do samotného filtru je nanесena vysoce porézní katalytická vrstva γ -aluminy s naimpregnovanými nanočásticemi katalyticky aktivní platiny nebo paládia. Při správném fungování katalytického filtru je dosaženo vysoké filtrační účinnosti a konverze škodlivin, přičemž je zachována nízká tlaková ztráta. Vlastnosti filtru však velmi závisí na rozmístění a mikrostruktuře nanесené katalytické vrstvy. Cílem této práce je vytvoření velmi tenké porézní vrstvy na stěně kanálku a zároveň nanесení katalytické vrstvy i do velkých pórů uvnitř stěn filtru, aniž by došlo k jejich ucpání. U nanášených suspenzí katalyzátoru byly měněny parametry jako pH (ovlivňující viskozitu), velikost částic a jejich hmotnostní zlomek v suspenzi. Byla vyvinuta nová metodika dvojitého nanášení umožňující vytvořit požadovanou mikrostrukturu, která dosahuje podstatně vyšší filtrační účinnosti za cenu jen velmi malého nárůstu tlakové ztráty.

Stanovení axiální disperze na vysokokapacitní strukturované výplni MellaPak252Y

Bc. Anna Hojgrová (M2)

Školitel: Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.

Jeden ze základních zjednodušujících předpokladů chemického inženýra představuje model pístového toku. V inženýrské praxi bohužel často tento předpoklad nelze použít z důvodu nezanedbatelného podélného promíchávání. Při navrhování plněných kolon pro ostré separace by zanedbání podélného promíchávání mohlo vést ke špatnému výpočtu počtu rovnovážných pater nebo k nepřenositelnosti transportních charakteristik na jiné systémy. Nejčastější způsob popisu podélného promíchávání je model pístového toku s axiální disperzí. Tato práce se věnuje stanovení míry axiální disperze na vysokokapacitní strukturované výplni Mellapak 252Y. Pro stanovení míry axiální disperze ve formě Bodensteinova kritéria se využívá měření odezvy na skokovou změnu vstupní koncentrace stopovací látky. Naměřená data se následně vyhodnocují relativně složitým postupem tak, aby se očistila od okrajových efektů. Obsahem tohoto příspěvku je vytvoření vyhodnocovacího programu v MATLABu, který bude v navazující práci použit pro vyhodnocení Bodensteinova kritéria a střední doby prodlení (zádrž kapalně fáze) pro výplň Mellapak 252Y.

Chemické inženýrství VI

MÍSTO: B139

KOMISE

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

Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.

Ing. Stanislav Chvíla

Ing. Aleš Palkovič

zástupce sponzora

PROGRAM

08:30 **zahájení**

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

Analýza provozních podmínek rektifikační kolony

08:50 [Bc. Artur Sergunin](#) (M1, doc. Dr. Ing. Pavlína Basařová)

Přítomnost jednoduchých alkoholů omezuje působení fluorosurfaktantů ve vodných roztocích

09:10 [Bc. Nina Nováková](#) (M1, doc. Ing. Jitka Čejková, Ph.D.)

Tvorba vezikulárních struktur v systému dekanol-dekanoát sodný v přítomnosti solí

09:30 [Bc. Eliška Pazderková](#) (M2, RNDr. Ivan Řehoř, Ph.D.)

Porovnání interakcí hyaluronanu a jeho derivátů s hovězím a lidským sérovým albuminem

09:50 [Bc. Adam Siuda](#) (M1, Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.)

Experimentální stanovení objemového koeficientu přestupu hmoty v plynné fázi na vysokokapacitní výplni MP252Y

10:30 [Bc. Maximilián Prachár](#) (M1, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.)

Optimalizácia výroby lipidickej liekovej formy

10:50 [Bc. Albert Behner](#) (M1, prof. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.)

Preparation of the nitrogen-doped carbon using microwave heating

11:10 [Bc. Filip Keller](#) (M2, Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.)

Predikce mechanických vlastností biopolymerů na bázi kyseliny hyaluronové

11:30 [Bc. Lukáš Kamenský](#) (M2, Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.)

Riadené uvoľňovanie liečiv z magnetolipozómov

11:50 [Bc. Adam Bouz](#) (M2, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)

Application of the PC-SAFT equation of state on a polymer system with multiple condensed phases

12:10 [Bc. Miroslav Večeřa](#) (M2, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.)

Potahování částic pomocí fluidního lože pro řízené uvolňování léčiv

vyhlášení výsledků

Analýza provozních podmínek rektifikační kolony

Bc. Martin Bár (M1)

Školitel: prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha

Firma SPOLANA s.r.o provádí mimo jiné výrobu PVC (polyvinylchlorid). Součástí výrobního procesu je krakování, kdy dochází ke štěpení EDC (ethyldichlorid) na VCM (vinylchlorid monomer) a HCl. Vzniklé VCM a zbytky EDC se následně od HCl odstraňují pomocí rektifikace. HCl tvoří s vodou velmi agresivní prostředí, které může svými korozními účinky poškozovat samotnou kolonu a v historii si masivní koroze vynutila i odstávku a výměnu části kolony. Koroze kolony je studována ve spolupráci s VŠCHT a během dvou období 2020–2021 a 2021–2022 byly do kolony instalovány sady korozních kuponů. Korozní kupony představují kovová tělíska umístěná na určitém patře vevnitř kolony, na kterých se za dané období posuzuje míra vlivu koroze na různé materiály v závislosti na typu materiálu a potažení povrchu polymerní vrstvou. Analýza sad kuponů v obou obdobích odhalila, že v období 2021–2022 byl korozní vliv v koloně významně vyšší než v období předchozím. Cíl této práce bylo porovnat provozní podmínky dané rektifikační kolony v obou obdobích, najít významné rozdíly a následně provést simulaci kolony za těchto rozdílných podmínek pro zjištění, zdali tyto změny mohly mít vliv na větší překryv koncentračních profilů HCl a vody a tím pádem mohly způsobit vytvoření korozně agresivnějšího prostředí.

Přítomnost jednoduchých alkoholů omezuje působení fluorosurfaktantů ve vodných roztocích

Bc. Artur Sergunin (M1)

Školitel: doc. Dr. Ing. Pavlína Basařová

Vodné roztoky jednoduchých alkoholů (tj. methanolu, ethanolu a propanolu) vykazují řadu anomálních fyzikálních vlastností (např. viskozita, povrchové napětí). Zatímco při velmi nízké koncentraci se alkoholy chovají převážně jako povrchově aktivní látky, tak při vyšších koncentracích vytvářejí organizované mikrostruktury (tzv. klastry), jejichž vznik může náhle změnit vlastnosti celého roztoku. Významná je také přítomnost alkoholů v aerovaných reaktorech, kde mohou ovlivnit chování bublin, a tudíž i např. transport kyslíku. V roztocích jsou dále mnohdy přítomny surfaktanty, které mají také podstatný vliv na chování bublin díky své adsorpci na rozhraní kapalina-plyn. Nicméně dříve bylo ukázáno, že schopnost adsorpce běžných surfaktantů na povrchová rozhraní je při vyšších koncentracích alkoholů minimální, a tedy chování bublin je ovlivňováno především přítomností alkoholu. Cílem této práce bylo prozkoumat, jak budou alkoholy působit v roztocích obsahujících velmi silně povrchově aktivní fluorosurfaktanty, které by se měly lépe adsorbovat na fázovém rozhraní. Bylo měřeno povrchové napětí při různých koncentracích alkoholu i fluorosurfaktantu v systémech voda-propanol-kyselina perfluorooktanová a rovněž byl studován vliv různých koncentrací propanolu na stoupavou rychlost bubliny.

Tvorba vezikulárních struktur v systému dekanol-dekanoát sodný v přítomnosti solí

Bc. Nina Nováková (M1)

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

Systém dekanol-dekanoát sodný byl zkoumán v Laboratoři chemické robotiky v přítomnosti solí vyvolávajících různé jevy, mezi které můžeme řadit růst myelinových figur při morfologických změnách kapky dekanolu. Myelinové figury jsou vysoce viskózní válcovité struktury, které vyrůstají na nestabilním dynamickém rozhraní. Příčina jejich růstu nebyla dodnes zcela objasněna. Mezi hlavní vysvětlení jejich růstu patří řízená difúze povrchově aktivních látek v roztoku vyvolávající osmotický stres, hydratační gradient na planárních dvojvrstvách či například elastická nestabilita dvojvrstev. Při studii myelinových figur byla pozorována i tvorba vezikulárních struktur v závislosti na přidané soli do systému. Vezikulární struktury hrají důležitou roli v biologických systémech a jsou předmětem řady chemických výzkumů, a to převážně za účelem potenciálního transportu a skladování látek. Cílem této práce je provedení systematické studie systému dekanol-dekanoát sodný v přítomnosti solí, a to konkrétně při tvorbě vezikulárních struktur a navrhnutí vhodného experimentálního uspořádání.

Porovnání interakcí hyaluronanu a jeho derivátů s hovězím a lidským sérovým albuminem

Bc. Eliška Pazderková (M2)

Školitel: RNDr. Ivan Řehoř, Ph.D.

Sérové albuminy jsou nejhojněji zastoupenými proteiny v krevním řečišti. Mimo krevní sérum se vyskytují značně také v synoviální tekutině či kůži, kde se současně hojně vyskytuje i hyaluronan. Sérové albuminy jsou transportní proteiny s bohatým zastoupením kladně i záporně nabitých funkčních skupin a hydrofobních domén, což umožňují interakci s širokou škálou molekul. Hyaluronan je biopolymer, který se přirozeně vyskytuje v lidském těle a pro své unikátní fyzikálně-chemické vlastnosti je používán za terapeutickými a kosmetickými účely. Studium interakce mezi sérovými albuminy a hyaluronanem je klíčové pro pochopení toho, co se s hyaluronanem děje po jeho aplikaci do různých částí těla. Běžně se pro podobné studie používá hovězí sérový albumin, který je považován za homolog lidského sérového albuminu, ačkoli se tyto proteiny shodují jen ze zhruba 75.8 %. Z tohoto důvodu je třeba se detailněji podívat na rozdíly v interakcích mezi hovězím a lidským sérovým albuminem. Kromě nativního hyaluronanu bude studována interakce i s jeho hydrofobně modifikovanými deriváty.



Experimentální stanovení objemového koeficientu přestupu hmoty v plynné fázi na vysokokapacitní výplni MP252Y

Bc. Adam Siuda (M1)

Školitel: Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.

Již od poloviny devatenáctého století se využívají elementy různých geometrií pro zvětšení efektivní plochy, na které dochází k přestupu hmoty uvnitř kolonových zařízení. Tyto elementy se postupem času přetransformovali na výplně strukturované a výplně sypané. Obě varianty výplní nacházejí široké využití v chemickém průmyslu, například při výrobě průmyslově významných kyselin, dusičné a sírové. Pro správné navrhnutí kolony pomocí rate-based přístupu je nutné znát transportní a hydraulické charakteristiky. Jedním z parametrů pro správné určení transportní charakteristiky je i objemový koeficient přestupu hmoty v plynné fázi neboli k_{Ga} . Tato práce se zabývá experimentálním stanovením k_{Ga} na vysokokapacitní výplni MellapakPlus 252Y, která se řadí již mezi výplně 4. generace. k_{Ga} bylo měřeno se systémem vzduch-čpavek/voda-kyselina sírová na poloprovozní absorpční koloně o průměru 300 mm. Byly naměřeny hodnoty k_{Ga} pro různé výšky výplně a následně byla použita odečtová metoda pro odstranění okrajových efektů. Experimentální hodnoty k_{Ga} byly porovnány s modelem Haidl et al. vytvořeným v laboratoři sdílení hmoty VŠCHT.

Optimalizácia výroby lipidickej liekovej formy

Bc. Maximilián Prachár (M1)

Školiteľ: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Viac ako 60% nových farmaceuticky účinných látok vykazuje slabú rozpustnosť vo vode, ktorá je príčinou ich nízkej bio-dostupnosti a taktiež je prítomný food-effect, kedy je vstrebateľnosť liečiva premenlivá s príjmom potravy. Inovatívna lipidická lieková forma na princípe liquid marbles (tekutých guľčiek) je schopná tieto problémy minimalizovať, ako už bolo dokázané v *in vivo* štúdiách. Ako spôsob výroby bol na VŠCHT vyvinutý prístroj Kuličkomat (Spheromat). V rámci predchádzajúceho výskumu bola vykonaná rozsiahla parametrická štúdia laboratórnej verzie tohto zariadenia, ktorej výsledky boli publikované. Ďalší logický krok na ceste od výskumu po uplatnenie technológie na trhu je presun výskumu na scale-up zariadenia. Cieľom tejto práce bolo optimalizovať výrobu na poloprevádzkovej verzii zariadenia, aplikovať predošlé poznatky na novú technológiu produkcie, určiť optimálne výrobné parametre a validovať konzistenciu výroby. Potvrdilo sa, že optimalizovaná poloprevádzková verzia zariadenia Kuličkomat je schopná výroby tejto lipidickej liekovej formy požadovanej kvality a konzistencie. Výsledky tejto práce budú uplatnené v rámci univerzitného spin-offu MarbleMat zameraného na vývoj a výrobu lipidických formulácií pre farmaceutické a potravinárske použitie.

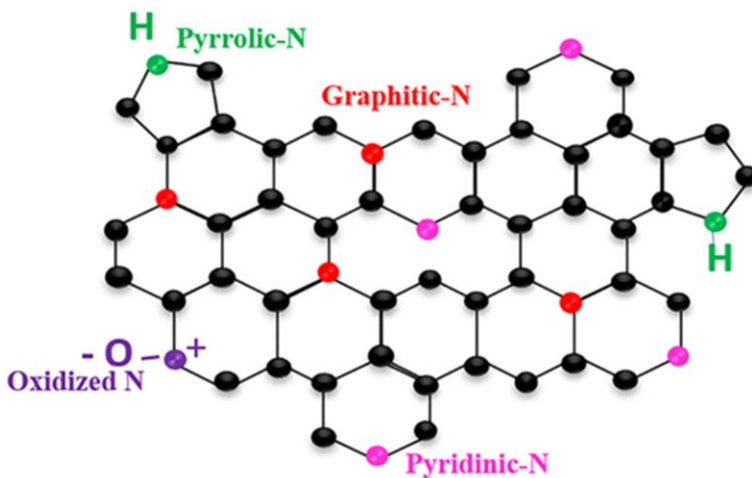


Preparation of the nitrogen-doped carbon using microwave heating

Bc. Albert Behner (M1)

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

Demand for advanced materials with specific functional properties is rapidly increasing due to their various utilizations. Part of this group are porous nitrogen-doped carbons (PNCs), which find applications such as gas sorbents, energy storage, electrocatalysis, etc. The currently used synthesis procedure of PNCs consists of thermal annealing of the carbon precursor at high temperature ($< 500\text{ }^{\circ}\text{C}$), commonly lasting for hours. This lengthy approach is highly demanding on the energy consumption, which results in negative environmental impact. Since PNCs have an auspicious use as potential CO_2 sorbents, the requirements for the environmental impact of the synthesis are stringent for the emission of CO_2 . Accordingly, the use of an alternative source of energy, such as microwave (MW) irradiation can reduce the energy usage and possibly lead to an environmentally sustainable and economically suitable synthesis approach. In this research, the thermal treatment and MW heating was compared as a procedure resulting in the polyaniline-based PNC with analogous properties. The aim of this work is to test and identify the chemical composition of PNC emerging from two parallel methods. These results are essential for the preparation of further materials using the green approach.

