



FAKULTA  
CHEMICKO-INŽENÝRSKÁ  
VŠCHT PRAHA

# Studentská Vědecká Konference

# 2019

21. 11. 2019

SBORNÍK ANOTACÍ

# Fakulta chemicko-inženýrská

## Organizační tým

### FAKULTNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Jitka Čejková, Ph.D.

### ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOŘI

[402](#) **Ústav analytické chemie**

Ing. Martin Člupek, Ph.D.

[403](#) **Ústav fyzikální chemie**

doc. Ing. Ondřej Vopička, Ph.D.

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

doc. Dr. Ing. Pavlína Basařová

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

RNDr. Pavel Galář, Ph.D.

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

Ing. Iva Nachtigalová, Ph.D.

SPONZOŘI FAKULTY CHEMICKO-INŽENÝRSKÉ

# ZENTIVA



**Lonza**



Petr Slaviček

# Ústav analytické chemie (402)

## ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Martin Člupek, Ph.D.

## SEZNAM SEKČÍ

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

SPONZOŘI ÚSTAVU ANALYTICKÉ CHEMIE



# Analytická chemie I

MÍSTO: A105

## KOMISE

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

Ing. Gabriela Broncová, Ph.D.

Mgr. Alla Sinica, Ph.D.

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

## PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 [Bc. Kristýna Dobšíková](#) (M2, doc. Ing. Vladimír Setnička, Ph.D.)

*Strukturní analýza methamfetaminu v roztoku metodami molekulové spektroskopie*

08:45 [Bc. Ladislav Gross](#) (M2, Ing. Vadym Prokopec, Ph.D.)

*Studium sympatomimetických léčiv metodou povrchem zesílené Ramanovy spektroskopie*

09:00 [Bc. František Horák](#) (M1, prof. RNDr. Štěpán Urban, CSc.)

*Laser-diferenční spektroskopie v terahertzové oblasti*

09:15 [Adéla Koryťáková](#) (B3, Ing. Vadym Prokopec, Ph.D.)

*Vliv plasmonického kovu a excitační vlnové délky na SERS spektra berberinu*

09:30 [Bc. Michaela Odrášková](#) (M2, doc. Ing. Vladimír Setnička, Ph.D.)

*Štúdium novej syntetickej drogy 4F-bufedronu pomocou molekulovej spektroskopie*

09:45 [Bc. Livia Tureková](#) (M2, prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka)

*Využití mikroskopických technik pro studium pylových zrn jako potenciálních nosičů léčiv*

10:00 [Bc. Ondřej Vrtělka](#) (M2, doc. Ing. Vladimír Setnička, Ph.D.)

*Spektroskopická charakterizace projevů karcinomu pankreatu*

# *Strukturní analýza methamfetaminu v roztoku metodami molekulové spektroskopie*

Bc. Kristýna Dobšíková (M2)

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

Methamfetamin je stimulační syntetická droga, jejíž největším producentem v Evropě je Česká republika, kde jsou každoročně odhaleny stovky varen a zabaveny až desítky kilogramů látky. Z tohoto důvodu je nutná rychlá a spolehlivá analýza a identifikace, kterou metody molekulové spektroskopie nabízí. Mezi ty se řadí i chiroptické metody, díky nimž můžeme získat informaci o jejich detailní trojrozměrné struktuře, což může vést k pochopení mechanismu působení drog v organismu. Tato práce se zabývá studiem struktury methamfetaminu v roztoku pomocí metod infračervené a Ramanovy spektroskopie a z důvodu optické aktivity látky i metodelektronového a vibračního cirkulárního dichroismu ve spojení s ab initio výpočty. Pomocí kvantově chemických výpočtů bylo nalezeno celkem šest stabilních konformerů, jejichž geometrie byly optimalizovány na úrovni B3PW91/aug-cc-pVDZ++G(d,p) a podle Boltzmannova rozdělení bylo odhadnuto jejich relativní rovnovážné zastoupení. Velmi dobrá shoda experimentálních spekter se spektry simulovanými umožnila spolehlivě určit absolutní konfiguraci enantiomerů, interpretovat naměřená spektra a detailně popsat molekulární strukturu v roztoku.

# *Studium sympatomimetických léčiv metodou povrchem zesílené Ramanovy spektroskopie*

Bc. Ladislav Gross (M2)

Školitel: Ing. Vadym Prokopec, Ph.D.

Sympatomimetika jsou látky, které působí na vegetativní nervový systém a napodobují účinky podráždění sympatického nervového systému. Vegetativní nervový systém inervuje veškeré vnitřní orgány a ovlivňuje základní životní funkce – srdeční výkon, průtok krve, trávení vylučování apod. Studovaná sympatomimetika (dopamin, efedrin, klonidin a salbutamol) působí na funkci srdce, plic a regulaci krevního tlaku. Pro jejich studium v nízkých koncentracích se nabízí využití povrchem zesílené Ramanovy spektroskopie (SERS). Díky adsorpci analytu na zesilující plasmonický substrát (často užívané jsou Ag, Au, Cu povrchy) dochází k výraznému zesílení spektrální odezvy a posunutí limitu detekce k nižším koncentracím (běžně  $10^{-6}$  mol/L). Cílem této práce je ověřit vhodnost SERS spektroskopie pro detekci a identifikaci vybraných sympatomimetik a nalezení optimální kombinace excitační vlnové délky a vhodného zesilujícího substrátu pro získání optimální spektrální odezvy studovaných látek.

# *Laser-diferenční spektroskopie v terahertzové oblasti*

Bc. František Horák (M1)

Školitel: prof. RNDr. Štěpán Urban, CSc.

Práce je zaměřena na laserově diferenční spektroskopii v terahertzové oblasti a interpretaci naměřených přechodů amoniaku. Pomocí laserově-diferenční terahertzové techniky bylo v České republice poprvé změřeno rotační spektrum plynného vzorku v této spektrální oblasti. Výhodou měření na laserově-diferenčním terahertzovém spektrometru je dosažení vyššího rozlišení oproti technikám vzdálené infračervené nebo mikrovlnné spektrometrie. Prvním krokem bylo prostudování rotačních přechodů kalibračního plynu (oxidu uhelnatého), jejichž přesné frekvence byly převzaty z databáze rotačních přechodů, která obsahuje predikce frekvencí přechodů klíčových změřených i nezměřených plynných látek. Toto prostudování také sloužilo k rychlejšímu průběhu určování již přesně změřených přechodů kalibračního plynu. Tyto naměřené přechody se následně využily ke kalibraci spektrometru pro zjištění korekce frekvenčních posunů. Výsledná kalibrační funkce byla dále použita ke korekci měřených přechodů amoniaku v základním a excitovaném vibračním stavu. V obou vibračních stavech bylo naměřeno několik rotačních přechodů, přičemž dva přechody z excitovaného vibračního stavu byly naměřeny vůbec poprvé.

# *Vliv plasmonického kovu a excitační vlnové délky na SERS spektra berberinu*

Adéla Koryťáková (B3)

Školitel: Ing. Vadym Prokopec, Ph.D.

Povrchem zesílená Ramanova spektroskopie (Surface-Enhanced Raman Scattering, SERS) umožňuje znásobit optickou odezvu analytů, jež jsou adsorbovány na povrchu plasmonických kovů. Nejčastějšími analyty jsou látky vykazující velkou afinitu ke kovovému povrchu. Tyto látky se snadno adsorbují na kovové povrchy díky tomu, že ve své struktuře obsahují heteroatomy, většinou se jedná o atom dusíku. Mezi tyto látky patří zejména alkaloidy. Berberin, jako jeden ze zástupců alkaloidů, patří do skupiny benzylochinolinových alkaloidů, které mají potenciální biologickou aktivitu. Jedná se o přírodní alkaloid, který se vyskytuje především v kořenech a kůře dřeviny a míze vlašovičníku. Byl znám již ve starověké Číně a v čínské medicíně se objevuje dodnes. V moderní medicíně se jeho veliký potenciál nachází v potlačení růstu nádorových buněk. V této práci byla měřena SERS spektra berberinu deponovaného na Au, Ag a Cu plasmonických substrátech připravených galvanickým vylučováním na hliníkovou podložku. SERS spektra byla zaznamenávána s využitím různých excitačních vlnových délek (532 nm, 780 nm a 1064 nm). Cílem těchto měření bylo zjistit, který plasmonický substrát a excitační vlnová délka jsou vhodné pro detekci a identifikaci berberinu.

# Štúdium novej syntetickej drogy 4F-bufedronu pomocou molekulovej spektroskopie

Bc. Michaela Odrášková (M2)

Školiteľ: doc. Ing. Vladimír Setnička, Ph.D.