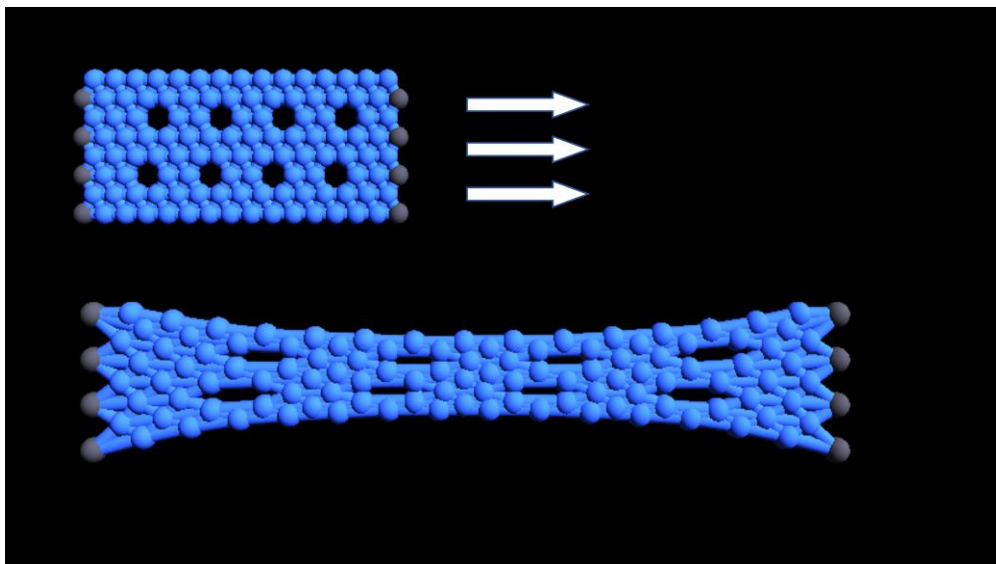


Predikce mechanických vlastností biopolymerů na bázi kyseliny hyaluronové

Bc. Filip Keller (M2)

Školitel: Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.

Biopolymery na bázi hyaluronanu budou v budoucnosti hrát stále důležitější roli v náplastech a obvazech urychlujících proces hojení ran a v mnoha dalších medicínských a farmaceutických aplikacích. Hyaluronan se přirozeně vyskytuje v mezibuněčné hmotě a je významnou složkou kožní tkáně. Tato práce se zabývá možností predikce mechanických vlastností porézních filmů vyrobených z derivátů kyseliny hyaluronové v závislosti na jejich vnitřní struktuře. Cílem je pomocí metody diskrétních elementů (DEM) matematicky modelovat mechanické namáhání a graficky znázornit závislost relativního prodloužení materiálu na působícím mechanickém napětí (tzv. stress-strain diagram) až do zborcení jeho struktury. V uměle generovaných modelech vzorků, na nichž jsou provedeny simulace, jsou póry v materiálu rozloženy geometricky pravidelně. Výsledky analýzy závislosti relativního prodloužení na mechanickém napětí jsou následně porovnány mezi sebou. Dalším krokem je modelování porézní struktury, která byla získána z konfokálního mikroskopu při charakterizaci výrobních vzorků filmů z hyaluronanu vyrobených ve firmě Contipro. Konečným cílem práce je validovat predikované stress-strain křivky s diagramy naměřenými ve firmě na reálných vzorcích.

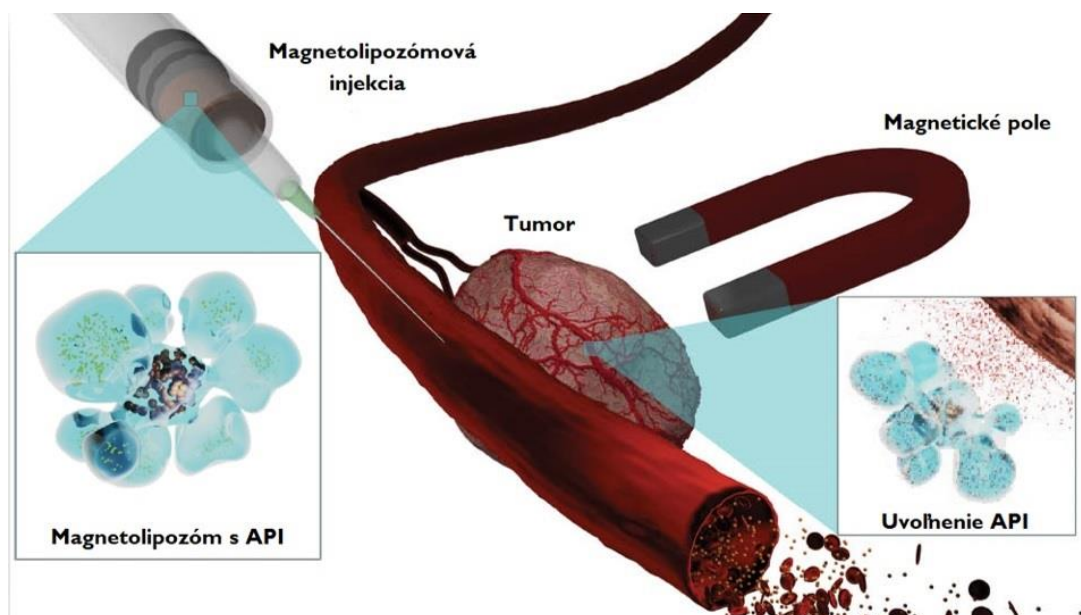


Riadené uvoľňovanie liečiv z magnetolipozómov

Bc. Lukáš Kamenský (M2)

Školiteľ: Ing. Denisa Lizoňová, Ph.D.

V súčasnosti je drvivá väčšina liečiv podávaná pacientom systémovo, kedy prítomnosť účinných látok v celom organizme podmieňuje ich potrebné vyššie dávky a zároveň možné vedľajšie účinky. Túto skutočnosť sa usiluje zmeniť koncept cieleného doručovania a riadeného uvoľňovania liečiv, ktorý by mohol priniesť zdravotné (minimalizácia nežiadúcich účinkov) aj ekonomické (minimalizácia potrebnej dávky) benefity. Ako vysoko potenciálne nosiče liečiv sú predstavené magnetolipozómy, submikrónové kompozity, kombinujúce magnetické nanočastice s lipozómami. Práca študuje vlastnú prípravu magnetolipozómov, ich základné parametre a transportné vlastnosti. Diskutuje aj vzťahy medzi schopnosťou rádiovlnového ohrevu a zložením, veľkosťou a koncentráciou magnetolipozómov v suspenzii. Ďalej sa zameriava na testovanie uvoľňovania modelovej liečivej látky, norfloxacinu (NFX), v reakcii na externý podnet a prináša výsledky prvých antimikrobiálnych testov. Magnetolipozómy boli opakovateľne pripravené s rôznym zložením v rozpätí veľkostí 200 – 800 nm a s vysokým obsahom železa (0,1 – 0,3 mg/mg fosfolipidov). Úspešná enkapsulácia NFX a jeho riadené uvoľnenie unikátnym mechanizmom potvrdzuje teoretické využitie magnetolipozómov v terapeutickej praxi.



Application of the PC-SAFT equation of state on a polymer system with multiple condensed phases

Bc. Adam Bouz (M2)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

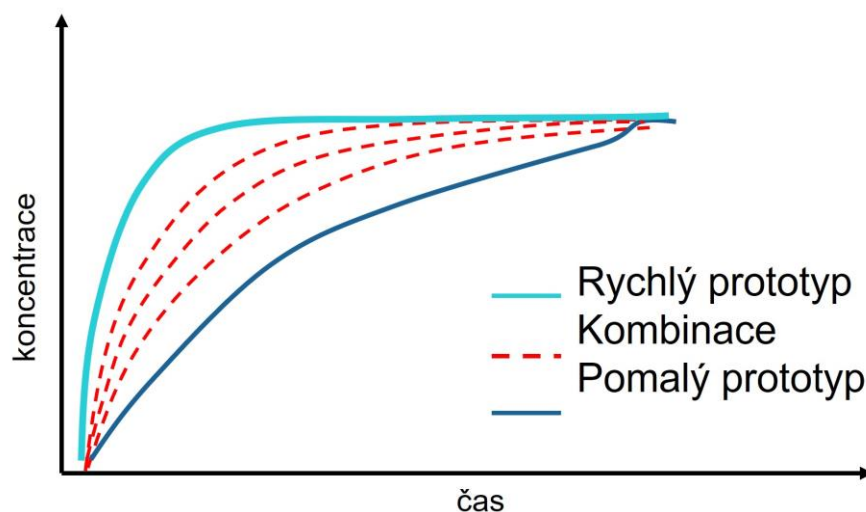
The perturbed-chain statistical association fluid theory (PC-SAFT) equation of state implemented in the Fortran programming language is applied to a ternary mixture of polymer, solvent, and gas. The work aims to determine the solubility of *n*-hexane in polyethylene during its production in a slurry reactor, i.e., in an ethylene environment. The phase equilibrium is modeled at conditions of the slurry reactor, hence at relatively low temperatures and pressures. The three pure component parameters required for each component were taken from relevant literature. The strategy is to perform extensive calculation in which experimentally acquirable state variables are fixed in order that the system of equations is not underdetermined. The total volume of the system, mass of each component, along with temperature and pressure, were obtained experimentally. The total pressure of the system was chosen as an independent variable, and its difference with the experimental value is a measure of the success of the calculation. The computation strategy and the numerical problems are discussed in the present work, as well as the determination of binary interaction parameters (k_{ij}), which are obtainable via the modeling of two-component systems.

Potahování částic pomocí fluidního lože pro řízené uvolňování léčiv

Bc. Miroslav Večeřa (M2)

Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Produkce perorálních generických léčiv je vázána na expiraci patentů originálních léčiv, jejichž vlastnosti musí nová kopie striktně splňovat. Mezi tyto vlastnosti patří například koncentrace léčiva v krevní plazmě nebo in-vitro testování rychlosti uvolňování. Avšak proces jejich optimalizace je složitý a změna jednoho parametru má vliv na více proměnných i celkové chování produktu. Univerzálním a velmi rychlým způsobem optimalizace disolučního profilu by mohla být kombinace částic potažených léčivem s rozdílnými profily, kde jejich vhodnou kombinací můžeme dosáhnout požadovaných vlastností. Pro přípravu prvních prototypů byly připraveny potahované pelety z mikrokrytalické celulózy na modifikovaném fluidním loži s Wurster komínkem. K modelovému léčivu (hydrochlorothiazid) byl do nástřiku přimícháván polymer (hydroxypropylmethylcelulóza) o dvou viskozitách. Takto byly připraveny dva typy částic s funkční vrstvou a s požadovaným chováním. Polymer zde plní roli pojidla a zároveň ovlivňuje vylučovací profil léčiva. Následnými testy byla měřena rychlost uvolnění léčiva nejprve jednotlivých typů částic a poté jejich kombinací (1:1, 1:3, 3:1). Těmito kombinacemi se nám podařilo úspěšně vytvářet různé profily vylučování v mezích daných profilem pomalého a rychlého disolučního profilu.



Chemické inženýrství VII

MÍSTO: B008

KOMISE

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

Ing. Martin Isoz, Ph.D.

Ing. Vojtěch Šálek

Ing. Přemysl Richter

zástupce sponzora

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 [Bc. Kateřina Nyklíčková](#) (M2, Ing. Petr Stavárek, Ph.D.)

Vliv geometrických parametrů 3D strukturovaného lože zkrápěného reaktoru z pohledu dvoufázového toku

08:50 [Bc. Kateřina Neubergerová](#) (M1, Argyro Chatziadi)

New coamorphous drug formulations of enzalutamide

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

Nová metoda pro současné určení permeačního a partičního koeficientu s využitím liposomů

09:30 [Bc. Lucie Večerková](#) (M2, Ing. Viola Tokárová, Ph.D.)

Vývoj dezinfekčního prostředku s prodlouženým účinkem pro kožní aplikaci

09:50 [Bc. Daniel Bambas](#) (M1, prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha)

Uvedení poloprovozního míchaného reaktoru do provozu

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

Príprava a testovanie antibakteriálnych povrchov

10:50 [Bc. Oliver Nagy](#) (M1, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

Kombinované lipidické a porézní nosiče léčiv

11:10 [Bc. Zbyněk Semerád](#) (M2, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Vliv přítomnosti sazí na katalytickou aktivitu filtru pevných částic

11:30 [Bc. Jordan Janák](#) (M1, prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha)

Screening polymerních membrán pro pervaporační dělení směsí methanolu a acetonitrilu

11:50 [Bc. Vojtěch Blahušek](#) (M1, doc. Ing. Jitka Čejková, Ph.D.)

Studium vlivu geometrie na Marangoniho tok vyvolaný Löfflerovou směsí

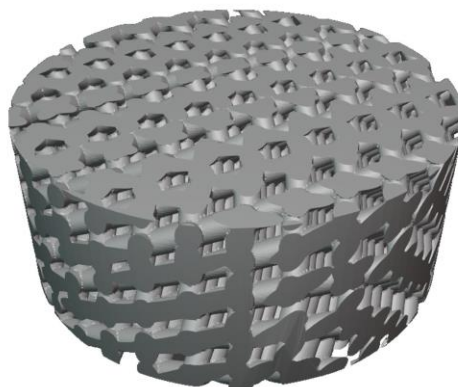
vyhlášení výsledků

Vliv geometrických parametrů 3D strukturovaného lože zkrápěného reaktoru z pohledu dvoufázového toku

Bc. Kateřina Nyklíčková (M2)

Školitel: Ing. Petr Stavárek, Ph.D.

Třífázové reaktory se zkrápěným ložem mají významné využití v oblasti heterogenní katalýzy. Struktura pevného lože, skrze které proudí plyn a kapalina, je důležitá z hlediska hydrodynamiky dvoufázového toku. V průmyslu jsou běžně používána lože tvořená z náhodně sypaných částic, jejichž výhodou je jednoduchá instalace a výměna v reaktoru, ovšem díky nerovnoměrné distribuci tekutiny dochází ke špatnému vedení tepla a vysoké tlakové ztrátě. Tyto nežádoucí efekty by mohly být eliminovány přesně definovanou strukturou lože. Díky současným možnostem 3D tisku lze takovéto struktury s přesností na desetiny milimetru vyrobit. Tato práce se zabývá studiem periodicky se opakujících otevřených struktur (POCS) jako možnými nosiči katalyzátoru. V rámci práce byl doposud studován parametrický soubor deseti POCS struktur, u nichž byly měněny parametry jako šířka vzpěr, či velikost buněk, s důrazem na zachování podobné hodnoty porozity. Hydrodynamické vlastnosti (tlaková ztráta, zádrž kapaliny) jsou porovnány s daty pro náhodně sypané částice (kuličky, válečky), které při přibližně stejném specifickém povrchu a porositě dosahují až několikanásobných hodnot tlakové ztráty. Dále se práce zaměřuje na predikci tlakové ztráty a zádrže kapaliny pro tyto struktury pomocí vhodných empirických korelací.