Nové syntetické drogy sa v súčasnosti tešia veľkej obľube medzi užívateľmi drog, za čo vďačia svojmu často legálnemu statusu, účinku podobnému nelegálnym drogám, ale hlavne ich zvyšujúcej sa dostupnosti. Vzhľadom k ich stúpajúcemu počtu na trhu rastie aj potreba ich spoľahlivej identifikácie a analýzy, k čomu môžeme využiť napríklad metód molekulovej spektroskopie. Jednou z nich je aj spektroskopia cirkulárneho dichroizmu, ktorá v kombinácii s *ab initio* výpočtami umožňuje podrobne študovať 3D štruktúru týchto látok vo vodnom prostredí. Táto štúdia je zameraná na analýzu novej syntetickej drogy 4F-bufedronu zo skupiny katinónov pomocou vibračného cirkulárneho dichroizmu (VCD) a elektrónového cirkulárneho dichroizmu (ECD), doplnenými konvenčnou IR a UV spektroskopiou v spojení s kvantovo-chemickými výpočtami. Pomocou týchto výpočtov sme získali 3D štruktúru štyroch najstabilnejších konformérov študovanej látky a následne simulovali ich spektrá VCD, ECD, IR a UV. Tieto spektrá boli ďalej porovnávané so spektrami experimentálnymi s využitím pomoci indexu podobnosti spektier. Jeho vysoká hodnota overila správnosť predikcie, a tak sme mohli spoľahlivo určiť absolútnu konfiguráciu enantiomérov a získať podrobné stereochemické informácie o molekule 4F-bufedronu v roztoku.

## *Využití mikroskopických technik pro studium pylových zrn jako potenciálních nosičů léčiv*

Bc. Livia Tureková (M2)

Školitel: prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka

Z hlediska efektivity terapie je v současném vývoji moderních lékových forem trendem uplatnění nanočástic a systémů umožňujících cílený transport a uvolňování léčiv. Zajímavým přístupem k dané problematice je idea využití obnovitelného a všudypřítomného biologického materiálu – pylových zrn. Jejich skořápky jsou velikostně homogenní přírodní mikrokapsule chránící genetický materiál rostlin před environmentálními vlivy. Proto se vyznačují dobrou elasticitou, rezistencí vůči kyselým a zásaditým látkám, ochranou obsahu před UV zářením a odolností vůči teplotám do 250 °C, což z nich taky dělá potenciálně vhodné nosiče léčiv. Po vyčištění pylových zrn od alergenních látek může být aktivní farmaceutická látka chemicky nebo fyzikálně navázaná na povrch skořápky, nebo zapouzdřena dovnitř. Pro zlepšení kontroly uvolňování léčiva je možné přidat vhodné ochranné vrstvy na povrch, nebo umístění vyhovující matrice dovnitř spolu s účinnou látkou. Pro strukturní a chemickou charakterizaci povrchu pylových zrn (např. řepky, pohanky, jetelu) byly využity neinvazivní a nedestruktivní pokročilé analytické techniky. Zejména mikroskopie atomárních sil (AFM), skenovací infračervená mikroskopie blízkého pole (SNIM) a klasické metody vibrační spektroskopie.

# *Spektroskopická charakterizace projevů karcinomu pankreatu*

Bc. Ondřej Vrtělka (M2)

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

Činnost slinivky břišní může být narušena různými onemocněními, z nichž nejzávažnějším je karcinom pankreatu. Tato choroba je čtvrtou nejčastější příčinou úmrtí na nádorová onemocnění a šance na dožití se pěti let od diagnózy nepřekračuje 5 %. Značně nepříznivá prognóza je způsobena absencí dostatečně specifické a senzitivní metody diagnostiky, která by umožnila odhalení této vysoce agresivní formy rakoviny v raném stádiu. Průběh karcinomu pankreatu je provázen biochemickými změnami v organizmu odrážejícími se v krvi a krevní plazmě. Nejenže je možné pozorovat odlišnosti v koncentraci proteinů a dalších esenciálních biomolekul, ale dochází i k narušení jejich strukturních motivů. Tyto změny se mohou projevit již v preklinickém stádiu a mohou být vysoce specifické. Toho lze využít a změny analyzovat pomocí citlivých spektroskopických metod. V této práci byla krevní plazma pacientů s karcinomem pankreatu a kontrolních jedinců podrobena analýze elektronovým cirkulárním dichroismem a infračervenou spektroskopií. Významnou roli pro ověření využitelnosti výše zmíněných technik pro diagnostiku karcinomu pankreatu hraje statistické vyhodnocení. Využitím diskriminační analýzy byl vytvořen statistický model spolehlivě rozdělující vzorky pacientů s karcinomem pankreatu od kontrolní skupiny.

# Analytická chemie II

MÍSTO: A238 – SEKRETARIÁT ÚACH

## KOMISE

Ing. Vadym Prokopec, Ph.D. (předseda)

Ing. Jan Koucký, Ph.D.

Ing. Antonín Kaňa, Ph.D.

Ing. David Matoušek (OPTIK INSTRUMENTS s.r.o).

## PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 [Bc. Nina Habanová](#) (M1, Ing. Radek Pohl, Ph.D.)

*Vplyv rozpúšťadla na NMR parametre oktyl β-D-glukopyranozidu*

08:45 [Bc. Tereza Jandřurová](#) (M2, doc. Mgr. Taťjana Šiškanova, CSc.)

*Elektrochemická detekce metabolitů katecholaminů – markerů neuroblastomu*

09:00 [Bc. Barbora Mužíková](#) (M2, doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.)

*Kvantifikace bioaktivních složek ve vzorcích omamných a psychotropních látek metodou NMR s využitím externího standardu*

09:15 [Bc. Tereza Navrátilová](#) (M2, doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.)

*Využití ADEQUATE spekter NMR pro stanovení uhlíkové kostry molekul*

09:30 [Bc. Karolína Salvadori](#) (M2, prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka)

*Zevrubné studium substituovaných nosylamidů jakožto prekurzorů pro následnou syntézu receptorů na bázi modifikovaných močovín*

09:45 [Bc. Lucie Špačková](#) (M2, doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.)

*Příprava a charakterizace fluorescenčně značených křemičitých nanočástic*

10:00 [Bc. Anastasiia Tulupova](#) (M2, Ing. Gabriela Broncová, Ph.D.)

*Modifikované uhlíkové elektrody pro elektrochemickou detekci nukleových bází  
anebo nukleotidů*

# *Vplyv rozpúšťadla na NMR parametre oktyl β-D-glukopyranozidu*

Bc. Nina Habanová (M1)

Školiteľ: Ing. Radek Pohl, Ph.D.

Táto práca sa zaoberá štúdiom vplyvu prostredia (rozpúšťadla) na NMR parametre jednoduchých glykozidov. Za modelovú zlúčeninu bol zvolený oktyl β-D-glukopyranozid, ktorý vykazuje dobrú rozpustnosť v širokej škále rozpúšťadiel. Z nameraných NMR dát v D<sub>2</sub>O a CDCl<sub>3</sub> je zrejmé, že rozpúšťadlo nemá vplyv na konformáciu pyranózového kruhu, avšak ovplyvňuje konformáciu hydroxymetylovej skupiny. Ukázalo sa, že zatiaľ čo vo vode sú populované rotaméry *gg* a *gt*, tak v chloroforme prevažuje rotamér *gg*. Tieto výsledky slúžia ako „proof-of-concept“ mojej diplomovej práce, ktorá sa bude zaoberať vplyvom ďalších rozpúšťadiel na konformáciu pyranózového kruhu, hydroxymetylovej skupiny a aglykónu pre D-glukopyranózu a D-galaktopyranózu.

# *Elektrochemická detekce metabolitů katecholaminů – markerů neuroblastomu*

Bc. Tereza Jandřurová (M2)

Školitel: doc. Mgr. Taťjana Šiškanova, CSc.

Metabolity katecholaminů vyskytující se ve zvýšených koncentracích v lidské moči mohou být signálem závažné dětské nemoci – neuroblastomu. Včasná detekce těchto metabolitů umožňuje potvrzení diagnózy, nebo sledování průběhu onemocnění. Do skupiny metabolitů katecholaminů, díky kterým můžeme onemocnění neuroblastomu za včas diagnostikovat, spadají deriváty kyseliny mandlové, konkrétně kyselina vanilmandlová (VMK) a kyselina homovanilová (HVK). Cílem práce bylo využít rozpoznávací vlastnosti guanidinové skupiny pro elektrochemickou detekci VMK a HVK. Aminoguanidin byl kovalentně imobilizován na povrch platinové elektrody modifikované produktem elektrochemické oxidace 3-aminobenzoové kyseliny (Pt/poly(3ABA)/AG). Studium interakce mezi guanidinovou skupinou a VMK/HVK bylo provedeno metodami elektroimpedanční spektroskopie (EIS) a potenciometrie. Během potenciometrických měření bylo prokázáno, že aminoguanidin vystupuje vůči testovaným metabolitům jako neutrální nosič. Nález VMK v moči v koncentračním rozsahu  $1,0 \times 10^{-4}$  –  $5,4 \times 10^{-4}$  mol/l je varovným signálem pro výskyt neuroblastomu. Bylo zjištěno, že elektrody na bázi Pt/poly(3ABA)/AG poskytují potenciometrický signál k VMK v koncentračním rozsahu  $3,5 \times 10^{-5}$  –  $1,4 \times 10^{-3}$  mol/l.