New coamorphous drug formulations of enzalutamide

Bc. Kateřina Neubergerová (M1)

Školitel: Argyro Chatziadi

Nowadays, approximately 40 % of marketed drugs exhibit poor water solubility. Since most of them are administered orally, their solubility in gastric and intestinal fluids is crucial for biological activity. Several promising approaches have been introduced to improve dissolution properties, e.g., amorphization. Nevertheless, its use is limited due to the thermodynamic instability of prepared systems. To overcome this disadvantage coamorphous systems have been introduced. In these systems, a drug and small organic compounds form an amorphous mixture stabilized by intermolecular interactions. Thus, the systems exhibit higher stability and enhanced dissolution rate compared to the individual components. The aim of this work was screening and preparation of coamorphous formulations by vibrational ball milling. Enzalutamide, a poorly water-soluble drug commercially used for prostate cancer treatment, was combined with various coformers. Four new coamorphous forms were found and further analyzed by differential scanning calorimetry and infrared spectroscopy. The dissolution behavior of those systems in aqueous solution is studied. Results will be compared to crystalline and amorphous enzalutamide to prove that the coamorphous provide a dissolution advantage.

Nová metoda pro současné určení permeačního a partičního koeficientu s využitím liposomů

Bc. Klára Odehnalová (M2)

Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

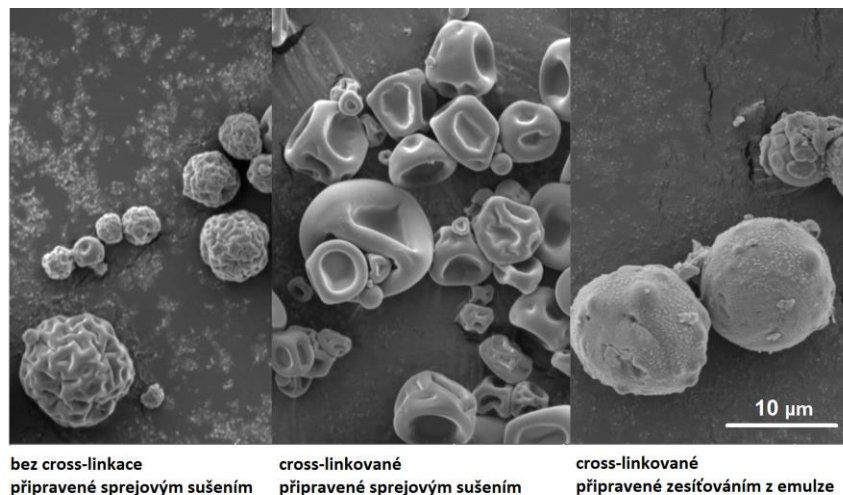
Permeace je jedním z klíčových parametrů biodostupnosti léčiv, jelikož je součástí nejen vstřebávání léčiv při různé aplikaci (perorální, transdermální, inhalační), ale i při následné distribuci v lidském těle. Permeace je tudíž již intenzivně zkoumána a existuje mnoho simulačních, výpočetních i experimentálních metod pro stanovení permeability. Dosavadní známé experimentální metody probíhají však pouze přes velmi malý povrch (cm^2), a proto neexistuje doposud experimentální metoda pro stanovení permeability pomalu-permeujících látek. Jelikož tenké střevo má povrch desítky m^2 , je důležité sledovat i tyto látky. Zároveň neexistuje metoda pro současné stanovení permeačního a partičního koeficientu. Tato práce se zabývá vývojem nové experimentální metody pro současné stanovení permeability a partičního koeficientu pomalu-permeujících látek. Byl nalezen vhodný experimentální systém (liposomy) a vhodné podmínky pro naměření experimentálních dat. Poté byl navržen model, který byl použit na naměřená experimentální data a byla pomocí něj určena permeabilita a partiční koeficient. S využitím této metody byl zkoumán také vliv přidání jiné látky na tyto veličiny. Na závěr bylo prokázáno, že je tato metoda vhodná i pro sledování a měření takzvaného „*permeation enhancementu*“.

Vývoj dezinfekčního prostředku s prodlouženým účinkem pro kožní aplikaci

Bc. Lucie Večerková (M2)

Školitel: Ing. Viola Tokárová, Ph.D.

Patogenní mikroorganismy se šíří z člověka na člověka vzájemným kontaktem, či zprostředkovaně přes kontaminované povrchy, a to například dotekem rukou. Jednou z možností omezení přenosu je tedy udržení čistých rukou, čehož zejména v posledních letech značná část populace dosahuje dezinfekčními prostředky na bázi etanolu. Tyto, ač mají skvělý okamžitý účinek, nezajistí dlouhodobou ochranu, navíc vysušují pokožku. Cílem této práce je vytvořit dezinfekční prostředek, jež by díky postupnému uvolňování aktivní složky na lidskou kůži zajistil ochranu před mikroorganismy trvající v řádu desítek minut až hodin. Pro tento účel bude zkoumána vhodnost chitosanových mikročástic s chlorhexidin diglukonátem s různou mírou cross-linkace (zesíťování) viz obrázky, jež se zachytí a určitou dobu udrží v papilárních liniích. Porovnáním morfologie, distribuce velikostí částic, rychlosti uvolňování aktivní složky atd. bude zvolena nejvhodnější metoda přípravy. Vybrané částice budou dále testovány na mikroorganismech a to jak na okamžitý, tak prodloužený účinek. Pro testování prodlouženého účinku bylo třeba vyvinout vhodnou metodu. Ukázalo se jako praktické vytvořit k tomuto účelu repliku kůže na lidském prstu, na níž bude možné sledovat prodloužený účinek opakovanou umělou kontaminací.



Uvedení poloprovozního míchaného reaktor do provozu

Bc. Daniel Bambas (M1)

Školitel: prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha

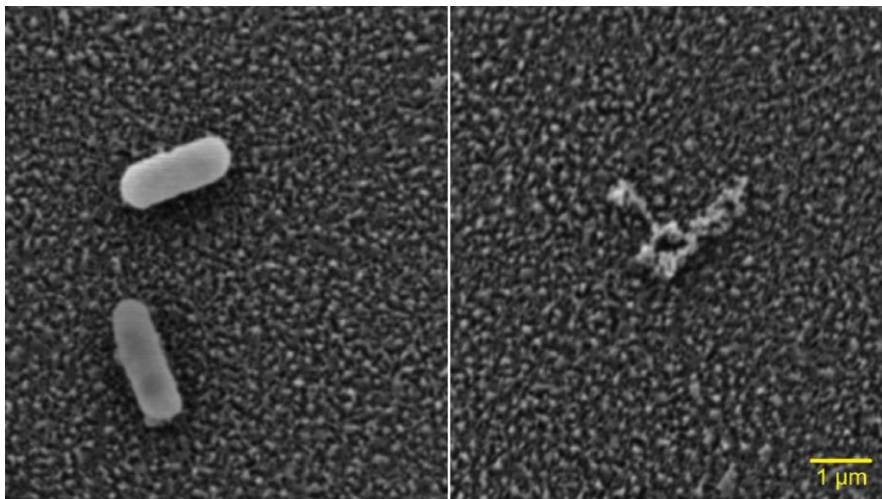
Mechanicky míchané nádoby nacházejí hojné uplatnění v průmyslu při procesech směšování látek, dispergaci fází či suspendaci částic v kapalině. V systémech kapalina-plyn se míchané nádoby využívají k intenzifikaci přestupu hmoty mezi fázemi. Montáží takovéto míchané nádoby se v této práci budeme věnovat. Z důvodu rekonstrukce laboratoře byla míchaná válcová nádoba o přibližném objemu 550 dm^3 , výšce 2 m a průměru 60 cm dočasně demontována. Kvůli její velikosti byla zpětná montáž netriviálním úkolem. Hlavními výzvami během montáže byly zajištění těsnosti nádoby, zapojení veškeré elektroniky a ověření kvality smontování pomocí série testovacích měření. Během práce bylo třeba řešit postupně vznikající různorodé problémy jako byla fixace hnacího motoru míchadla ke zdi, montáž nového ventilu pro přívod plynu spolu s jeho elektrickými rozvody a re-design obvodu chladicí vody. Po úspěšném smontování bude poloprovozní míchaný reaktor sloužit k měření hydromechanických a transportních vlastností tekutin.

Príprava a testovanie antibakteriálnych povrchov

Bc. Mária Šoltéssová (M1)

Školiteľ: Ing. Viola Tokárová, Ph.D.

Z výskumov vyplýva, že krídla niektorých druhov hmyzu, konkrétne krídla vážok, šidielok a cikád, vykazujú antibakteriálne vlastnosti. Vďaka tomu prítomnosti nanoštruktúr, ktoré majú schopnosť mechanicky narušiť integritu bakteriálnej membrány a tým zapríčiniť jej uhynutie (viď obrázok – porovnanie SEM snímkov živých a uhynutých baktérií). Cieľom tejto práce je otestovať mieru antibakteriálneho účinku krídel vybraných druhov vážok a porovnať ich s antibakteriálnym účinkom povrchov na báze strieborných nanočastíc. Testované povrchy boli charakterizované pomocou SEM snímkov a ich baktericídne účinky vyhodnotené voči gram-pozitívnej baktérii *Staphylococcus epidermidis* a gram-negatívnej *Escherichia coli*. Rozdiel medzi gram-pozitívnymi a gram-negatívnymi baktériami spočíva v ich odlišnej bunečnej membráne, ktorá priamo ovplyvňuje ako bude daná baktéria s povrchom interagovať. Antibakteriálne povrchy nám ponúkajú možnosť bojovať voči čoraz rozšírenejšej bakteriálnej rezistencii proti súčasným antibiotikám iným prístupom - a to prevenciou. Výhodou mechanického účinku nanoštruktúrovaných povrchov je ich možnosť opakovaného použitia, nenáročnosť na údržbu a možnosť replikácie ich morfológie na širokom spektre povrchov od medicínskych náčiní, trupy lodí až po každodenné predmety okolo nás.



Kombinované lipidické a porézní nosiče léčiv

Bc. Oliver Nagy (M1)

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

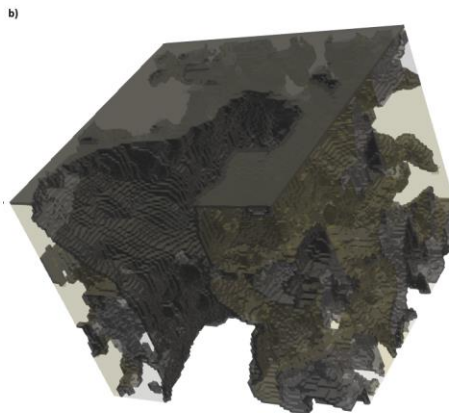
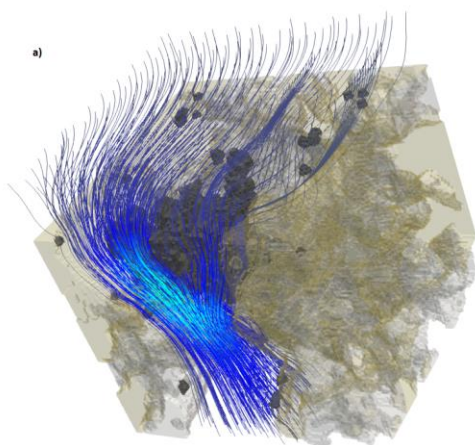
V dnešní době je v některých aplikacích třeba podávat léčiva lokálně, neboť intravenózní a perorální podání mají řadu nežádoucích efektů, jako například systémový efekt, vyšší spotřebu účinné látky, nebo kratší dobu působení. Tento projekt se zabývá vývojem a charakterizací nové lékové formy na bázi porézního nosiče kombinovaného s lipidickou vrstvou. Vyvíjený materiál je charakteristický kontrolovatelnou kinetikou vylučování účinné látky a jeho potenciální aplikace na místo určení je jednoduchá a rychlá. Cílem této práce je návrh, příprava, charakterizace, a předpověď faktorů, které mají vliv na kinetiku vylučování léčiva a samotnou přípravu lékové formy. Všechny zjištěné parametry by měly přispět k vytvoření metodologie přípravy nové pevné lékové formy pro lokální aplikaci s řízenou kinetikou vylučování léčiva. Doposud bylo připraveno a následně charakterizováno několik různých porézních forem fosforečnanu vápenatého (vybrán pro svou biokompatibilitu), jež byly potaženy fosfolipidy s příměsemi a léčivem (antibiotikum doxycyklin-hyklát). Vytvořené lékové formy byly podrobeny disolučním testům. Tyto testy v závislosti na porositě matrice a volbě substrátů vykazovaly různou kinetiku vylučování, což ukazuje na možnosti přípravy této lékové formy s on-demand vylučovací kinetikou.

Vliv přítomnosti sazí na katalytickou aktivitu filtru pevných částic

Bc. Zbyněk Semerád (M2)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Jedním z klíčových parametrů spalovacího automobilu je množství produkovaných emisí. Evropská unie prostřednictvím emisních norem omezuje jak množství plynných emisí, tak množství a počet produkovaných pevných částic. Jedním ze zařízení redukujících tyto emise je katalytický filtr pevných částic, který filtruje pevné částice, a zároveň katalyzuje probíhající reakce. Během provozu dochází k produkci sazí, které se zachytávají i na katalytické vrstvě filtru, a tím mohou ovlivňovat průběh reakcí. Ke studii tohoto jevu je využita 3D struktura reálného katalytického filtru pevných částic získaná na základě dat z rentgenové tomografie. Struktura je poté převedena na výpočetní síť, a v programu OpenFOAM využita k modelování toku, filtrace a probíhajících reakcí. V prezentované simulační studii je diskutován vliv přítomnosti a rozmístění sazí na konverzi oxidace CO. Na obrázcích níže je černě zobrazena vrstva sazí vytvořená pomocí simulace toku a filtrace (obrázek a)), a uměle vytvořená souvislá vrstva sazí (obrázek b)).



Screening polymerních membrán pro pervaporační dělení směsí methanolu a acetonitrilu

Bc. Jordan Janák (M1)

Školitel: prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha

Práce se zabývá porovnáním dat pervaporačních charakteristik (separační faktor, selektivita, koeficient propustnosti) série polymerních membrán pro dělení azeotrop-tvořící dvojice látek methanol – acetonitril. Pervaporační měření byla prováděna při třech různých teplotách (35, 45, 55) °C, analýza zásobního roztoku a permeátu byla prováděna metodou infračervené spektrometrie v plynné fázi. Studované polymerní membrány byly připraveny z triacetátu celulózy (CTA), kyseliny polymléčné (PLA), polysulfonu (PSU), poly(1-trimethylsilyl-1-propynu) (PTMSP), Matrimidu®, silikonového a polychloroprenového kaučuku (SR, CR). Dále byly charakterizovány komerčně dostupné membrány od firmy DeltaMem AG: organofilní (typ 4060) a hydrofilní (typy 4155 a 1265). Fyzikálně konzistentní model pervaporace zahrnoval model termodynamické neideality kapalně směsi. Zatímco klasickou úlohou je v případě pervaporace dělení směsí látek hydrofilních a organofilních, cílem této práce je nalezení možností pervaporativního dělení směsí hydrofilních (polárních) látek.

Studium vlivu geometrie na Marangoniho tok vyvolaný Löfflerovou směsí

Bc. Vojtěch Blahušek (M1)

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

Kafrové lodičky jsou hojně využívány ke studiu samopohybu, saomouspořádání a nelineárního chování – vlastností, které jsou běžně pozorovatelné u živých organismů. Lodičky s čistým kafrem byly již hojně prostudovány. Kafr je krystalická látka a používá se ve formě uniformních lisovaných tablet, což značně limituje studium závislosti samopohybu na tvaru pohybujícího se objektu. Molekuly kafru se dostávají na vodní hladinu dvěma způsoby, a to sice přímou dissolucí a sublimací a následnou depozicí. Na hladině vody působí jako slabý surfaktant, takže snižují povrchové napětí vody okolo kafrové lodičky. Vzniká tak gradient povrchového napětí a ten vyvolává Marangoniho efekt, tedy tok kapaliny z místa s nižším povrchovým napětím do místa s vyšším. Tok vyvolaný tímto způsobem rozpohybuje kafrovou lodičku. Cílem této práce je použít pro experimenty nedávno popsanou Löfflerovu směs, směs kafru a kamfénu. Löfflerova směs má spíše charakter vosku, takže ji lze snadno tvarovat. V rámci práce bylo navrženo několik možností uspořádání lodiček s Löfflerovou směsí. Také bylo pozorováno jednoduché čerpadlo tvořené imobilizovanou Löfflerovou směsí. Byly naměřeny charakteristiky jako rychlost pohybu lodiček a rychlost toku. Dále bylo diskutováno použití Löfflerovy směsi v jednoduchých zařízeních.

Chemické inženýrství VIII

MÍSTO: BIII

KOMISE

prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha (předseda)

Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Ing. Martin Bureš

Ing. Lenka Krajáková

zástupce sponzora

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 [Bc. Martin Spurný](#) (M1, Ing. Petr Mazúr, Ph.D.)

Elektrochemické testovanie sulfónovaných antrachinónových derivátov pre použitie v redoxných prietokových batériách

08:50 [Bc. Tereza Hodná](#) (M2, doc. Ing. František Rejl, Ph.D.)

Řízení zařízení pro odstraňování oxidu uhelnatého

09:10 [Bc. Vojtěch Škopek](#) (M2, Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.)

Stanovení tlakové ztráty výplně Mellapak 252Y a vyhodnocení specifických konstant pro hydromechanický model na nové absorpční koloně

09:30 [Bc. Lukáš Berčík](#) (M1, prof. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.)

Stanovení smykového napětí v míchaných a průtočných systémech

09:50 [Bc. Dan Unzeitig](#) (M1, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.)

Vliv výrobních parametrů na vnitřní strukturu tekutých kuliček

10:30 [Bc. Jakub Kamenický](#) (M1, prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha)

Softwarová modifikace programu pro stanovení linearity vodíkového senzoru

10:50 [Bc. Karel Kubeš](#) (M1, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)

Enhancing the effectivity of electrodynamic dust shield with polymeric layers

11:10 [Bc. Matouš Polák](#) (M2, prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Vliv stárnutí na aktivitu katalytických filtrů pevných částic

11:30 [Bc. Petr Fatka](#) (M2, Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D.)

Cesta do nitra glukonových částic

11:50 [Bc. Tomáš Šulc](#) (M2, doc. Ing. František Rejl, Ph.D.)

Sledování fázového rozhraní pozitivních a negativních systémů při destilaci pomocí termografie

vyhlášení výsledků

Elektrochemické testovanie sulfónovaných antrachinónových derivátov pre použitie v redoxných prietokových batériách

Bc. Martin Spurný (M1)

Školiteľ: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Obnoviteľné zdroje v energetike predstavujú výzvu v podobe nekonštantných dodávok elektriny do rozvodnej siete. Potenciálnym riešením sú organické redoxné prietokové batérie (RFB- redox flow battery), ktoré by uchovávali vyrobenú energiu a zabezpečovali jej nepretržitú dostupnosť. Antrachinónové disulfónované soli (AQDS) sú vhodnými kandidátmi na redoxne aktívnu látku pre záporný elektrolyt RFB. Cieľom tejto práce bola elektrochemická charakterizácia 2,7- a 2,6-disulfónovaných AQDS s rôznymi protiiónmi pomocou voltametrických meraní, štúdium chemickej stability v článku prietokovej batérie a stanovenie maximálnej rozpustnosti vo vodnom elektrolyte s neutrálnym pH. Voltametrické merania prebiehali na statickej a rotujúcej diskovej elektróde, pričom boli vyhodnotené elektrochemické parametre (formálny redoxný potenciál, difúzny koeficient, kinetické parametre), ktoré vykazovali malé rozdiely medzi skúmanými vzorkami. Rozpustnosť bola stanovená analýzou nasýtených roztokov AQDS v UV-VIS spektrometri, kedy boli najvyššie hodnoty namerané pri 2,7-AQDS-Na a 2,7-AQDS-NH₄. Pri cyklickom nabíjaní/vybíjaní v laboratórnom prietokovom článku bolo pri oboch formách optimalizované zloženie elektrolytu pre dosiahnutie vysokej stability. Pri NH₄-forme bola objavená možnosť regenerácie kapacity.

Řízení zařízení pro odstraňování oxidu uhelnatého

Bc. Tereza Hodná (M2)

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

Ni-Cd akumulátory jsou díky svým vlastnostem dodnes využívány ve specifických aplikacích a předpokládá se, že v oběhu budou ještě nejméně třicet let. Toxicita kadmia pro životní prostředí je zřejmou problematikou a po skončení životnosti je nutné akumulátory recyklovat s důrazem na kompletní odstranění kadmia. Při recyklaci Ni-Cd akumulátorů pyrometalurgickým zpracováním v redukční atmosféře se z technologie uvolňuje odplyn s vysokým množstvím oxidu uhelnatého, které je třeba výrazně snížit, nejlépe odstranit. K tomu bylo navrženo zařízení (dospalovák), které zbavuje odplyn oxidu uhelnatého jeho spálením kyslíkem na oxid uhličitý. Pro řízení dospalováku je třeba sestavit logiku řízení a regulaci, aby jednotka dokázala řídit proces hoření tak, že koncentrace oxidu uhelnatého bezpečně klesne pod zákonem stanovený limit 500 mg/m³ a spaliny budou moci být vypuštěny do ovzduší.

Stanovení tlakové ztráty výplně Mellapak 252Y a vyhodnocení specifických konstant pro hydromechanický model na nové absorpční koloně

Bc. Vojtěch Škopek (M2)

Školitel: Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.

V průmyslové praxi je absorpce často využívaným procesem pro čištění plynů. Absorpce je provozována v kolonových aparátech, které jsou naplněny strukturovanými nebo sypanými výplněmi. Ty jsou používány pro zlepšení kontaktu kapalné a plynné fáze. Aby bylo možné v Laboratoři sdílení hmoty pracovat s co největším množstvím těchto výplní, je potřeba mít k dispozici různě dimenzované kolony. Cílem této práce bylo proto postavit novou poloprovozní absorpční kolonu o vnitřním průměru 300 mm z materiálu, který odolá veškerým chemikáliím a tlakům, kterým bude kolona vystavena a naměřit na ní tak prvotní data. První změřená veličina na nové koloně byla tlaková ztráta na vysokokapacitní strukturované výplni Mellapak 252Y od firmy Sulzer Ltd. Tlaková ztráta byla naměřena na systému voda – vzduch jak pro suchou výplň, tak při různých mírách skrápění vodou. Získaná data byla následně porovnána s daty od výrobce získaná z programu Sulcol a využita pro stanovení specifických konstant výplně pro hydromechanický model. Konkrétně pro hojně používaný model Billet and Schultes z roku 1999.

Stanovení smykového napětí v míchaných a průtočných systémech

Bc. Lukáš Berčík (M1)

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

Znalost smykového napětí v systémech používaných pro kultivaci savčích buněk představuje klíčový parametr pro přenos procesu z laboratorního do výrobního měřítka. Kultivace může probíhat buď vsádkově (v bioreaktoru), nebo kontinuálně (perfuzní systém). Při kontinuálním provozu je běžně používáno odstředivé čerpadlo, které představuje další zdroj smykového napětí a tudíž i riziko pro buňky. Předložená práce bude věnována experimentální charakterizaci maximálního smykového napětí v míchaném reaktoru a odstředivém čerpadle za použití systému agregátů nanočástic citlivých na smykové napětí. Získaná data budou porovnána s hodnotami vypočtenými pomocí modelování dynamiky tekutin (CFD). Metoda agregátů bude testována také vzhledem k její robustnosti (vliv parametrů použitých při agregaci na chování částic ve zkoumaném systému) a univerzálnosti (aplikovatelnost v koncepčně odlišných systémech).

Vliv výrobních parametrů na vnitřní strukturu tekutých kuliček

Bc. Dan Unzeitig (M1)

Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Tekuté kuličky představují vhodnou alternativu pro podávání účinných látek se špatnou biodostupností překonanou např. podáním v amorfnní formě. Kuličky se připravují kapáním roztavené pevné fáze do lože z prášku, kterým se po dopadu obalí. Účinná látka se stabilizuje nejčastěji v olejové fázi nebo polymeru. Výsledný tvar, velikost, nebo obsah prášku vůči olejové fázi se dá regulovat mnoha výrobními parametry, jako jsou výška, ze které kapky dopadají do lože, teplota a průtok taveniny, teplota práškového lože, nebo rychlost chlazení produktu. Tato práce se je věnována studiu vnitřní struktury kuliček, odhalování výrobních vad a výpočtu obsahu prachových částic. Kuličky jsou skenovány pomocí mikrotomografie, která umožňuje nedestruktivní pohled do nitra kuličky. Na snímcích z CT jsou zřetelně rozlišitelné složky, ze kterých se kulička skládá, a tudíž je možné vyhodnotit i poměr jejich obsahu. Nejčastěji přítomné vady pozorovatelné při tomografii jsou dutiny nebo separace fází vznikající při tuhnutí kuličky. Práce by měla vést k optimalizaci výrobních parametrů a minimalizaci vad u připravovaných kuliček.

Softwarová modifikace programu pro stanovení linearity vodíkového senzoru

Bc. Jakub Kamenický (M1)

Školitel: prof. Dr. Ing. Tomáš Moucha

V současné době není na trhu mnoho zařízení schopných měřit koncentraci vodíku v plynech a kapalinách s náležitou selektivitou a s přijatelnou odolností vůči podmínkám v provozu. Vodíkový senzor vyvíjený v Laboratoři sdílení hmoty vykazuje slibné výsledky jak v přesnosti měření, tak v odolnosti v provozu. Vodíková sonda funguje na principu ampérometrie. Této elektroanalytické metody využívá i dříve vyvinutá kyslíková sonda, jež našla využití v jaderné elektrárně. Výhodou ampérometrické vodíkové sondy je, že oproti většině komerčně dostupných senzorů založených na tepelné vodivosti vykazuje výrazně vyšší selektivitu pro vodík, poskytuje prakticky okamžitou odezvu (časová konstanta v jednotkách sekund) a signál sondy je z fyzikálního principu měření lineární vůči koncentraci vodíku. Tato práce je zaměřena na rozšíření řídicího software o modul ověření linearity signálu sondy přímo na měřicím zařízení. Předchozí vývoj byl zaměřen na software pro tlakovou a teplotní korekci velikosti měřeného signálu. Korekci bylo možné provést na základě experimentálního stanovení aktivační energie použité membrány. Všechny dílčí části byly implementovány do jednoho programu, který obsluhuje celé měřicí zařízení sondy.

Enhancing the effectivity of electrodynamic dust shield with polymeric layers

Bc. Karel Kubeš (M1)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

The so-called electrodynamic dust shield (EDS) is a technology that uses an electric field to repel charged particles. It was invented to keep the surfaces of vulnerable devices in space clean. Unlike the highly charged particles in space, terrestrial dust particles carry smaller to no charge, as they are, for example, not exposed to direct space rays. The fundamental idea of this work is to intensify the charge on deposited dust particles using the triboelectric effect so that the dust shield would be more applicable to Earth conditions. We studied the behavior of sand particles on four different polymer layers prepared by electrospraying. Charging was carried out using a 3D-printed charging cell and vibrational apparatus and evaluated using a Faraday cup with an electrometer. The results showed that polystyrene and polymethylmethacrylate could be utilized in terrestrial EDS due to their durability and ability to reliably charge the sand particles to one polarity. For the next part of the research, we constructed an EDS prototype to confirm the concept's functionality. Using a 3D-printed cage, we fitted prepared polymer layers on the electrode and studied the repulsion of adhered dust. In the future, the completed improvement could find great use in the photovoltaic industry.

Vliv stárnutí na aktivitu katalytických filtrů pevných částic

Bc. Matouš Polák (M2)

Školitel: prof. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

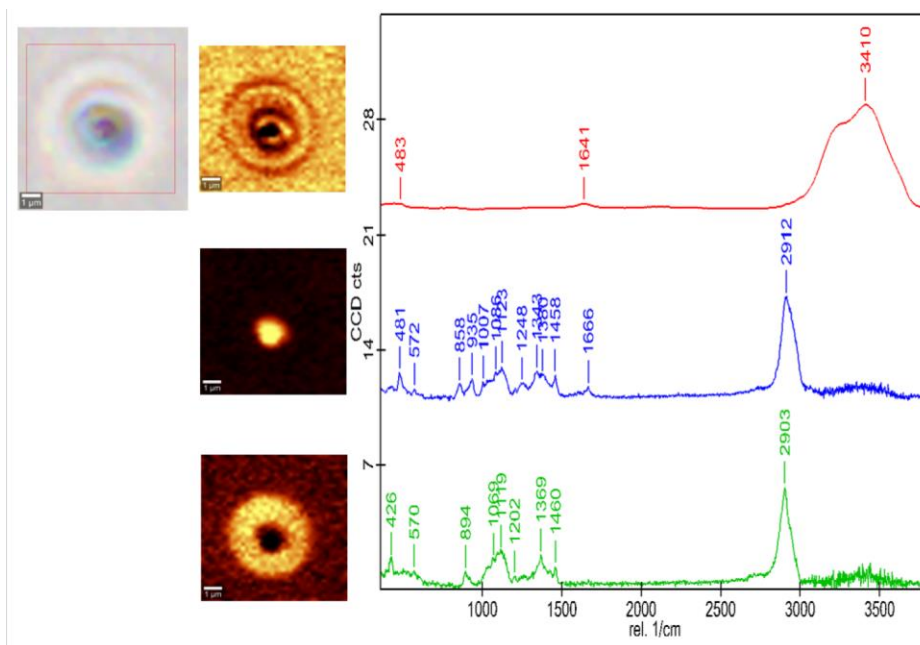
V automobilovém průmyslu jsou vyvíjeny technologie sloužící ke snižování toxických složek výfukových plynů tak, aby účinnost těchto zařízení byla co nejvyšší a byly splněny i ty nej přísnější legislativní předpisy. Pro čištění výfukových plynů se v dnešní době nejčastěji využívají katalytické filtry pevných částic. Jedná se o zařízení schopná zachytávat jak pevné částice, tak i katalyticky přeměňovat škodlivé plynné složky (zejména oxid uhličitý, oxidy dusíku a zbytky nespálených uhlovodíků) na zdravotně nezávadné látky (voda, dusík a oxid uhličitý). Katalytické filtry pevných částic jsou v automobilech vystavovány extrémním podmínkám, a je proto důležité, aby během provozu nedocházelo k nevratnému snížení katalytické aktivity. Tato práce se zaměřuje na hlavní faktor ovlivňující stárnutí katalytického filtru pevných částic, kterým je vliv vysoké teploty a s tím související nežádoucí růst velikosti katalyticky aktivních nanočástic (slinutí), které vede ke ztrátě aktivních center. Cílem práce je nalezení takových provozních podmínek, které umožní oxidaci sazí a zároveň omezí deaktivaci katalyzátoru.