# *Kvantifikace bioaktivních složek ve vzorcích omamných a psychotropních látek metodou NMR s využitím externího standardu*

Bc. Barbora Mužíková (M2)

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

Omamné a psychotropní látky (OPL) představují ohrožení pro společnost a lidské zdraví. Z této kategorie se dále vyčleňují nové psychoaktivní látky (NPS), které mají napodobovat účinky klasických drog, například heroinu, kokainu nebo pervitinu. Vynikají svou nebezpečností zejména z důvodu nedostatku informací o jejich strukturách a účincích a také lákavé ceny a nezkušenosti uživatelů s tímto typem látek. Do této skupiny se řadí zejména syntetické kanabinoidy, syntetické katinony a v poslední době také opioidy. Nové psychoaktivní látky se často vyskytují ve směsích jak s dalšími látkami tohoto typu, tak s látkami zlepšující buď účinek drogy nebo její množství. Proto je důležité vyvinout metodu, která je schopná nejen identifikovat dosud neznámé látky, ale také příměsi a zároveň stanovit množství obsažené bioaktivní složky. Cílem práce je vyvinout metodu pro kvantifikaci složek vzorků omamných a psychotropních látek pomocí NMR spektroskopie. Bude zde využít vnější standard umístěný do kapiláry v NMR kyvetě. Tato technika by do budoucna mohla umožnit stanovení jednotlivých složek vůči různým standardům a znovupoužití jak kapilár, tak samotných vzorků pro případná další stanovení.

# *Využití ADEQUATE spekter NMR pro stanovení uhlíkové kostry molekul*

Bc. Tereza Navrátilová (M2)

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

Klíčovým krokem při určení struktury organických molekul je jednoznačná identifikace jejich uhlíkové kostry. Předkládaná práce se věnuje této problematice s využitím experimentů NMR studujících  $^{13}\text{C}_2$  isotopology látek. Tyto experimenty jsou obecně velmi málo citlivé, jelikož přirozené zastoupení  $^{13}\text{C}_2$  isotopologu ve vzorku činí pouze  $\sim 0,01\%$ . Obecně známým experimentem pro studium  $^{13}\text{C}$ - $^{13}\text{C}$  interakcí je INADEQUATE, který pro detekci využívá jader  $^{13}\text{C}$ . I přes vysokou citlivost soudobých NMR spektroskopů tento experiment klasicky vyžaduje desítky miligramů látky, což představuje problém v případě jejího omezeného množství. Ke studiu  $^{13}\text{C}$ - $^{13}\text{C}$  interakcí při miligramových množstvích dostupné látky pak lze použít inverzní experimenty ADEQUATE, využívající pro detekci jader  $^1\text{H}$ . Cílem této práce je představit výhody a nevýhody použití obou experimentů při studiu molekuly (2- (di(1*H*- pyrrol- 2- yl)methyl)fenoxy)methyl propionátu, která byla připravena jako meziprodukt při vývoji solvatochromní látky. U této látky bylo nejprve provedeno úplné přiřazení všech  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  a  $^{15}\text{N}$  signálů NMR pomocí naměřených  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$ ,  $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$  a  $^1\text{H}$ - $^{15}\text{N}$  spekter COSY, LR-COSY, NOESY, HSQC, HMBC a dalších. Následně byla studována uhlíková kostra této molekuly pomocí 1D a 2D INADEQUATE, a 1,1- a 1,*n*- ADEQUATE spekter.

# *Zevrubné studium substituovaných nosylamidů jakožto prekurzorů pro následnou syntézu receptorů na bázi modifikovaných močovín*

Bc. Karolína Salvadori (M2)

Školitel: prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka

Sloučeniny obsahující sulfonamidovou skupinu jsou cílem výzkumu mnoha vědeckých týmů již řadu let. Tento strukturní motiv je základem řady léčiv a v současné době je využíván především v přípravcích s diuretickými či antimalarickými účinky. Kromě medicínálního využití mají sulfonamidy své místo v organické syntéze, kde jsou využívány jako substráty pro přípravu primárních a sekundárních aminů. Jsou rovněž známy jako neutrální donory vodíkové vazby v supramolekulární chemii. V tomto projektu se zaměřením na nové receptory aniontů bylo využito hned několik vlastností sulfonamidové skupiny: (a) její schopnost odtahovat elektrony z místa komplexace, umožňující zvýšení efektivity receptoru, a (b) kyselost vodíku, který lze substitučně nahradit, a tak například ukotvit receptor na případný nosič. Pro účely syntézy receptorů byla připravena řada různě substituovaných sulfonamidových meziproduktů, jejichž vlastnosti byly zkoumány pomocí UV-VIS a NMR spektroskopie a dále také elektrochemickými technikami (cyklickou voltametrií a polarografií). Důkladné prozkoumání vlastností těchto sloučenin poskytlo nová data, na jejichž základě lze porozumět nejen zákonitostem chování těchto stavebních bloků v přítomnosti aniontů, ale zároveň predikovat komplexační chování konečných receptorů.

# *Příprava a charakterizace fluorescenčně značených křemičitých nanočástic*

Bc. Lucie Špačková (M2)

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

Tato práce je věnována přípravě křemičitých nanočástic, modifikaci jejich povrchu fluorescenčními látkami a jejich charakterizaci. Křemičité nanočástice byly připraveny několika různými postupy, následně byl jejich povrch modifikován aminoskupinami, díky kterým bylo možné na jejich povrch navázat fluorescein isothiokyanát a rhodamin B. Takto upravené nanočástice byly následně charakterizovány transmisí elektronovou mikroskopií, fluorescenční spektrometrií a stupeň jejich aminace byl stanoven UV-VIS spektrometrií.

# *Modifikované uhlíkové elektrody pro elektrochemickou detekci nukleových bází anebo nukleotidů*

Bc. Anastasiia Tulupova (M2)

Školitel: Ing. Gabriela Broncová, Ph.D.

Předložená práce je zaměřená na detekci nukleotidů a nukleových bází pomocí modifikované uhlíkové elektrody. Modifikace uhlíkové elektrody (GC) byla dána dvěma kroky: *i*) na povrch GC elektrody byla nanесena nejprve polymerní vrstva z monomeru 4-amino-2,1,3-benzothiadiazolu o koncentraci  $5 \text{ mmol l}^{-1}$  rozpuštěného v  $3\text{M H}_2\text{SO}_4$  metodou cyklické voltametrie (CV) za specifických podmínek a *ii*) připravená polymerní vrstva byla dále modifikována měďnatými ionty z roztoku  $\text{CuSO}_4$  koncentrací  $0,01 \text{ mol l}^{-1}$ . Pro charakterizaci připravených elektrod byla použita metoda CV a elektrochemická impedanční spektroskopie (EIS), které potvrdily přítomnost polymerní vrstvy na povrchu GC elektrody. Metoda diferenční pulzní voltametrie (DPV) byla použita ke srovnání odezvy třech typů elektrod a to čisté GC, polymerní (PABTD) a modifikované polymerní (PABTD- $\text{Cu}^{2+}$ ) elektrod na adenin v roztoku fosfátového pufru o pH 7,0. PABTD a PABTD- $\text{Cu}^{2+}$  elektrody vykazovaly větší proudovou odezvu na koncentrační změnu adeninu oproti čisté GC elektrodě. Dále bylo zjištěno, že modifikované elektrody mohou být využity k simultánní detekci nukleových bází zejména adeninu (A) a guaninu (G) anebo nukleotidů a to guanosinmonofosfátu (GMP) a adenosinmonofosfátu (AMP). Nicméně píky AMP a GMP jsou mnohem méně zřetelné oproti A a G.

# Analytická chemie III

MÍSTO: A21

KOMISE

doc. Dr. RNDr. David Sýkora (předseda)

doc. Ing. Ivan Víden, CSc.

Ing. Magda Vosmanská, CSc.

RNDr. Jiří Břicháč, Ph.D. (ZENTIVA)

## PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 [Bc. Marta Hybášková](#) (M2, doc. Ing. Kamil Záruba, Ph.D.)

*Studium retence nukleotidů na nových steroidních stacionárních fázích*

08:45 [Bc. Věra Kantorová](#) (M2, Ing. Antonín Kaňa, Ph.D.)