Cesta do nitra glukanových částic

Bc. Petr Fatka (M2)

Školitel: Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D.

β -glukany jsou polysacharidy, které je možné nalézt např. v buněčných stěnách kvasinek. Vyznačují se schopností stimulovat imunitní odpověď organismu, což z nich činí potenciálně výhodný materiál pro různorodé aplikace, např. doručování léčiv. Z původních kvasinkových buněk je možné několikakrokovou extrakcí získat duté, porézní částice o velikosti 2-5 μm , jejichž stěny jsou tvořeny právě z β -glukanů. Přestože v literatuře je produkt tohoto postupu běžně popisován jako duté částice, snímky z konfokálního mikroskopu i TEM (naše i v literatuře) naznačují přítomnost jádra uvnitř částic. Toto jádro ovšem není nijak komentováno. Zaměřili jsme se na zjištění složení tohoto jádra. Byly provedeny pokusy o rozbítí částic, s cílem uvolnit jádro z obalu a charakterizovat ho obvyklými metodami (např. spektroskopicky), čehož však nebylo několika různými metodami dosaženo. Až využití konfokální Ramanovy mikroskopie umožnilo i bez rozbíjení odhalit, že se jádro pravděpodobně skládá ze směsi α -polysacharidů a blíže nespecifikovaných proteinů. Důsledkem vyhodnocení dat z konfokálního mikroskopu a konfokálního Ramanova mikroskopu byla celková změna pohledu na strukturu glukanové částice.



Sledování fázového rozhraní pozitivních a negativních systémů při destilaci pomocí termografie

Bc. Tomáš Šulc (M2)

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

I přes to, že efektivní mezifázová plocha je jedním z parametrů modelů pro sdílení hmoty v plněných kolonách, neexistuje metoda, která by dokázala spolehlivě určit její hodnotu. Cíl práce je vývoj metody umožňující experimentální stanovení efektivní mezifázové plochy strukturovaných výplní při destilačních podmínkách. Za tímto účelem byla navržena a sestavena aparatura ve které po skloněném plechu proudí kapalina a proti ní stoupá pára a dochází k destilaci. U vybraných binární systémů, pro které je teplota měřená termokamerou velmi blízká teplotě fázového rozhraní, provádíme termografické snímky a videa kapalného filmu. Z pořízených termografických záznamů se snažíme určit místa se zhoršenou hydrodynamikou stékajícího kapalného filmu, ve kterých se kapalina dostala do rovnovážného stavu s párou, čímž v tomto místě došlo k poklesu intenzity sdílení hmoty.

Ústav fyziky a měřicí techniky (444)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

RNDr. Pavel Galář, Ph.D.

SEZNAM SEKČÍ

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

SPONZOŘI ÚSTAVU FYZIKY A MĚŘICÍ TECHNIKY



vesmír

Ústav fyziky a měřicí techniky A

MÍSTO: B220

KOMISE

prof. Dr. Ing. Martin Vršata (předseda)

RNDr. Lukáš Ondič, Ph.D.

Ing. Jaroslav Otta

Ing. Josef Khun, Ph.D.

Ing. Martin Straka, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Michael Hemza](#) (B3, Ing. Přemysl Fitl, Ph.D.)

Návrh logaritmického zesilovače pro měření odporu s využitím IO LOG 112.

09:20 [David Kavka](#) (B3, RNDr. Pavel Galář, Ph.D.)

Studie opakovatelnosti a optimalizace přípravy nanočástic křemíku pomocí netermálního nízkotlakého plazmatu

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

Superkondenzátory založené na vodných elektrolytech s vysokou koncentrací solí

10:00 [Bc. Tereza Černá](#) (M2, RNDr. Pavel Galář, Ph.D.)

Studium kvantového výtěžku fotoluminiscence křemíkových vakancí v diamantu

10:20 [Bc. Jakub Kopenec](#) (M2, RNDr. Pavel Galář, Ph.D.)

Studium vznětlivosti a uvolněné energie při hoření křemíkových nanočástic

10:40 [Bc. Filip Matějka](#) (M2, RNDr. Pavel Galář, Ph.D.)

Interakce plazmového výboje s kapalinami za vzniku prostředí vhodného pro terminaci povrchu křemíkových nanočástic

11:00 [Bc. David Müller](#) (M2, Ing. Přemysl Fitl, Ph.D.)

Automatizace ultrazvukové defektoskopie

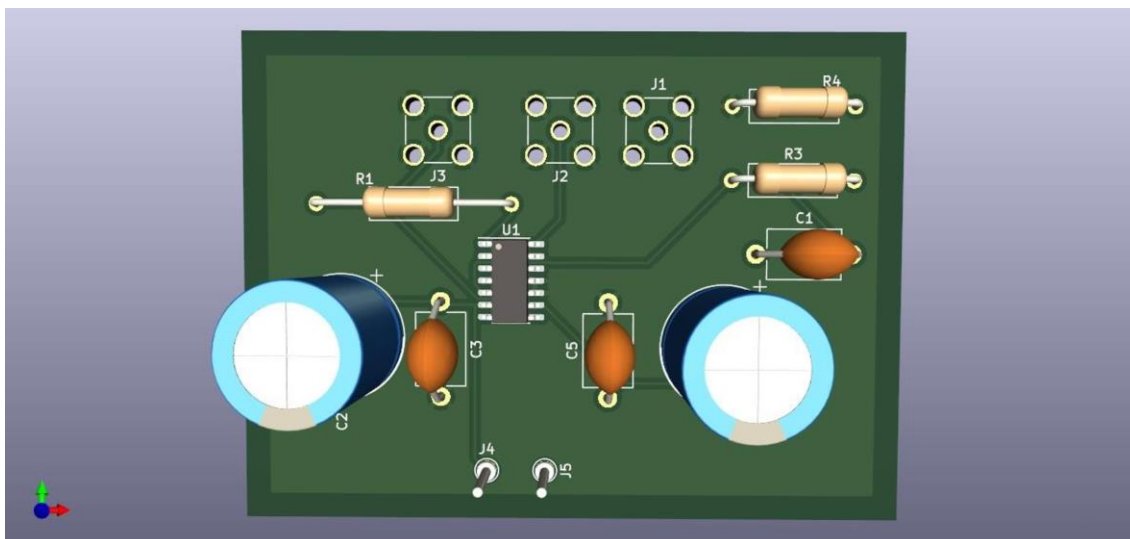
vyhlášení výsledků

Návrh logaritmického zesilovače pro měření odporu s využitím IO LOG 112.

Michael Hemza (B3)

Školitel: Ing. Přemysl Fitl, Ph.D.

Při měření odezvy polovodičových senzorů může dojít při velké změně jejich odporu k samočinnému přepnutí měřicího rozsahu, což může zapříčinit ostrý zlom v záznamu odporu. Pro eliminaci tohoto jevu lze měřit odpor logaritmickým zesilovačem. Běžné konstrukce využívají operačního zesilovače a polovodičového prvku ve zpětné vazbě. Nevýhodou takového řešení i přes složité vnější kompenzace je teplotní nestabilita zapojení. Zmíněný nedostatek lze vyřešit vyšší mírou integrace, kdy veškeré nutné součástky se nacházejí v jednom pouzdře. To je i případ zvoleného IO LOG 112. Poměr proudů vstupujících do obvodu je možné měnit v rozmezí několika řádů. Výstupní napětí je přímo úměrné logaritmu podílu vstupujících proudů. Měřicí napětí bylo zvoleno 1 V a je odvozeno od vnitřní reference IO. Referenční odpor je 1 k Ω . Zapojení je obměnou katalogového, simuloval jsem v programu Tina-TI. Simulace přinesla uspokojivé výsledky, postavil jsem tedy obvod na nepájivém poli přípravku Elvis. Vyzkoušel jsem i velké hodnoty odporů, např. 2 G Ω , a zapojení fungovalo správně, ale už se projevily nedokonalosti provizorní konstrukce. Návrh DPS jsem provedl v KiCADu. Cílem je integrovat do jedné krabičky logaritmický zesilovač spojený s A/D převodníkem i topení a hlídání teploty měřeného senzoru.



Studie opakovatelnosti a optimalizace přípravy nanočástic křemíku pomocí netermálního nízkotlakého plazmatu

David Kavka (B3)

Školitel: RNDr. Pavel Galář, Ph.D.

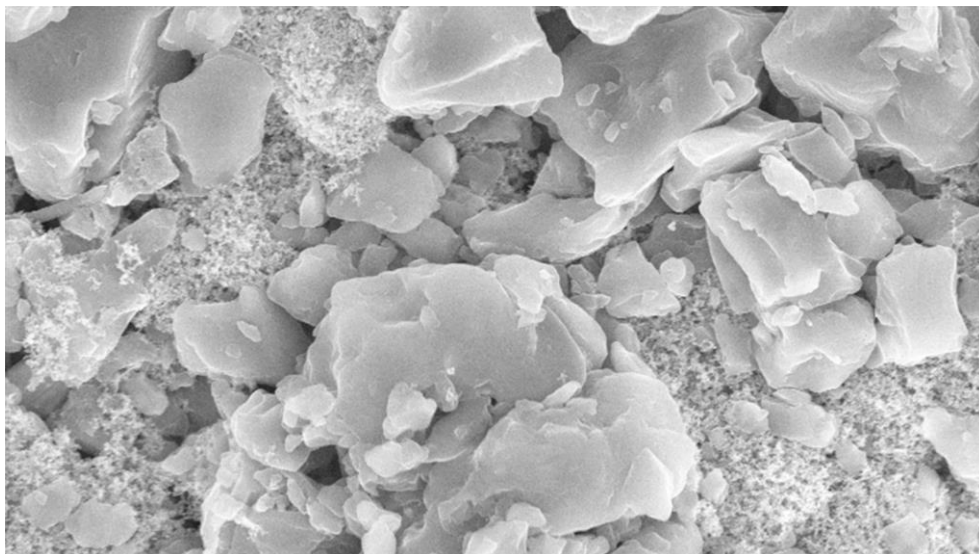
Křemíkové nanoformy tvoří aplikačně velmi atraktivní skupinu nanomateriálů kombinujících polovodičové vlastnosti objemového křemíku a vlastností získaných vlivem vysokého poměru povrchu ku objemu a kvantového rozměrového jevu. Výjimečné postavení mezi křemíkovými nanoformami mají křemíkové nanokrystaly (SiNK) vykazující efektivní generaci světla, mechanickou odolnost nebo povrchovou reaktivitu, čehož se dá využít například v medicíně, fotonice nebo Li-ion bateriové technologii. Problémem tohoto materiálu je absence efektivní a precizní metody jeho syntézy. Mezi současně nejperspektivnější postupy syntézy SiNK patří metoda využívající nízkotlakého netermálního plazmatu (NTP). Metoda NTP je založena na disociaci pracovního plynu obsahujícího křemík pomocí netermálního plazmatu za následného formování křemíkových nanočástic. Přestože je tato metoda schopna až řádově vyššího výtěžku než ostatní postupy přípravy SiNK, je velmi citlivá na přesné nastavení a udržení syntetizačních parametrů. Cílem této práce je mapování opakovatelnosti aparatury na přípravu SiNK pomocí NTP, studium vlivu různých parametrů na kvalitu vzniklých nanočástic, což by mělo vést k zvýšení kvality vzniklých nanočástic a zjednodušení úpravy podmínek přípravy na základě nedostatků připravených nanočástic.

Superkondenzátory založené na vodných elektrolytech s vysokou koncentrací solí

Radim Weisser (B3)

Školitel: RNDr. Pavel Galář, Ph.D.

Současná energeticky náročná doba klade velký důraz na efektivní úschovu elektrické energie. Aktuálně nejběžnějším způsobem úschovy elektrické energie jsou baterie, které jsou schopny pojmout relativně velké množství energie ve formě elektrochemických reakcí, ale nejsou schopny tuto energii přijímat nebo vydávat v krátkém časovém úseku. Tento problém odpadá v případě uskladnění elektrické energie v superkondenzátorech, což jsou elektrochemická zařízení schopná uschovat elektrickou energii ve formě elektrostatického pole. Superkondenzátory sice nemají tak vysokou hustotu energie jako baterie, ale za to mají vysoký okamžitý měrný výkon. Díky principu svého fungování mají superkondenzátory také vysokou cyklickou životnost. Ve své práci zkoumám vlastnosti superkondenzátorů typu EDLC (Electrostatic Double-Layer Capacitor). Jako materiál pro elektrody je využit aktivní uhlík a jako elektrolyt vodný roztok o vysoké koncentraci chloristanové soli. Dosavadní experimenty s těmito superkondenzátory ukázaly příznivé hodnoty svorkového napětí, díky poměrně širokému elektrochemickému oknu stability elektrolytu. Cílem práce je zkoumat vlastnosti superkondenzátorů s vodnými elektrolyty a elektrodami připravenými z aktivního uhlíku, přičemž se i snažit tyto vlastnosti optimalizovat.

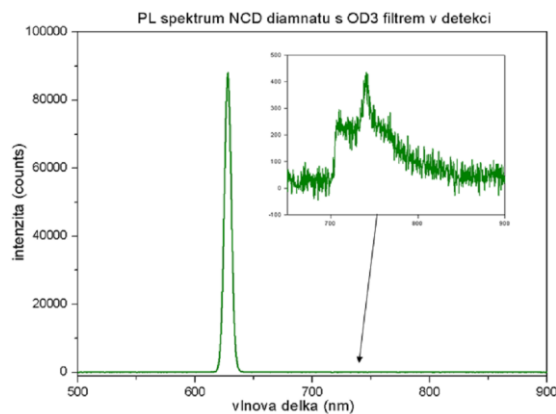


Studium kvantového výtěžku fotoluminiscence křemíkových vakancí v diamantu

Bc. Tereza Černá (M2)

Školitel: RNDr. Pavel Galář, Ph.D.

Diamantová barevná centra jsou defekty diamantové mřížky, které mohou vyzařovat jednotlivé fotony. Jejich vlastnosti jsou vhodné pro kvantové výpočty, metrologii a senzoriku. Jedním ze slibných barevných center jsou křemíkové centra (SiV). SiV centra se skládají z atomu křemíku umístěného mezi dvěma neobsazenými místy v diamantové mřížce. Mezi další zajímavá barevná centra patří cínová nebo germániová. Zmíněná centra mají velmi úzkou emisní čáru oproti například dusíkovým centrům, nicméně jejich jas je relativně nízký. Předmětem práce je měření kvantového výtěžku na různých vzorcích diamantu. Kvantový výtěžek se zkoumá pro lepší porozumění příčiny nižšího jasů SiV center. Měření se provádí na vzorcích s různým postupem přípravy, jedná se o nanokrystalické diamanty, diamanty připravené metodou depozice chemický par (CVD) a monokrystalické diamanty. Diamantové vrstvy vznikající metodou CVD jsou velice citlivé na podmínky syntézy, lze při ní tedy vytvářet série vzorků s kontrolovaným množstvím center. Zároveň lze takto ovlivňovat samotnou strukturu vzorku (menší a větší diamantová zrna ve vrstvě). Dalším krokem bude měření dozrívání fotoluminiscence. Tato data by dohromady měla poskytnout dostatek informací, aby mohla být objasněna fyzikální příčina nízkého jasů SiV center.



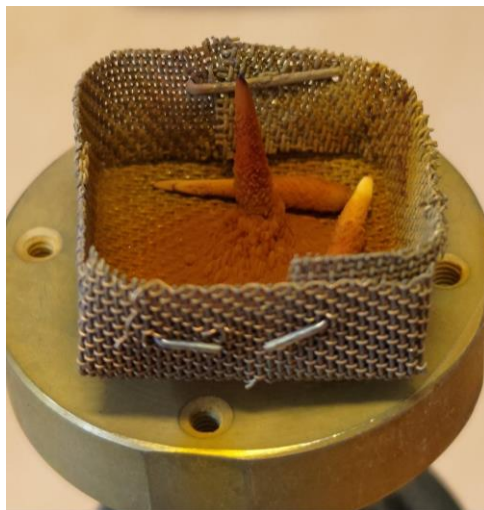
Obrázek: PL spektrum NCD diamantu s SiV- centry při excitaci pulsním laserem o vlnové délce 630 nm a výkonu 180 μW s OD3 filtrem v detekci, v pravém rohu je detail emisního piku center s FEL700 filtrem v detekci

Studium vznětlivosti a uvolněné energie při hoření křemíkových nanočástic

Bc. Jakub Kopenec (M2)

Školitel: RNDr. Pavel Galář, Ph.D.

Křemíkové nanostruktury jsou cestou, která rozvíjí již rozsáhlé možnosti využití křemíku(Si). Jednou překážkou jejich masového využití je náročná syntéza, která je s vysokým materiálovým výtěžkem téměř nemožná. Jednou z nejefektivnějších metod je syntéza pomocí netermálního plazmatu ze silanu. Si nanočástice(SiNPs)syntetizované tímto způsobem mají, oproti jiným metodám, téměř desetinásobný výtěžek, a navíc vykazují i dobrou krystalinitu a povrchové vlastnosti. SiNPs vyrobené touto metodou však mohou obsahovat velké množství povrchově vázaného vodíku(H_2). To je na jednu stranu dobrá vlastnost pro aplikace spojené s uskladňováním H_2 , ale současně díky růstu jejich vznětlivosti i omezující faktor pro jejich využití například v technologii Li-Ion baterií, kde se využívají v hybridních elektrodách. V této práci jsme se zaměřili na studium vlivu podmínek syntézy(s tím spojené struktury a povrchové chemie SiNPs)na jejich vznětlivost a na hodnoty uvolněné energie hoření. Naše měření ukázala, že s růstem množství vodíku v pracovním plynu nedochází pouze ke změně struktury SiNPs a povrchové chemie, ale také ke zvýšení jejich vznětlivosti a vyšším hodnotám spalovací energie. V extrémních situacích jsme byli schopni syntetizovat SiNPs vznětlivé při již $140^{\circ}C$ a o spalovací energii 7613 cal/g .

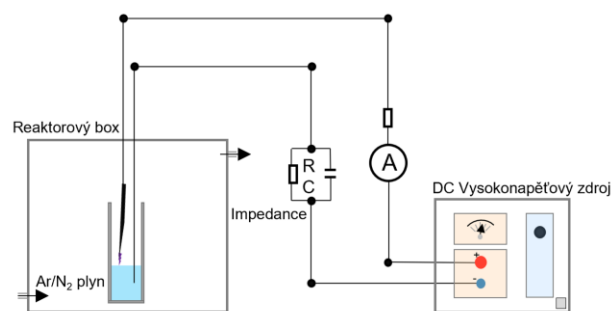
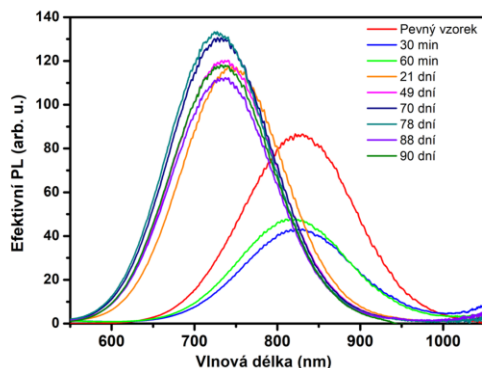


Interakce plazmového výboje s kapalinami za vzniku prostředí vhodného pro terminaci povrchu křemíkových nanočástic

Bc. Filip Matějka (M2)

Školitel: RNDr. Pavel Galář, Ph.D.

Plazmatický výboj má mnoho aplikací v průmyslu i výzkumu při interakcích s materiály. Nízkoteplotní plazma (NTP) je vhodné pro měkké interakce s organickým materiály. Je využito i jako mediátor pro chemické reakce na površích anorganických materiálů, např. aktivace kapalin, kde NTP generuje reaktivní prostředí. Tato práce pojednává o využití NTP k aktivaci organických kapalin za účelem následné cílené terminace křemíkových nano-krytalů (SiNK). Cílená změna povrchové chemie SiNK je významný a obtížně upravitelný parametr, který umožňuje zásadně měnit jejich fyzikálně-chemické vlastnosti (fotoluminiscenci (PL), reaktivitu, dispergovatelnost). Pro generaci reaktivního prostředí (aktivaci kapalin) byla využita pulsní přechodová jiskra umístěná v navrženém boxu, plněném dusíkem či argonem pro zamezení odparu a stabilizaci výboje. Byly zkoumány molekuly, jejichž struktura vykazuje dipóly (např. ethanol), pro zajištění interakce elektronů s molekulami (výboje s kapalinou), a molekuly s dvojnou vazbou. Efekt modifikace povrchu SiNK je charakterizován na základě změny PL vlastností. Povrchová chemie je studována pomocí FTIR spektroskopie a afinita k prostředí pomocí DLS. Efektivní aktivaci a modifikaci SiNK lze provést i pro anorganické látky (vodu), měření jsou uvedena jako referenční.



Automatizace ultrazvukové defektoskopie

Bc. David Müller (M2)

Školitel: Ing. Přemysl Fitl, Ph.D.

Defektoskopie neboli nedestructivní testování je soubor metod používaných pro odhalení vad ve výrobku, aniž by došlo k jeho poškození. Jednou z velmi často využívaných je právě ultrazvuková metoda. Pomocí ultrazvuku lze odhalit vady materiálu pod povrchem. Testovaný výrobek má často velmi komplexně členitý povrch – například karoserie automobilu a jeho inspekce zabere spoustu času. Automatizace takového procesu není jednoduchá a zvládnutí takového úkonu vyžaduje nasazení speciálních robotů s využitím umělé inteligence. Práce probíhá s využitím 6-osé robotické paže Fanuc. Software je vyvíjen v prostředí NI LabView za pomoci komerčně dodávané knihovny k ovládání robota – Digimetrix. Architektura softwaru se skládá z 5 modulů: modul pro sběr dat z měření ultrazvukového signálu, modul pro zpracování signálu, modul pro ovládání robota, modul pro navigaci robota a modul grafického rozhraní aplikace. Měření zpočátku probíhalo na etalonech se svary o známé kvalitě s cílem změřit optimální přítlak a možné odchýlení ultrazvukové sondy. Cílem práce je vyvinout software pro automatické vyhodnocení kvality bodových svarů na karoserii automobilu.

Ústav fyziky a měřicí techniky B

MÍSTO: B212

KOMISE

doc. Jaroslav Hofmann, CSc (předseda)

RNDr. Kateřina Kůsová, Ph.D.

Ing. Anna Machková

Dr. Mgr. Jirešová Jana

Ing. Fišer Ladislav, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Hana Josífková](#) (B3, Ing. Josef Khun, Ph.D.)

Studium změn fyzikálních a chemických vlastností oxidu cíničitého po expozici netermálním plazmatem

09:20 [Bc. Jakub Dufek](#) (M2, Ing. Ladislav Fišer, Ph.D.)

Oživení senzorů oxidu uhličitého, uhelnatého a kyslíku

09:40 [Bc. Anna Hodžiová](#) (M2, Dr. Mgr. Jana Jirešová)

*Studium růstu plísně rodu *Aspergillus* na živném médiu a na dřevovláknitých deskách*

10:00 [Bc. Jan Hrudka](#) (M2, doc. Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.)

Akcelerace mikrobiologických výzkumů za využití strojového učení

10:20 [Bc. Michal Jankovský](#) (M2, doc. Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.)

*Inhibice růstu *Trichophyton interdigitale* s použitím nízkoteplotního plazmatu a bengálské červeně*

10:40 [Bc. Jitka Štefková](#) (M2, Ing. Ladislav Fišer, Ph.D.)

Návrh a realizace komory pro experimenty s chemirezistory založenými na nanodrátech

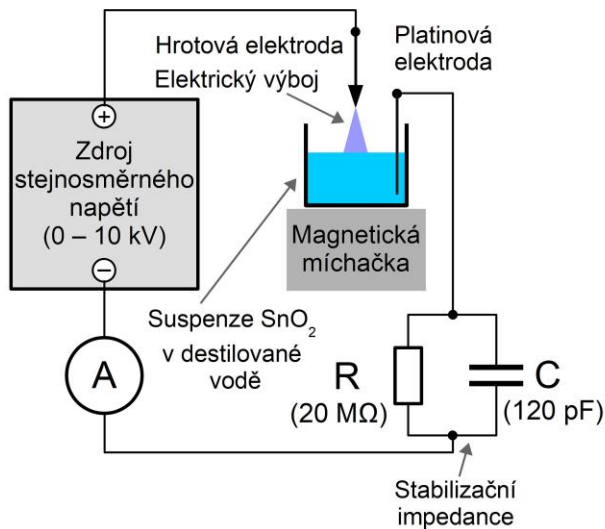
vyhlášení výsledků

Studium změn fyzikálních a chemických vlastností oxidu cíničitého po expozici netermálním plazmatem

Hana Josífková (B3)

Školitel: Ing. Josef Khun, Ph.D.

Oxid cíničitý je jednou z klíčových složek výroby chemických senzorů pro detekci plynů. Disponuje však vlastnostmi, které bychom u látek používaných v senzorech chtěli odstranit, například příliš dlouhá doba regenerace, nebo špatná odezva na nízké koncentrace. Jedním ze způsobů nedestruktivní modifikace je expozice suspenze oxidu cíničitého a destilované vody netermálním plazmatem. Úprava suspenze byla provedena pomocí elektrického výboje typu přechodová jiskra, který byl generován v geometrii elektrod hrot-rovina. Hrotovou elektrodu tvořila lékařská jehla a rovinnou elektrodu povrch exponované suspenze, viz obr. 1 vlevo. Při tomto procesu dochází ke generaci reaktivních částic do vodného prostředí, kterými jsou například oxidy dusíku, OH radikály, peroxid vodíku, a s tím spojeným změnám pH a struktury vlivem zabudování rozpuštěných reaktivních molekul do původně čistého oxidu cíničitého s krystalickou mřížkou typu rutil. Cílem práce bylo tyto změny po expozici netermálním plazmatem prozkoumat, proto byla provedena analýza vzniklé upravené suspenze i samotného produktu, viz obr. 1 vpravo, a určit možné aplikace takto modifikovaného oxidu cínu.



Oživení senzorů oxidu uhličitého, uhelnatého a kyslíku

Bc. Jakub Dufek (M2)

Školitel: Ing. Ladislav Fišer, Ph.D.

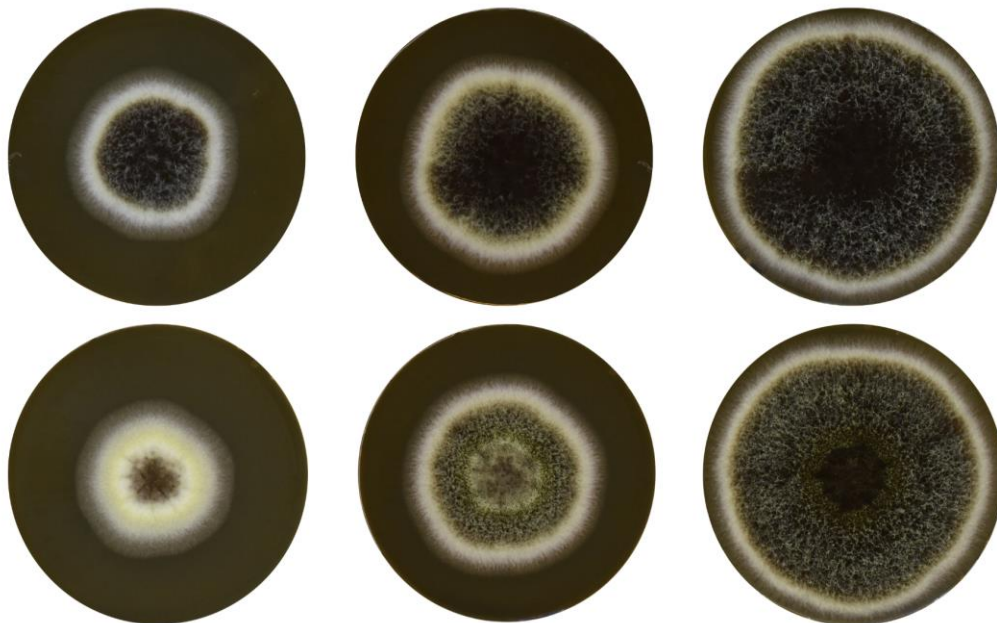
Téma ukládání elektrické energie je v dnešní době obzvláště důležité. Vznikl nápad, že by se v případě přebytku dala elektřina použít ke generování nízkoteplotního plazmatu, které by rozkládalo CO_2 na CO , jenž by se dal dále využít. Celý proces se však musí nejdříve optimalizovat na spoustě experimentů, které je nutno správně měřit. A to je náplní této práce – zajištění funkčnosti a přesnosti měřicích senzorů. Konkrétně senzorů pro měření CO_2 , CO a O_2 . Nejjednodušší bylo zprovoznění senzoru na měření CO , protože k němu byl dodaný hotový elektronický obvod i počítačový software, tudíž se po jeho zapojení dala ihned odečítat koncentrace měřeného plynu. Naopak ke zprovoznění senzoru na měření O_2 se musela veškerá elektronika nejdříve správně spájet a teprve pak se dal z multimetru odečítat výstupní proud úměrný koncentraci plynu. Senzor na měření CO_2 vyžadoval pro svůj správný chod také vytvoření elektronického obvodu, ale navíc se k němu musel vytvořit i program pro zpracování vycházejícího signálu. Následně byla na senzorech provedena měření se známými koncentracemi plynů, aby se vyzkoušel jejich správný chod a zjistila se závislost výstupní veličiny senzoru na koncentraci měřeného plynu.