*Využití metody sp-ICP-MS pro monitoring stříbrných nanočástic v kosmetických přípravcích*

09:00 [Bc. Jana Karlíčková](#) (M2, Ing. Antonín Kaňa, Ph.D.)

*Přímá analýza stopových prvků ve víně metodou ICP-MS*

09:15 [Pavčina Kvášová](#) (B3, prof. Ing. Oto Mestek, CSc.)

*Stanovení stopových prvků v destilátech hmotnostní spektrometrií s indukčně vázaným plazmatem*

09:30 [Bc. Barbora Linhartová](#) (M2, prof. RNDr. Štěpán Urban, CSc.)

*Měření lidského pachu pomocí GCxGC-TOF*

09:45 [Bc. Věra Schrenková](#) (M1, Ing. Antonín Kaňa, Ph.D.)

*Speciální analýza rtuti: postkolonové generování hydridů a studium jejich dealkylací pomocí kryogenní pasti*

# *Studium retence nukleotidů na nových steroidních stacionárních fázích*

Bc. Marta Hybášková (M2)

Školitel: doc. Ing. Kamil Záruba, Ph.D.

Nukleotidy jsou skupina molekul vyskytujících se ve všech živých organismech a zastávajících zásadní úlohu v řadě biologických procesů. Proto probíhají neustálé pokusy o vývoj a zdokonalování metod jejich separace a kvantifikace. Jednou z možností je využití HPLC se steroidními stacionárními fázemi, které se skládají např. z derivátů cholesterolu či žlučových kyselin. Tyto fáze poskytují místa pro řadu odlišných interakcí s analyty, navíc mohou být tvarově selektivní a u některých fází byla prokázána i enantioselektivita. Stacionární fáze, kterým se věnuje tato práce, byly připraveny Ugiho reakcí. Byly zkoumány dvě steroidní fáze (derivát kyseliny cholové a deoxycholové), a jako reference byla použita stacionární fáze tvořená 3-aminopropyl silikagelem. Na těchto fázích byla testována separace čtyř nukleotidů (adenosin, guanosin a uridin 5'-monofosfát, cyklický guanosin 3',5'-monofosfát) za podmínek izokratické eluce s použitím mobilní fáze tvořené fosforečnanovým pufrem ( $c = 6,7 \text{ mmol} \cdot \text{l}^{-1}$ ,  $\text{pH} = 7,4$ ) a methanolem v objemovém poměru 80:20 a 90:10. Byl použit absorpční detektor a signál byl vyhodnocován při 264 nm. Byl sledován vliv substituentů stacionárních fází na retenční chování nukleotidů, vliv složení mobilní fáze, a dále stabilita stacionárních fází a opakovatelnost analýz.

# *Využití metody sp-ICP-MS pro monitoring stříbrných nanočástic v kosmetických přípravcích*

Bc. Věra Kantorová (M2)

Školitel: Ing. Antonín Kaňa, Ph.D.

Nanotechnologie dnes nachází využití v široké škále odvětví, mimo jiné i v kosmetickém průmyslu. Využití zde nachází například nanočástice oxidu titaničitého a zinečnatého, které se používají v opalovacích přípravcích. Zajímavé využití však díky svým antiseptickým vlastnostem nabízí i nanočástice stříbra. Předkládaná práce se zabývá přípravou vzorků kosmetických přípravků pro analýzu stříbrných nanočástic pomocí hmotnostní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem v single particle módu. Na disperzi standardu stříbrných nanočástic byla testována časová stabilita částic v různých extrakčních činidlech. Dále byla optimalizována koncentrace vybraného extrakčního činidla, velikost navážky a doba extrakce. Pro optimalizovanou metodiku byla stanovena mez detekce. Metodika byla následně aplikována na reálné kosmetické přípravky.

# *Přímá analýza stopových prvků ve víně metodou ICP-MS*

Bc. Jana Karlíčková (M2)

Školitel: Ing. Antonín Kaňa, Ph.D.

V potravinářském průmyslu, stejně jako v jiných průmyslových odvětvích, dochází k padělání výrobků za účelem neoprávněného obohacení padělatelů. Spotřebiteli velmi oblíbenou, ale také hojně falšovanou komoditou je víno. Existuje pestrá škála způsobů falšování vína – příkladem může být neoprávněný přídavek cukrů, vody, klamavé označení stáří či geografického původu. Jednou z možností ověření geografického původu je analýza stopových prvků. V této práci byla vyvinuta metoda přímého stanovení stopových prvků ve víně metodou ICP-MS, kdy vzorky vína nejsou před analýzou složitě nebo zdlouhavě upravovány a jsou pouze vhodně naředěny. Tento způsob přípravy vzorku je jednoduchý, rychlý a je vhodný pro velký objem vzorků k analýze. Komplikací tohoto způsobu přípravy vzorků je přítomnost organické matrice, která je při měření příčinou nespektrálních interferencí, což má za následek nepřesné výsledky. Příprava vzorků vín byla optimalizována pro minimalizaci matričních vlivů, vyvinutá metoda byla validována a byla využita při analýze moravských vín.

# *Stanovení stopových prvků v destilátech hmotnostní spektrometrií s indukčně vázaným plazmatem*

Pavlína Kvášová (B3)

Školitel: prof. Ing. Oto Mestek, CSc.

Destiláty jsou ve světě velmi oblíbené a vyhledávané. Obsah stopových prvků v destilátech nese informace o jejich původu – použitých surovinách, technikách zpracování a kvalitě vody použité pro ředění destilátů. Měření vybraných stopových prvků v alkoholických nápojích je vyžadováno z hlediska kontroly kvality. Obsahují však vysoký obsah ethanolu, který znesnadňuje stanovení jednotlivých prvků. Cílem této práce bylo zjistit, jak ovlivňuje koncentrace ethanolu signály stanovovaných prvků při analýze metodou hmotnostní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem a vypracovat a validovat metodiku stanovení stopových prvků s jednoduchou přípravou vzorku. Ředěním vzorků destilátů a použitím roztoků vhodných vnitřních standardů bylo možné potlačit vliv matrice a vybrané prvky stanovit. Pro každý prvek se zjistila mez detekce, ověřila se přesnost stanovení v matrici irské whiskey. Nakonec se stanovil obsah stopových prvků ve vybraných vzorcích irské whiskey.

## *Měření lidského pachu pomocí GCxGC-TOF*

Bc. Barbora Linhartová (M2)

Školitel: prof. RNDr. Štěpán Urban, CSc.

Lidský pach je pro každého člověka individuální stejně jako například DNA nebo otisk prstu, proto by mohl využívan k identifikaci jedince nejen v souvislosti s trestnou činností. Doposud však nebyl kód lidského pachu rozluštěn, proto jsou hledány souvislosti jednotlivých vlivů a faktorů na lidský pach. Jedním z faktorů, který ovlivňuje lidský pach u žen, jsou především pohlavní hormony, jejichž hladiny se v průběhu menstruačního cyklu mění. Lze tedy předpokládat, že se tato skutečnost odrazí i na složení lidského pachu ženy. Tento vliv byl zkoumán již dříve, a to za použití GC/MS, ovšem tento experiment nebyl statisticky významný. V rámci této práce byla vypracována literární rešerše na téma ženské hormony a jejich metabolismus. Byly naměřeny vzorky pachu ženy v různých obdobích menstruačního cyklu pomocí metody GCxGC-TOF. Ve výsledných chromatogramech byly hledány metabolity těchto hormonů a látky s nimi související.

# *Speciační analýza rtuti: postkolonové generování hydridů a studium jejich dealkylací pomocí kryogenní pasti*

Bc. Věra Schrenková (M1)

Školitel: Ing. Antonín Kaňa, Ph.D.

Rtuť je považována za jeden z nejvíce toxických prvků a její přítomnost v životním prostředí má tak značně negativní vliv na lidské zdraví i ekosystém. Vyskytuje se v několika chemických formách (speciích), které se odlišují vlastnostmi, jako je metabolismus či schopnost bioakumulace. Všechny sloučeniny rtuti však vzhledem ke svým toxickým vlastnostem představují zdravotní riziko již ve velmi nízkých koncentracích. Obvyklým přístupem ke speciační analýze, tedy k identifikaci a kvantifikaci jednotlivých specií, je spřažení separační techniky s prvkově citlivým detektorem na spektrometrické bázi. V rámci této práce byla ke speciační analýze využita metoda vysokoúčinné kapalinové chromatografie na obrácených fázích (RP-HPLC) spřažená s hmotnostní spektrometrií s indukčně vázaným plazmatem (ICP-MS), díky níž byly úspěšně separovány a kvantifikovány toxikologicky významné specie dvojmocná rtuť, methylrtuť, ethylrtuť a fenylrtuť. Zařazením kroku postkolonového generování těkavých sloučenin (VCG) došlo pro všechny specie k významnému snížení detekčních limitů a lepší opakovatelnosti stanovení. Dále byly během VCG vůbec poprvé studovány změny ve speciaci těkavých sloučenin rtuti, které byly kvantifikovány pomocí kryogenní pasti představující příklad jednoduché plynové chromatografie.