*Studium rústu plísne rodu *Aspergillus* na živnom médiu a na drevovláknitých deskách*

Bc. Anna Hodžiová (M2)

Školiteľ: Dr. Mgr. Jana Jirešová

Plesne vyskytujúce sa v budovách znižujú kvalitu vzduchu a ich výskyt môže obyvateľom spôsobovať zdravotné ťažkosti. Ide o rôzne dýchacie a kožné problémy, pričom pre ľudí s astmou predstavujú vyššie riziko. Predmetom výskumu je účinok nízкотеплотnej plazmy na tieto plesne. Plazma má deaktivujúci efekt na baktérie, kvasinky a plesne, ktorý je kombináciou UV žiarenia, elektrického poľa a reaktívnych častíc. Vďaka tomu, by plazma mohla potenciálne slúžiť na likvidáciu plesní. Pre experiment bola vybraná plesň rodu *Aspergillus*, ako zástupca plesní bežne sa vyskytujúcich v interiéri. Zatiaľ bol študovaný rast plesne na živnom médiu pri rôznych teplotách a rast plesne na drevovláknitých doskách ako simulácia podmienok, aké majú plesne v budovách. Na jednu sadu, ktorá bola pestovaná na živnom médiu, bola aplikovaná plazma.

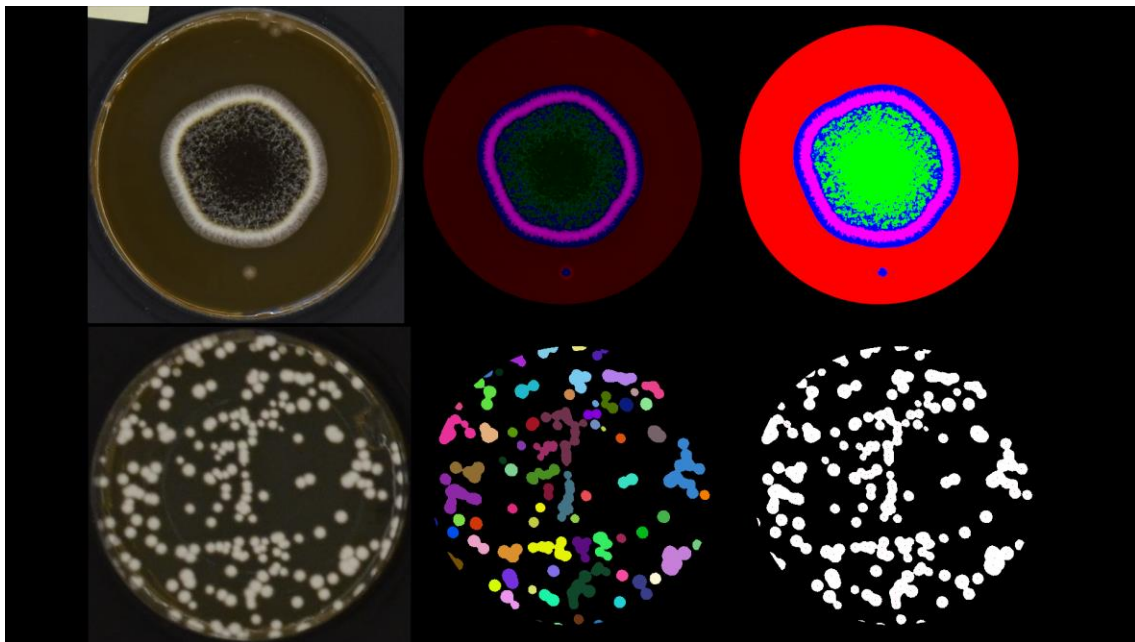


Akcelerace mikrobiologických výzkumů za využití strojového učení

Bc. Jan Hrudka (M2)

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 obvykle využívá softwarů, které nedokáží z fotografií kultur samostatně vyhodnotit zastoupení mikromycet, a je tak potřeba manuální asistence pracovníka u každé z fotografií, což je značně neefektivní, nepřesné a nespolehlivé, což doposud značně omezovalo výzkumnou činnost v této oblasti. Platforma Aurora je projekt, kterému se již několik let věnuji a představuje potenciální řešení problémů spojených s vyhodnocováním mikrobiálních výzkumů.



Inhibice růstu *Trichophyton interdigitale* s použitím nízkoteplotního plazmatu a bengálské červeně

Bc. Michal Jankovský (M2)

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

Motivací této studie je onychomykóza. Mykotické onemocnění nehtů na rukou, nohou a meziprstních prostor. Toto onemocnění způsobují dermatofytní kmeny mikromycet a kvasinky. Nejčastějšími původci jsou dermatofytní kmeny *Trichophyton rubrum* a *Trichophyton interdigitale*. Onychomykóza postihuje odhadem 10 – 20 % celosvětové populace a více než polovina všech jejích výskytů je u osob nad šedesát let. Onychomykóza může pacientům způsobit psychosociální komplikace a je obzvláště nebezpečná pro diabetiky či imunokompromitované osoby. Samotná léčba onychomykózy je značně náročná a časově zdoluhavá. Cílem studie je zjistit, zda bengálská červeně ve spojení s nízkoteplotním plazmatem významně zvýší inhibici růstu mikromycet. Předběžné výsledky poukazují na synergii bengálské červeně a netermálního plazmatu, protože jejich kombinace vykazuje významně silnější inhibici růstu, než když je použijeme separátně.



Návrh a realizace komory pro experimenty s chemirezistory založenými na nanodrátech

Bc. Jitka Štefková (M2)

Školitel: Ing. Ladislav Fišer, Ph.D.

Má práce spočívá ve vypracování 3D modelu měřicí komory, pro měření koncentrace různých plynů. Dále jsem se zabývala syntézou nanodrátů Cu_2O . Komora byla vytisknuta a osazena dalšími součástkami. Aparatura se skládala z keramického topného tělíska, Pt100 teploměru a průchodek pro napájení celého systému. Jako senzor byl použit chemirezistor na který jsem syntetizovala nanodráty Cu_2O . Pro prvotní pokusy byl využit materiál komory filament PLA, který na další pokusy bude nahrazen materiálem PEEK, který volím, kvůli jeho inertním vlastnostem.

Ústav počítačové a řídicí techniky (445)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Iva Nachtigalová, Ph.D.

SEZNAM SEKČÍ

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

Aplikovaná informatika a kybernetika I

MÍSTO: A40

KOMISE

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

Ing. Darina Bártová, Ph.D.

Mgr. Markéta Zikmundová, Ph.D.

Mario Vazdar, Ph.D.

PROGRAM

08:15 **zahájení**

08:30 [Jakub Ciler](#) (B3, Ing. Martin Schätz, Ph.D.)

Vývoj aplikace pro klasifikaci míry asymetrie v obličeji

08:50 [Bc. Lukáš Hospodár](#) (M1, Ing. Jan Vrba, Ph.D.)

Prediktívne riadenie systému dvoch reaktorov so separátorom

09:10 [Kevin Klee](#) (B3, Ing. Jan Vrba, Ph.D.)

Program pro vyhodnocení dat z kyslíkové sondy

09:30 [Lucie Kolumpková](#) (B3, Ing. Martin Schätz, Ph.D.)

Měření tepové frekvence pomocí videa z RGB kamery

09:50 [Bc. Lukáš Marek](#) (M1, Ing. Jan Kohout, Ph.D.)

Time series alignment with focus on DTW algorithm

10:10 [Eliška Paulíková](#) (B3, doc. Ing. Jitka Čejková, Ph.D.)

Studium rotace tekutých robotů prostřednictvím obrazové analýzy

10:30 [Jakub Seiner](#) (B3, Ing. Jan Vrba, Ph.D.)

Počítačová aplikace usnadňující využití detekce novosti

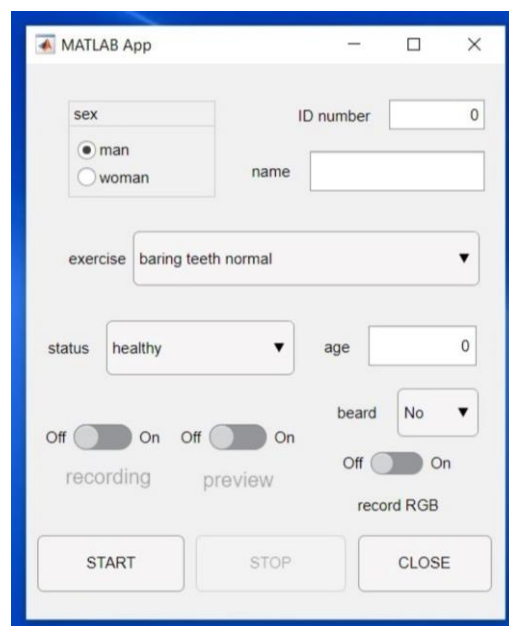
vyhlášení výsledků

Vývoj aplikace pro klasifikaci míry asymetrie v obličeji

Jakub Ciler (B3)

Školitel: Ing. Martin Schätz, Ph.D.

I v dnešní počítačové době se v medicíně řada vyšetření vyhodnocuje manuálně a je z velké části ovlivněna lidským faktorem. Například při operaci rovnovážného ústrojí dojde k přerušení lícního nervu a tím k ochrnutí obličeje. To, zda se stav pacient po operaci zlepšuje, hodnotí doktor na základě cviků. Proto je naším cílem vytvořit aplikaci, která by byla schopna objektivně tyto cvičení hodnotit. Prostřednictvím Kinectu se zaznamenává s frekvencí 7-8 Hz 1347 bodů na obličeji pacienta, který provádí cvik s přesně definovanými pravidly. Pro ovládání celého nahrávání je vytvořeno GUI, jednoduché dialogové okno s informativními a ovládacími prvky, které slouží k řízení celého procesu a k získu důležitých dat o pacientovi. Výsledkem nahrávání je získání tří prostorových souřadnic pro každý bod v čase. Zpracovávat všechny body by bylo v pilotním výzkumu náročné, proto se používá 40 vybraných dvojic bodů, které využíváme k vyhodnocení stavu pacienta. Pro ty jsou v programovacím jazyce Python spočítány vzájemné úhly vůči referenční rovině a vzájemné vzdálenosti mezi body. Tyto znaky slouží ke klasifikaci míry postižení pacienta. V budoucnu by výsledkem celého výzkumu měla být aplikace, která bude klasifikovat míru postižení pacienta. Dalším cílem je zvýšení nahrávací frekvence na 12-15 Hz.



Prediktívne riadenie systému dvoch reaktorov so separátorom

Bc. Lukáš Hospodár (M1)

Školiteľ: Ing. Jan Vrba, Ph.D.

Práca sa zaoberá modelovaním a návrhom riadenia pre komplexný systém dvoch reaktorov zapojených do série so separátorom. Cieľom práce je vytvoriť návrh riadenia pomocou MPC (z angl. Model Predictive Control) a analyzovať výsledky riadenia. V oboch reaktoroch prebieha rovnaká chemická reakcia, pričom v separátore sa jednotlivé zložky od seba oddelia a neprebíha v ňom už žiadna chemická reakcia. Práca sa postupne zaoberá modelovaním a identifikáciou parametrov systému. Následne sa venuje vhodnej voľbe riadiacich a riadených veličín pre simulačné riadenie modelu vzhľadom na fyzikálno-chemické vlastnosti chemickej reakcie prebiehajúcej v chemických reaktoroch a vzhľadom na zachovanie pomyselnéj bezpečnosti a prevádzkyschopnosti tejto sústavy. Na návrh a simuláciu riadenia sa v tejto práci použilo prostredie MATLAB a Simulink. Dôležitou časťou je linearizácia modelu riadeného systému pre potreby návrhu prediktívneho riadenia. Riešenie optimalizačného problému vznikajúceho pri prediktívnom riadení prebiehalo pomocou knižnice YALMIP v prostredí MATLAB. V závere práce sa nachádza podrobná analýza výsledkov riadenia.

Program pro vyhodnocení dat z kyslíkové sondy

Kevin Klee (B3)

Školitel: Ing. Jan Vrba, Ph.D.

V řadě průmyslových procesů je klíčovým dějem mezifázový transport hmoty. Například v bioreaktorech je důležitý transport kyslíku do kapalné fáze. Z pohledu modelování tohoto transportu je podstatné stanovit objemový koeficient přestupu hmoty k_La . Na VŠCHT v Laboratoři sdílení hmoty byla vyvinuta dynamická tlaková metoda pro experimentální stanovení k_La v mechanicky míchané disperzi kapalina-plyn. Tato práce se zabývá vytvořením programu pro vyhodnocení k_La z experimentálně získaných dat. Pro tento účel se vyvíjí aplikace v programovacím jazyce Python, která umožní uživatelům prostřednictvím grafického uživatelského rozhraní načíst data z jednotlivých experimentů, vyhodnotit je, vizualizovat výsledky a následně je exportovat do excelu.

Měření tepové frekvence pomocí videa z RGB kamery

Lucie Kolumpková (B3)

Školitel: Ing. Martin Schätz, Ph.D.

V posledních letech nás všechny ovlivnila nemoc COVID–19 a dostat se k lékaři byl často až nadlidský úkol. Proto vznikl tento projekt, který má za cíl zjednodušit bezkontaktní vyšetření pacientů v dalších vlnách pandemie. Pomocí předtočeného videa z obyčejného telefonu s RGB kamerou se můžeme zaměřit na určité oblasti obličeje, kde dochází k vysokému prokrvení – ústa, čelo, tváře. Analýzou průměrných hodnot absorpce zeleného záření hemoglobinem, který absorbuje na téměř celé oblasti (520-565 nm), dokážeme následným zpracováním dat určit prozatím přibližnou tepovou frekvenci. Vizí do budoucna je vytvoření aplikace pro měření tepové frekvence z live videa.

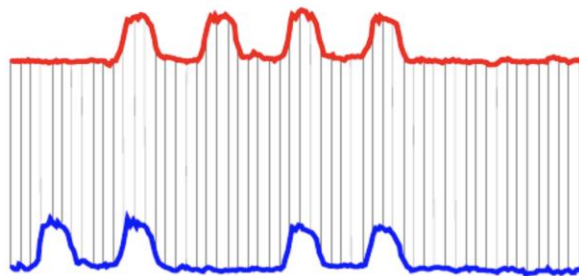
Time series alignment with focus on DTW algorithm

Bc. Lukáš Marek (M1)

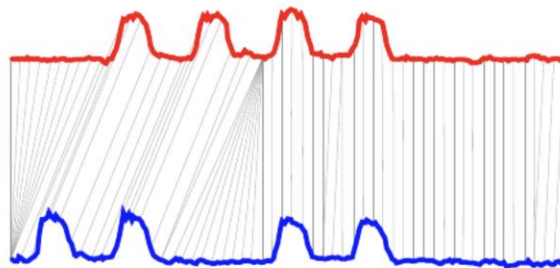
Školitel: Ing. Jan Kohout, Ph.D.

Large portion of measurements in signal processing, speech recognition or bioinformatics come in the form of time series. Data processing techniques are then used for pattern recognition or sequence matching. One caveat here is the fact that measurements are usually shifted in time domain (out of phase) or they differ in speed. Thus arises the need for time domain alignment as one form of data preprocessing. Common techniques of time series alignment is indexing based on Euclidean distance metric. However, it was shown that this technique is not very effective especially when there is variation in speed between the time series. One powerful and widely used alternative is the Dynamic Time Warping. DTW uses a metric based on minimizing the warping cost and thus allows for much more accurate and complex alignment. In this work we compare different implementations of the DTW algorithm and discuss ways to apply DTW to multiple time series. (1) Casas, P. *Data Science Live Book*.