# 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**



**ROSSUM**



prof. RNDr. Petr Slaviček, Ph.D.

# Fyzikální chemie I

MÍSTO: A402

## KOMISE

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

Ing. Ctirad Červinka, Ph.D.

Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.

## PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Bc. Monika Brožíková](#) (M1, prof. RNDr. Petr Slaviček, Ph.D.)

*Modelování fotoelektronového spektra fenylalaninu v roztoku*

09:20 [Bc. Jakub Smutek](#) (M2, RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.)

*Calculation of hydration free energies of hydrophobes using LCW coarse-grained model*

09:40 [Bc. Michal Belina](#) (M2, prof. RNDr. Petr Slaviček, Ph.D.)

*Na cestě k vibronickým spektrům velkých molekul: příběh radikálového kationtu antracenu*

10:00 [Bc. Adam Šrut](#) (M1, RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.)

*Computing infrared spectra of Re complex in polar solvents from ab-initio dynamics*

10:20 [Bc. Stanislav Chvíla](#) (M2, prof. RNDr. Petr Slaviček, Ph.D.)

*Modelování tripletní reaktivity karboxypterinu: Druhá iterace*

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

*Building Markov state models for hydrophobic polymer chain collapse*

11:00 [Bc. Jan Poštulka](#) (M2, prof. RNDr. Petr Slaviček, Ph.D.)

*Fotodisociace a rekombinace peroxidu vodíku*

# *Modelování fotoelektronového spektra fenylalaninu v roztoku*

Bc. Monika Brožíková (M1)

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

Biochemické látky jsou důležité pro organismus, ne vždy ovšem známe jejich přesné úlohy. Proteiny, které jsou základem živých systémů a účastní se různých dějů, jsou tvořeny aminokyselinami. Například aromatické aminokyseliny (mezi něž patří fenylalanin, tyrosin, tryptofan,...) jsou předmětem zájmu díky jejich účasti na opravě oxidativního poškození DNA. Jedním ze základních parametrů jsou v tomto kontextu veličiny charakterizující energetiku oxidace (např. ionizační energie nebo redoxní potenciál). Nejpřímější cestu ke získání těchto dat představuje fotoemisní spektroskopie. V minulosti se tato spektra dala v dostatečné přesnosti získat jen v plynné a pevné fázi, neboť detekce elektronů vyžaduje vysoké vakuum během měření, což není dosažitelné pro těkavé kapaliny. Ovšem biochemické molekuly se v organismech převážně vyskytují v nativním vodném prostředí. Tento problém vyřešila technika kapalných mikrotrysek, která se v posledních letech rozvíjí a umožňuje měřit fotoemisní spektra roztoků. Získaná experimentální data je však nutné interpretovat za pomoci teoretických modelů. V práci se zaměřuji na modelování fotoelektronového spektra molekuly fenylalaninu v roztoku. Získaná data je pak možné porovnat s dostupnými experimenty.

# *Calculation of hydration free energies of hydrophobes using LCW coarse-grained model*

Bc. Jakub Smutek (M2)

Školitel: RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.

Hydrophobic effects play an important role in physical phenomena such as membrane formation or protein folding. Despite their importance these effects are rather poorly understood. The quantity of central importance in the description of hydrophobicity is the solvation free energy. It may be estimated via all-atom molecular dynamics simulations, however, these tend to be computationally very expensive for large molecules. Therefore in many applications, it has become common to employ coarse-grained models for a description of solvent degrees of freedom. In this work, we utilize the Lum-Chandler-Weeks (LCW) coarse-grained model to estimate free energies of solvation of various hydrophobic entities such as hard spheres of varying radius or a long hydrophobic polymer chain. We then compare the results of the LCW model to the results of detailed atomistic simulations. We find reasonable agreement for most of the studied systems.

# *Na cestě k vibronickým spektrům velkých molekul: příběh radikálového kationtu antracenu*

Bc. Michal Belina (M2)

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

Předmětem této práce je implementace a testování rozdílných přístupů pro modelování elektronových spekter s vibračním rozlišením. Tato oblast představuje pro teoretické chemiky obtížný problém, obzvlášť jedná-li se o velké molekuly. Detailně rozlišená vibronická spektra přitom mohou být užitečná při rozpoznávání složitých látek nacházejících se mimo lidský dosah, např. zdrojových molekul difúzních interstelárních pásů. V této práci studuji antracen a jeho radikálový kationt jakožto zástupce polyaromatických uhlovodíků vyskytujících se v mezihvězdném prostředí. Studium těchto látek v optimalizovaných geometriích základního stavu a excitovaných stavů je schopno poskytnout vibronické rozlišení, nicméně optimalizace excitovaných stavů je náročná kvůli výskytu velkého množství lokálních minim a pravděpodobnému křížení stavů. Absorpční spektra získaná pomocí tzv. reflexního principu zase nejsou schopna dodat vibronické rozlišení. Proto jsem se rozhodl použít nový přístup, tzv. *dephasing representation*, jehož použití testuji prostřednictvím moderních semiempirických metod spojených s multi-referenčním popisem.

# *Computing infrared spectra of Re complex in polar solvents from ab-initio dynamics*

Bc. Adam Šrut (M1)

Školitel: RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.

Complex  $\text{fac-[ReCl(bpy)(CO)}_3\text{]}$  (bpy = 2,2'-bipyridine) belongs to a group of photosensitive compounds which are presented in recent studies for their applications in solar energy conversion (Grätzel photoelectrochemical cell) or as compounds, which possess solvent-dependent emission (light switches). In this work, we employ ab-initio MD simulations to investigate explicit solvent interactions that affect the infrared spectrum of Re complex and are beyond mean-field (PCM) solvent description. Two different methods for computing IR spectra from MD simulation data are discussed.

# *Modelování tripletní reaktivity karboxypterinu:*

## *Druhá iterace*

Bc. Stanislav Chvíla (M2)

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

Dynamicky se rozvíjející obor chemie atmosféry je poháněn chemií odehrávající se na fázových rozhraních vodních aerosolů. *In silico* modelování excitovaných stavů molekul je cestou k objasnění pochodů, které jsou obtížně proveditelné v laboratořích. Touto prací jsou prošetřeny poslední výpočetní protokoly vedoucí k disociačním konstantám a redoxním potenciálům, které byly dosud publikovány, na modelovém příkladu 6-karboxypterinu a jeho tripletního stavu. Výsledky jsou porovnány s předchozími běžnými protokoly, které byly prošetřeny dříve. Dále se tato práce zabývá principy modelování solvatační energie molekul a možnými cestami k jejímu získávání.

## *Building Markov state models for hydrophobic polymer chain collapse*

Bc. Denis Zadražil (M2)

Školitel: RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.

Folding or collapse transitions are prominent examples of rare events, during which a biomolecule (protein or polymer) transforms from one stable state to another. The transition is typically few orders of magnitude faster than the lifetime of the stable states, resulting in poor sampling efficiency of direct MD simulations. In contrast to well defined protein native fold, rich ensemble of globular states must be considered for polymers. Moreover traditional variables used in polymer physics describe polymer collapse pathways only crudely. In this contribution we have utilized a purely hydrophobic polymer to investigate the generic collapse transition in aqueous solutions. Employing long direct MD simulations, the high-dimensional data (hundreds of polymer state descriptors) were transformed using time-lagged independent component analysis (TICA) method into few collective variables. Transformed data were clustered into a set of Markov states. Transitions among these states were counted and the transition matrix constructed. This model suggests two distinct collapse mechanisms with hairpin-like and roll-up transition states. This work presents a first step towards quantitative investigation of kinetic properties of role model thermoresponsive polymer PNIPAM.

# *Fotodisociace a rekombinace peroxidu vodíku*

Bc. Jan Poštulka (M2)

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

Rozvoj metod pro modelování molekul v solvatovaných systémech je jedním z ústředních cílů výpočetní chemie současnosti, neboť většina chemicky zajímavých dějů se odehrává v roztoku, zatímco teoretické metody založené na kvantové teorii poskytují primárně výsledky pro molekuly ve vakuu. V práci se zabývám studiem solvatovaného peroxidu vodíku, jeho fotodisociace a případné rekombinace vzniklých radikálů. Peroxid vodíku je významnou molekulou v různých dějích v zemské atmosféře, při sterilizačních procesech v medicíně, čištění vody a dalších oblastech. V mé práci pak především slouží jako modelový chromofor pro vývoj nových metod a implementaci nových programů do současného výpočetního aparátu naší laboratoře. Solvatovaný peroxid simuluji pomocí metod typu QM/MM, kdy je systém rozdělen na dvě části. Jedna je popisována výpočetně méně náročnou molekulovou mechanikou a druhá pak v rámci kvantové teorie za použití vybrané výpočetní metody. Tento přístup dovoluje studovat systém dostatečně velký na to, aby bylo zahrnuto značné množství solventu a simulace tak dobře popsala podmínky v roztoku. Cílem mé práce je pak propojení multireferenčních metod, popisující excitované stavy molekul, se zmíněným QM/MM modelem a následná studie fotochemie peroxidu vodíku ve vodném prostředí.

# Fyzikální chemie II

MÍSTO: A135

## KOMISE

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

Ing. Štěpán Hovorka, Ph.D.

Ing. Kryštof Pilnáček, Ph.D.

## PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Bc. Tereza Bautkinová](#) (M2, Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D.)

*Elaboration of flexible nanocellulose-based polyaniline films with pseudocapacitive behaviour*

09:20 [Bc. Dániel Gardenö](#) (M1, doc. Ing. Karel Friess, Ph.D.)

*Kompozitní materiály s obsahem grafenoxidu (GO) pro separace plynu*

09:40 [Bc. Ondřej Kolín](#) (M2, doc. Ing. Vladimír Dohnal, CSc.)

*Fyzikálně-chemické vlastnosti binárního systému voda + bis(fluorosulfonyl)imid sodný*

10:00 [Bc. Vojtěch Košťál](#) (M1, prof. Mgr. Pavel Jungwirth, CSc., DSc.)

*Solvent-Induced Stabilization of the Benzene Radical Anion*

10:20 [Bc. Martin Melčák](#) (M1, RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.)

*Cononsolvency effect at finite polymer concentration*

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

*Rozpustnost CO<sub>2</sub> v iontových kapalinách obsahujících dikyanamidový anion*

# *Elaboration of flexible nanocellulose-based polyaniline films with pseudocapacitive behaviour*

Bc. Tereza Bautkinová (M2)

Školitel: Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D.

Energy storage devices play a vital role in our everyday lives. Thus, it is of a great importance to work on their further development to increase their efficiency. Herein, cellulose nanofibrils (NFC), polyaniline (PANI) and reduced graphene oxide (RGO) are employed to elaborate flexible composite electrodes for supercapacitors. Due to its rich redox chemistry and easy synthesis, PANI is a judicious option for pseudocapacitive materials but it exhibits poor processability associated with its brittleness and insolubility in common solvents. Thus, its combination with flexible NFC substrate facilitates the fabrication of free-standing electrodes. The performance of the material can be further improved by addition of carbonaceous substances, such as RGO, which enhances the capacitive contribution of the electric double layer and the mechanical properties. Prepared composites exhibited good charge storage performance with specific capacitances reaching values around 120 F/g. Good charge transport properties were conserved after addition of nonconductive NFC matrix and the highest obtained conductance among the materials was 3.4 S/cm. The composites displayed nice mechanical integrity, which should allow them to be promising candidates for the application in flexible supercapacitors.

# *Kompozitní materiály s obsahem grafenoxidu (GO) pro separace plynu*

Bc. Dániel Gardenö (M1)

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

Membránové separační procesy patří mezi průmyslové technologie používané od osmdesátých let 20. století. Cílem vývoje nových membránových materiálů je vyvinutí membrán s vyšší propustností i zvýšenou separační účinností pro daný plyn v porovnání se stávajícími materiály. V posledních letech se uhlíkové materiály, jako jsou grafenoxid (GO) nebo jednoděnné uhlíkové nanotrubice (SWCNT), začaly úspěšně testovat pro dělení plyných směsí ( $H_2/CO_2$ ). V této práci byly studovány permeační a separační vlastnosti kompozitních membrán, připravených (i) na bázi SWCNT s GO vrstvou s vysokou porozitou a (ii) kompozitních membrán s nylonovým nosičem a tenkou vrstvou GO s přidavkem iontové kapaliny 1-ethyl-3-methyl-imidazoliumdikyanamid ([emim][dca]) nebo 1-butyl-3-methyl-imidazoliumdikyan-amid ([bmim][dca]). Propustnost membrán pro plyny ( $H_2$ ,  $CO_2$ ,  $CH_4$ ,  $C_3H_6$ ,  $C_3H_8$ ,  $C_4H_{10}$  a  $SF_6$ ) byla testována pomocí integrálního permeamtru (time-lag metoda) při 25°C a přetlaku 1 bar, sorpční vlastnosti materiálů byly stanoveny gravimetricky v intervalu tlaků 1-16 barů. Dále byl studován vliv modifikací SWCNT-GO membrán přidavkem dvojmocných iontů paladia (10, 25 a 40 hm.%) a vliv relativní vlhkosti při přípravě membrán na jejich separační vlastnosti.

# *Fyzikálně-chemické vlastnosti binárního systému voda + bis(fluorosulfonyl)imid sodný*

Bc. Ondřej Kolín (M2)

Školitel: doc. Ing. Vladimír Dohnal, CSc.

V této práci byla provedena měření celé řady fyzikálně chemických vlastností vodných roztoků bis(fluorosulfonyl)imidu sodného (aktivita vody, viskozita, hustota, konduktivita). Studované veličiny byly proměřeny jak v koncentrační závislosti (molálně 1–23.7 mol.kg<sup>-1</sup>), tak v teplotní závislosti (288.15–333.15 K a v případě aktivity vody 288.15–318.15 K). Experimentální data byla posléze vyhlazena vhodnými korelačními vztahy schopnými spolehlivě popsat dané veličiny jako funkce obou uvažovaných proměnných. Vedle již uvedených dat tato práce obsahuje informaci o teplotě tuhnutí a entalpii tuhnutí čistého bis(fluorosulfonyl)imidu sodného a doplňuje tak doposud chybějící data nezbytná pro využití studovaného systému jak v laboratorních, tak v průmyslových aplikacích.

# *Solvent-Induced Stabilization of the Benzene Radical Anion*

Bc. Vojtěch Košťál (M1)

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

Solvated electrons are a species formed, *e.g.*, by dissolving alkali metals in liquid ammonia. As such, their chemical reactivity can be exploited in various reactions—for instance, the Birch reduction. Here, benzene-like aromatics are reduced by solvated electrons in the presence of a proton source. For our study we have chosen the benzene radical anion as a representative structure. According to previous *ab initio* studies, the benzene radical anion is in an unbound state in vacuum and it was proposed that it can be stabilized by various condensed phases. However, there are no such effects explicitly known for ammonia. Since the benzene radical anion participates in the Birch reduction, it must be electronically stabilized and therefore we expect ammonia to exhibit a stabilizing effect as well. To study these effects, we have utilized microsolvated gas-phase clusters containing the benzene radical anion surrounded by sequentially increasing number of ammonia molecules. Then we calculated the binding energy of the excess electron in these clusters vertically from structures optimized in the anionic state at the DFT and MP2 level of theory in extensive basis sets. Eventually, we show that ammonia exhibits a significant stabilizing effect on the benzene radical anion.

## *Cononsolvency effect at finite polymer concentration*

Bc. Martin Melčák (M1)

Školitel: RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.

Cononsolvency is an experimentally observed phenomenon, which leads to a decrease or even disappearance of the solubility of a macromolecule (i.e., thermoresponsive polymer PNIPAm) in a mixture of two good solvents. Even though cononsolvency is widely applied in industry, there is still an active debate in the scientific community about the underlying mechanism and interactions at the microscopic level. In our contribution, we performed coarse-grained computer simulation to study the cononsolvency effect in polymer:water:methanol mixture beyond the infinite dilution of the polymer. The current aim is the qualitative description of polymer phase behavior and quantitative thermodynamic description of the polymer solution in the cononsolvency regime at a finite concentration of polymer chains.

# *Rozpustnost CO<sub>2</sub> v iontových kapalinách obsahujících dikyanamidový anion*

Bc. Štěpán Tvrdý (M2)

Školitel: Ing. Pavel Morávek, Ph.D.

Iontové kapaliny se vyznačují nízkou těkavostí, dobrou tepelnou stabilitou a zejména dobrým rozpouštěním oxidu uhličitého. Data o rozpustnosti CO<sub>2</sub> v těchto kapalinách jsou žádoucí informací, která ale není pro některé ionty v literatuře dostupná, například aniont dikyanamid. V rámci této práce byla experimentálně stanovena rozpustnost oxidu uhličitého v iontové kapalině 1-butyl-methylpyrrolidinium dikyanamid (označované jako [bmpyr][DCA]). Ze získaných *pVT* dat byla vyhodnocena tlaková závislost Henryho konstanty CO<sub>2</sub> v [bmpyr][DCA] v rozsahu 0,1-1 MPa při teplotách 25 a 35°C. Výsledky byly také porovnány s dříve stanovenou rozpustností oxidu uhličitého v iontové kapalině 1-ethyl-3-methylimidazolium dikyanamid (označované [emim][DCA]) ve stejném teplotním a tlakovém rozsahu.