Based on euclidean distance



Based on Dynamic Time Wrapping

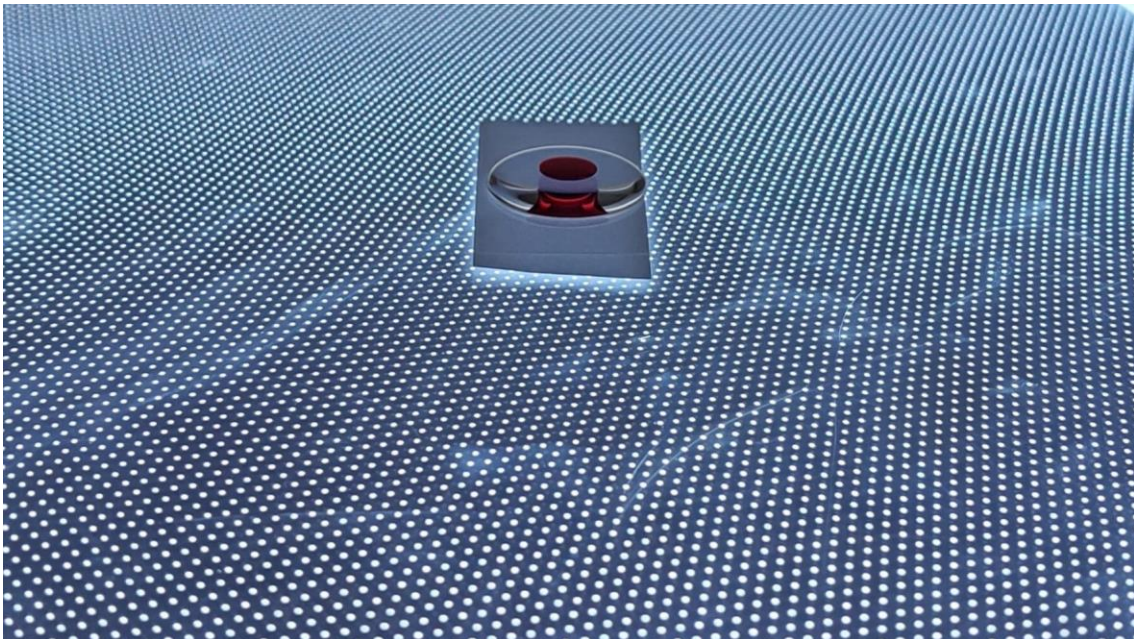


Studium rotace tekutých robotů prostřednictvím obrazové analýzy

Eliška Paulíková (B3)

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

Tak jako se živé systémy dokáží pohybovat ve svém prostředí, tak i neživé systémy jsou těchto pohybů v některých případech schopny. Námi studovaným umělým systémem jsou tekutí roboti, kteří se svým chováním a schopností pohybu podobají živým organismům. Bylo pozorováno, že se tekutí roboti v podobě kapek dekanolu v prostředí dekanoátu sodného dokáží kontrolovaně pohybovat v gradientech solí a hydroxidů a jsou také jakožto chemické „taxíky“ schopni přepravovat fyzické předměty na nich umístěné. Položíme-li na kapku dekanolu vlas, či jiný objekt, můžeme pozorovat, jak robot rotuje a otáčí objektem. Rotace může trvat až několik hodin v závislosti na velikosti robota. V rámci této práce byla sestavena aparatura pro snímání experimentů v temném prostředí a provedeny experimenty s kapkami na mikroskopických sklíčkách. Cílem práce bylo vyvinout metodiku pro vyhodnocení experimentů pomocí analýzy obrazu prostřednictvím programovacího prostředí Matlab.



Počítačová aplikace usnadňující využití detekce novosti

Jakub Seiner (B3)

Školitel: Ing. Jan Vrba, Ph.D.

Algoritmy detekce novosti v časových řadách mají značné využití v celé řadě oborů. Například ve zdravotnictví při detekci demence z EEG signálů nebo v chemickém průmyslu při monitoringu technologických procesů. Tato práce se zabývá i praktickou aplikací detekce novosti v chemickém průmyslu, a to detekcí úniku kapaliny z potrubí pomocí analýzy zaznamenaného zvuku u potrubí a čerpadla. Jedním z možných přístupů k detekci novosti je využití adaptivních metod, které jsou implementovány v knihovně PADASIP. Širokému využití neodbornou veřejností této knihovny ale brání zejména nutnost umět programovat v jazyce python, a proto bylo v rámci této bakalářské práce vypracováno GUI, díky kterému již programovací schopnosti nejsou zapotřebí. Uživatel si pouze nahraje soubor s daty do aplikace a zvolí několik počátečních parametrů (např. rychlost učení, délka filtru, atd...) a může se soustředit pouze na analýzu. Důraz byl kladen i na možnou reprodukovatelnost výsledků, jejich uložení a možnost porovnávat jednotlivé nastavení, a proto je možno veškeré grafy a informace o nastavení automaticky ukládat pro pozdější analýzu, případně provádět analýzu při rozdílných nastaveních najednou. Použitelnost uživatelského rozhraní je demonstrována právě na analýze zvukových záznamů s únikem kapaliny.

Aplikovaná informatika a kybernetika II

MÍSTO: A335

KOMISE

Ing. Jan Vrba, Ph.D. (předseda)

doc. Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D.

RNDr. Lenka Červená, Ph.D.

Ing. Lukáš Mrazík

PROGRAM

08:15 **zahájení**

08:30 [Bc. Islam Baigaliyev](#) (M2, Ing. Olga Rubešová)

Development of the sensor system for electric vehicle charging infrastructure

08:50 [Bc. Ondřej Golda](#) (M2, Ing. Jan Vrba, Ph.D.)

Realizace systému pro měření objemového koeficientu přestupu hmoty

09:10 [Bc. Tomáš Jirsa](#) (M2, Ing. Jan Vrba, Ph.D.)

Generování syntetických obrazů gelových mikrorobotů

09:30 [Bc. Monika Pešková](#) (M2, doc. Ing. Pavel Hrnčířík, Ph.D.)

Software sensors based on artificial neural networks for advanced bioprocess monitoring

09:50 [Bc. Ondřej Skládal](#) (M2, doc. Ing. Dušan Kopecký, Ph.D.)

Komunikace s aplikačním rozhraním meteorologické stanice a vizualizace dat

10:10 [Bc. Jakub Tomeš](#) (M2, Ing. Olga Rubešová)

Application of machine learning in smart vehicle charging

10:30 [Bc. Ondřej Vácha](#) (M2, doc. Ing. Jan Mareš, Ph.D.)

Vývoj mobilní aplikace pro sběr a analýzu biomedicínských dat

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

Development of PLGA-based nanocarriers for co-delivery of colchicine and purpurin-18

vyhlášení výsledků

Development of the sensor system for electric vehicle charging infrastructure

Bc. Islam Baigaliyev (M2)

Školitel: Ing. Olga Rubešová

Recently, electric cars are gaining more and more popularity, due to their efficiency, environmental friendliness, and ease of maintenance. As the popularity of electric vehicles grows, so does the need to expand the electric vehicle charging infrastructure. However, sometimes the problem is that parking spaces for charging are occupied by cars that do not need it. As a result, EV owners are unable to charge and revenue from charging stations are lost. The goal of this project is to develop the system for determining the presence of a car in a parking space. The main task was to choose the most suitable sensors for this project. Several types of sensors were chosen: 9DOF, 3-axis magnetometer, wide and narrow angle ultrasonic. All sensors are connected to system controlled by single-board computer. IP-camera is used as an additional monitoring device. Now, the entire system is connected and working properly. The connection is implemented using Python3 and CircuitPython. Also, part of the system is a local network, which is used for remote control of SBC. To visualize real-time information from sensors, we use a programmable LEDs. Currently, the project is at the testing stage, the data from experiments are analyzed using visualization in Python.

Realizace systému pro měření objemového koeficientu přestupu hmoty

Bc. Ondřej Golda (M2)

Školitel: Ing. Jan Vrba, Ph.D.

Tento chemicko-inženýrský projekt má za cíl vytvořit systém pro laboratorní měření objemového koeficientu přestupu hmoty, který je klíčovým parametrem pro výpočet aerační kapacity bioreaktorů. Přímé využití tohoto laboratorně naměřeného koeficientu spočívá v navrhování bioreaktorů a určování optimálních rychlostí otáček míchadel v těchto zařízeních. Práce je založena na spolupráci mezi ústavem Počítačové a řídicí techniky a ústavem Chemického inženýrství na VŠCHT Praha a poskytuje studentské řešení komplexního chemicko-inženýrského projektu, který se zabývá jak hardware tak software problematikou. Blíže se pak projekt dotýká témat analýzy stávajícího řešení, návrhu nových koncepcí řešení, kompletace akčních členů a senzorů, vlastní implementace a výroby částí aparatury na míru tomuto projektu za využití 3D tisku, návrhu a řešení elektroinstalace a v neposlední řadě softwarové stránky celého systému.

Generování syntetických obrazů gelových mikrorobotů

Bc. Tomáš Jirsa (M2)

Školitel: Ing. Jan Vrba, Ph.D.

Hydrogeloví roboti jsou malé objekty s rozměrem v řádu stovek mikrometrů, které lze ovládat pomocí laserového paprsku. Vzhledem k jejich velikosti, experimenty s nimi probíhají pod mikroskopem. Tyto experimenty jsou časově náročné, proto by bylo vhodné místo experimentů in vitro jejich chování simulovat in silico. Vhodným výstupem této simulace by byl i uměle generovaný obraz z mikroskopu. Cílem této práce je ověřit možnost generovat fotorealistické obrazy tohoto experimentu pomocí neuronových sítí. Prvním krokem je ověření, zda jsou neuronové sítě schopné generovat pouze jednotlivé roboty. Druhým krokem je hledání možností, jak vygenerovat obraz experimentu, který má rozdílné rozměry než data použita pro učení.

Software sensors based on artificial neural networks for advanced bioprocess monitoring

Bc. Monika Pešková (M2)

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

The key bioprocess parameters, such as produced biopolymer and microbial biomass concentrations, are currently measured off-line by a laboratory analysis, which is unsuitable for on-line bioprocess monitoring and control. A possible solution is the application of a so-called software sensor, i.e. a computational algorithm (e.g. based on Artificial Neural Network (ANN)), which can estimate the key parameters from a set of other commonly on-line measured parameters. This work aims at analysing data obtained from a fed-batch cultivation process and reviewing various types of software sensors based on ANN that could be used for the on-line estimation of biopolymer and microbial biomass concentrations in that process. The analysed process is a fed-batch cultivation of the bacterium *Pseudomonas putida* KT2442 used for producing medium-chain-length polyhydroxyalkanoates (mcl-PHAs). The cultivations were carried out in a laboratory bioreactor at the Bioprocess Control Laboratory of the University of Chemistry and Technology in Prague. The obtained data involve on-line measurements of off-gas composition analysis and culture medium capacitance; and off-line mcl-PHAs biopolymer and microbial biomass concentrations, considered as inputs and outputs to the software sensors, respectively.

Komunikace s aplikačním rozhraním meteorologické stanice a vizualizace dat

Bc. Ondřej Skládal (M2)

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

Meteorologická stanice VŠCHT Praha umožňuje měření vnějších a vnitřních podmínek prostředí, teploty a vlhkosti půdy a koncentrace prachových částic v atmosféře. Data z této stanice jsou odesílána do internetového cloudu. Cílem projektu bylo provést důkladný průzkum možností komunikace webové aplikace s meteorologickým cloudem Weatherlink pomocí aplikačního rozhraní WeatherLink V2 API a otestovat způsoby předávání a vizualizace meteorologických dat. Výsledkem projektu je funkční kód schopný sběru, zpracování, klasifikace, vizualizace a ukládání hodnot fyzikálních veličin naměřených senzory teploty, tlaku, vlhkosti, rychlosti proudění, srážek, koncentrace prachových částic a dalších. Dále byly otestovány grafické knihovny napsané v jazyce Java Script pro grafické vizualizace naměřených dat v čase.

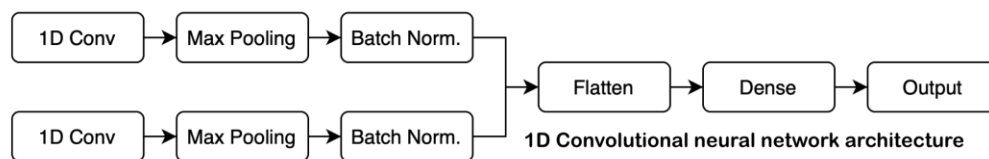
Application of machine learning in smart vehicle charging

Bc. Jakub Tomeš (M2)

Školitel: Ing. Olga Rubešová

Goal of this project is to analyze the possibility of using 9 Degree of Freedom Motion Processing Unit (9 DoF IMU) to detect presence of a vehicle. The proposed solution for this problem is to use a Neural Network (NN) to process the signals from the 9 DoF IMU. The NN shall classify whether a car is absent, present, arriving or leaving. Additionally, this project focuses on experiment data visualization and processing using Python with numerous libraries (e. g. NumPy, SciPy, scikit-learn, Matplotlib, SciKit). Although data visualization is not strictly needed to create a dataset, it improves our understanding of the data. The signals were filtered to eliminate high frequency noise. Furthermore, scikit-learn's PCA was used to transform the three dimensional magnetometer signals to a single dimension. Main application of this research is in Electric Vehicle (EV) charging stations. There is currently no solution that would not require additional installation to detect a vehicle that is not charging. These vehicles block the charging station until they are reported. Our smart charging stations could detect their occupation status even when the vehicle did not start charging with using only two additional sensors in the system.

Application of machine learning in smart vehicle charging



SciPy



Vývoj mobilní aplikace pro sběr a analýzu biomedicínských dat

Bc. Ondřej Vácha (M2)

Školitel: doc. Ing. Jan Mareš, Ph.D.

Má práce se zabývá vývojem mobilní aplikace, která za použití kamery telefonu skenuje obličej člověka a vyhodnocuje 468 obličejových bodů, na základě kterých pak dochází k vyhodnocení cviku. Cvikem je zde myšlen úsměv, zvednutí obočí, mrknutí a další rehabilitační cviky. Tato aplikace má sloužit pro rehabilitační účely pacientům, kteří mají například ochrnutou část obličeje nebo trpí jiným onemocněním nebo ochaběním obličejových svalů. První prototyp mobilní aplikace byl napsán v jazyce Kotlin s použitím rozšířené reality Google AR Core. Z důvodu rozšíření aplikace i na jiné platformy se aplikace nyní programuje v jazyce C# s využitím .NET MAUI. Z důvodu právě multiplatformní podpory byl Google AR Core nahrazen MediaPipe.

Development of PLGA-based nanocarriers for co-delivery of colchicine and purpurin-18

Bc. Markéta Štejdířová (M2)

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

The development of drug delivery systems based on polymeric nanoparticles can address one of the main challenges in the fight against cancer, namely the improvement of drug bioavailability in the body. Therefore, the main goal is to create such a system that supports the targeting of the drug and allows it to be released in a controlled manner. At the same time, we have to think about the high toxicity of cytostatic drugs and so the possibility of protecting healthy cells. The copolymer of glycolic acid and lactic acid (poly(lactide-co-glycolide) - PLGA) belongs to the most widely used biodegradable polymers, due to their good biological compatibility and the possibility of controllable degradation by hydrolysis. Another advantage is the possible modification of the PLGA surface to the desired properties (e.g. increased solubility). The encapsulation of colchicine in a polymer system has potential because of the cytostatic effects of colchicine, but at the same time for reducing its high toxicity.

SPONZOŘI FAKULTY CHEMICKO-INŽENÝRSKÉ

ZENTIVA