# Fyzikální chemie III

MÍSTO: A125

## KOMISE

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

Ing. Daniel Ondo, Ph.D.

doc. Ing. Karel Řehák, CSc.

Ing. Martin Růžička (UNIPETROL RPA)

Ing. Marcela Tkadlecová, CSc. (Zentiva)

## PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Ondřej Horký](#) (B3, Ing. Pavel Morávek, Ph.D.)

*Rovnováha kapalina-pára binární směsi 2-butoxyethanolu a  
cyklopentylmethyletheru*

09:20 [Kateřina Kadlecová](#) (B3, prof. Ing. Michal Fulem, Ph.D.)

*Vapour pressure and thermophysical properties of explosive taggants*

09:40 [Vojtěch Jeřábek](#) (B3, Ing. Pavel Morávek, Ph.D.)

*Rovnováha kapalina-kapalina v systému propylenkarbonát - voda*

10:00 [Barbora Kocábková](#) (B3, Dr. Ing. Pavel Vrbka)

*Limitní aktivitní koeficient MTBE v roztoku NaSCN*

10:20 [Štefan Kocian](#) (B3, Ing. Vojtěch Štejf, Ph.D.)

*Syntéza a termodynamická charakterizace iontových kapalin s kationty  
odvozenými od biogenních látek*

10:40 [Jan Praus](#) (B3, doc. Ing. Ondřej Vopička, Ph.D.)

*Rozpustnost a difuze těkavých látek v iontových kapalinách*

11:00 [Ivan Kopal](#) (B3, Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.)

*Studium kinetických vlastností CuNPs*

11:20 [Jan Polena](#) (B3, doc. Ing. Ondřej Vopička, Ph.D.)

*Pervaporační dělení směsí methanolu a methylacetátu přes organofilní membránu ze síťovaného polychloroprenu*

## *Rovnováha kapalina-pára binární směsi 2-butoxyethanolu a cyklopentylmethyletheru*

Ondřej Horký (B3)

Školitel: Ing. Pavel Morávek, Ph.D.

2-butoxyethanol se řadí mezi glykolethery, které jsou charakteristické asymetrickou strukturou molekul - jeden konec je nepolární díky alifatickému uhlovodíkovému řetězci, druhý obsahuje polární -OH skupinu. Kvůli této vlastnosti je možné je použít jako směsná rozpouštědla vzájemně obtížně mísitelných látek. K jejich častému průmyslovému využití přispívá i jejich relativně nízká toxicita, vysoký bod varu a snadná odbouratelnost v přírodě, což jsou požadavky kladené na moderní rozpouštědla. Chování této látky ve směsích s dalšími rozpouštědly však není dostatečně známo a změřeno. Jako zástupce těchto dalších rozpouštědel byl vybrán cyklopentylmethylether, který odpovídá stejným enviromentálním požadavkům jako 2-butoxyethanol. Pro výše uvedené látky byla změřena izotermní rovnováha kapalina-pára cirkulačním přístrojem. Změřená data budou proložena vhodným termodynamickým modelem.

# *Vapour pressure and thermophysical properties of explosive taggants*

Kateřina Kadlecov (B3)

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

One of the key elements of population protection is the rapid and efficient detection of explosives. To enhance their detectability volatile compounds called taggants are added to explosives. The taggants are chemicals of higher vapor pressure (volatility) than a given explosive, which slowly evaporate or sublime from explosives. The taggants are subsequently detected in the atmosphere by suitable analytical instruments. Knowledge of vapour pressure is one of the key taggant parameters determining its application for a given explosive and useful lifetime. The aim of this work was to determine the vapor pressures and thermodynamically linked properties for selected explosive taggants, namely 2,3-dimethyl-2,3-dinitrobutane, 2-nitrotoluene and 4-nitrotoluene. Experimental studies included the vapor pressure measurements using a static method, investigation of phase behaviour by differential calorimetry, and measurement of condensed-phase heat capacities. Based on the above-mentioned data in combination with ideal-gas thermodynamic properties, the recommended correlation equations for the description of the vapor pressure of explosive taggants in a wide temperature range will be developed by the method of simultaneous correlation of thermodynamically linked properties.

# *Rovnováha kapalina-kapalina v systému propylenkarbonát - voda*

Vojtěch Jeřábek (B3)

Školitel: Ing. Pavel Morávek, Ph.D.

Propylenkarbonát je látka, která se používá např. jako rozpouštědlo šetrné k životnímu prostředí, je součástí elektrolytu v lithiových bateriích, nachází využití v organické syntéze nebo se využívá při výrobě polyuretanových a polykarbonátových pryskyřic. Pro její využívání v praxi je žádoucí znalost chování této látky ve směsích. Práce se zabývá experimentálním stanovením fázové rovnováhy kapalina-kapalina v systému propylenkarbonát + voda a jeho termodynamickou charakterizací. Fázové chování směsi propylenkarbonát + voda již bylo částečně studováno, ale dosavadní literární data jsou do značné míry rozporuplná. Z tohoto důvodu byla provedena nová experimentální stanovení rovnováhy kapalina-kapalina v tomto systému. Měření rovnováhy bylo provedeno zákalovou metodou a přímou analytickou metodou využívající plynový chromatograf a Karl-Fisherovou metodou stanovení vody. Experimentální data byla vyhlazena pomocí rovnice založené na rozšířeném škálovacím zákoně. Byla tak získána horní kritická rozpouštěcí teplota a složení kritického bodu rovnováhy kapalina-kapalina studovaného systému.

## *Limitní aktivitní koeficient MTBE v roztoku NaSCN*

Barbora Kocábková (B3)

Školitel: Dr. Ing. Pavel Vrbka

Cílem práce bylo experimentální stanovení limitního aktivitního koeficientu methyl(*t*-butyl)etheru (MTBE) ve vodném roztoku NaSCN v závislosti na koncentraci soli a určení hodnoty konstanty Sečenovovy rovnice ( $K_s$ ) pro tento systém. Stanovení byla prováděna saturační metodou (IGS method) při teplotě 25 °C do obsahu soli 1,2 mol/kg. Porovnáním lineárního a kvadratického modelu regrese se ukázalo, že závislost logaritmu limitního aktivitního koeficientu MTBE na obsahu soli je lépe vystižena nelineární závislostí, tudíž je pro tento případ vhodnější uvažovat jako hodnotu Sečenovovy konstanty směrnici závislosti při nulovém obsahu soli. Správnost získané hodnoty  $K_s$  byla úspěšně potvrzena porovnáním s hodnotami vypočtenými z dat o Sečenovově konstantě pro MTBE v roztocích jiných solí na základě dříve potvrzeného předpokladu o aditivním charakteru Sečenovovy konstanty.

# *Syntéza a termodynamická charakterizace iontových kapalin s kationty odvozenými od biogenních látek*

Štefan Kocian (B3)

Školitel: Ing. Vojtěch Štejfa, Ph.D.

Iontové kapaliny jsou v poslední době rozšířené a atraktivní rozpouštědla, především kvůli jejich nízké těkavosti a související domnělé přírodní nezávadnosti. Ekologická zátěž běžně průmyslově využívaných iontových kapalin ovšem značně narůstá kvůli častému využívání halogenovaných skupin. Studie se zabývá alternativními iontovými kapalinami a nízkotajícími solemi, konkrétně pak těmi odvozenými od aminokyselin a cholinu. Pro látky z těchto skupin existuje kromě krystalových struktur jen velmi málo informací, často nejsou známy ani základní fyzikálně-chemické vlastnosti, jako například normální bod tání. Proto se tato práce zaměřuje na studium termodynamických vlastností metodami diferenční skenovací kalorimetrie. Bylo syntetizováno pět nitrátů proteinogenních aminokyselin a tři vzorky obsahující jako kationt cholinovou skupinu byly zakoupeny. Kvůli silné hygroskopicitě, kterou iontové kapaliny běžně vykazují, byl další nutný krok vakuové sušení a následná manipulace v inertní atmosféře. Krystalická struktura a čistota byly určeny pomocí rentgenové práškové difrakce. Pomocí dvou skenovacích kalorimetrů se studovaly tepelné kapacity a fázové chování. U některých vzorků byl zaznamenán tepelný rozklad, který se ověřil vizuálně při zahřívání pomocí bodotávku.

# *Rozpustnost a difuze těkavých látek v iontových kapalinách*

Jan Praus (B3)

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

Iontové kapaliny (IL) nacházejí díky svým unikátním vlastnostem uplatnění například při extrakci, destilaci nebo membránových separacích. Tradičně jsou pro účely výběru IL pro konkrétní aplikace měřeny rovnovážné charakteristiky, například rozpustnosti a limitní aktivitní koeficienty těkavých látek. Rozšířením tohoto přístupu je současné měření difuzivit těkavých látek a jejich rovnovážné rozpustnosti v IL. Difuzivita byla doposud experimentálně zjištěna jen pro značně omezený počet systémů, například  $\text{CO}_2$  – [EMIM][TF2N]. Predikce difuzivit, například pomocí Wilkeovy-Changovy korelace, je omezena na zředěné systémy. V této práci byla měřena rovnovážná rozpustnost a kinetika rozpouštění těkavých par v cylindrických tělesech z 1-ethyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imidu [BMIM][TF2N] a z 1-butyl-3-methylpyridinium bis(trifluoromethylsulfonyl)imidu [BMPY][TF2N]. Bylo studováno rozpouštění par vody, methanolu, ethanolu, 1-butanolu, acetonu a *p*-xylenu v uvedených IL při 40 °C, v případě vody dále při 30 °C, pro aktivity par v rozmezí zhruba 0,2-0,8. Z dosavadních výsledků například plyne, že záměna kationtu IL nemá zásadní vliv na difuzivitu ani na rovnovážné rozpustnosti těkavých látek.

# *Studium kinetických vlastností CuNPs*

Ivan Kopal (B3)

Školitel: Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.

Povrchem zesílený Ramanův rozptyl je fyzikální jev, pomocí kterého lze s využitím spektroskopických technik detegovat velmi malé koncentrace rozličných analytů. K zesílení Ramanova signálu dochází na povrchu substrátu díky rezonanci povrchových plasmonů, která vzniká v důsledku interakce volných povrchových elektronů kovu s polarizovaným zářením, přičemž jako zesilující substrát lze použít například kovové nanočástice. Jedním z nepříliš běžných plasmonických materiálů je měď, kterou kromě dobré reaktivity a plasmonové resonance ve viditelné oblasti vyzdvihuje také její cenová dostupnost. Vlivem rychlé oxidace a agregace nanočástic jsou však její optické vlastnosti nestálé. Cílem této práce je posoudit míru zesílení u koloidních systémů skládajících se z roztoku měděných nanočástic a různých koncentrací studovaného analytu (4-aminobenzenethiol) v závislosti na čase. Tato závislost byla posuzována na základě Ramanových spekter, která byla měřena s excitační vlnovou délkou 785 nm. Zároveň byla měřena UV/VIS spektra za účelem sledování pozice maxima plasmonové resonance a posouzení vhodnosti užití konkrétního laseru. Z důvodu monitorování chování nanočástic bez aplikovaného analytu byly na transmisním elektronovém mikroskopu pořízeny snímky nanočástic s různou dobou stárnutí.

# *Pervaporační dělení směsí methanolu a methylacetátu přes organofilní membránu ze síťovaného polychloroprenu*

Jan Polena (B3)

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

Pervaporace je membránový separační proces založený na dělení kapalné směsi na základě rozdílných propustností membrány pro jednotlivé složky. Tohoto principu se využívá hlavně pro dělení látek tvořících azeotrop, jelikož, na rozdíl od destilace, není podmíněn rozdílnou těkavostí látek. Předmětem této práce je studium dvojice methanol-methylacetát, které tvoří těkavý azeotrop, obsahující 68,5 mol. % methylacetátu při 53,4 °C. Cílem je příprava separačních membrán ze síťovaného polychloroprenu a zjištění jejich separačních vlastností pro uvedenou dvojici látek. Přestože je polychloropren mechanicky a chemicky odolným polymerem, vyráběným v průmyslovém měřítku a používaným v řadě aplikací, v oblasti membránových separací byl až do teď prakticky přehlížen. Podle dosavadních výsledků pervaporačních měření směsí methanolu a methylacetátu jsou membrány ze síťovaného polychloroprenu organofilní, to znamená, že membrána propouští přednostně methylacetát před methanolem. Polychloropren má proto potenciál stát se alternativou k polydimethylsiloxanu (PDMS), ze kterého jsou doposud obvykle připravovány organofilní separační membrány.

# Fyzikální chemie IV

MÍSTO: B23 (KLOKNERŮV ÚSTAV)

## KOMISE

prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka (předseda)

RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.

Ing. Martin Klajmon, Ph.D.

## PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Martin Crhán](#) (B2, prof. Mgr. Pavel Jungwirth, CSc., DSc.)

*Ab initio studie modrých roztoků solvatovaných elektronů v kapalném amoniaku*

09:20 [Josef Filgas](#) (B3, prof. RNDr. Petr Slaviček, Ph.D.)

*Studium tepelného rozkladu methylazidu a jeho fluorovaných analogů*

09:40 [Lucie Draslarová](#) (B3, Ing. Ctirad Červinka, Ph. D.)

*Teoretické výpočty termodynamických a strukturních vlastností bází nukleových kyselin ve stavu ideálního krystalu*

10:00 [Jiří Janoš](#) (B3, prof. RNDr. Petr Slaviček, Ph.D.)

*Fotochemie cyklopropanonu*

10:20 [Aneta Leskourová](#) (B3, RNDr. Michal Kolář, Ph.D.)

*Počítačové modelování parciálních atomových nábojů pomocí mimoatomových pozic*

10:40 [Matěj Pur](#) (B2, Ing. Ctirad Červinka, Ph. D.)

*Teoretické výpočty termodynamických vlastností cholin acetátu ve stavu ideálního plynu*

11:00 [Ondřej Strnad](#) (B3, RNDr. Michal Kolář, Ph.D.)

*Studium N-terminální domény proteinu HemK metodami výpočetní biochemie*

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

*Predikce kohezních vlastností kubanu pomocí ab initio aditivních metod*

# *Ab initio studie modrých roztoků solvatovaných elektronů v kapalném amoniaku*

Martin Crhán (B2)

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

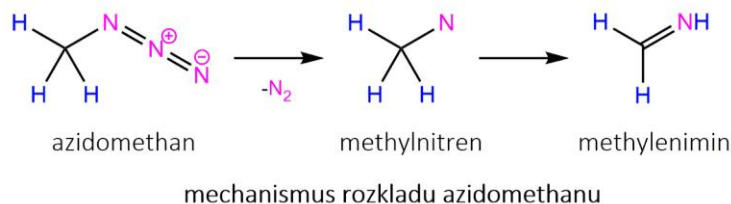
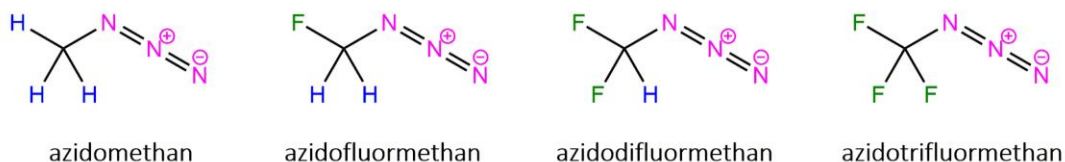
Unlike the explosive behavior in water, dissolving alkali metals in liquid ammonia produces stable blue solutions, which have been for over a hundred years identified as solutions of free solvated electrons. These remarkable solutions have been of great interest, as excess electrons represent one of the best examples of a quantum solute. Also, from a practical point of view, they have served as reducing agents in the Birch reduction process for hydrogenation of aromatic hydrocarbons. Recently our colleagues performed experimental measurements of vertical detachment energies (VDEs) of these electrons, using refrigerated liquid ammonia-metal solution microjets. To support these results we performed ab initio calculations of excess electron VDEs on structures of 12 ammonia molecules carved out from 4 ab initio molecular dynamics simulations. VDEs of both mono-electrons and spin-paired dielectrons were studied, resulting in distribution roughly at 2.0 eV, which was in quantitative agreement with experiment.

# Studium tepelného rozkladu methylazidu a jeho fluorovaných analogů

Josef Filgas (B3)

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

Medicinální chemie zažívá v posledních 20 letech výrazný rozvoj v oblasti organofluorové chemie. Atomy fluoru totiž dokážou měnit vlastnosti molekul, a ty se pak stávají mnohdy i výrazně vhodnějšími bioaktivními látkami. Příkladem nového strukturního motivu jsou fluoralkylované triazoly, které skýtají mnoho výhodných vlastností – například mimořádnou stálost ve fyziologických podmínkách, schopnost nahradit peptidové vazby a zejména jednoduchou a velmi účinnou syntetickou cestu vycházející z alkynů a azidů. Organické azidy jsou však známy svou nízkou tepelnou stabilitou, která omezuje jejich syntetickou použitelnost. Má práce se zaměřuje na teoretické studium tepelného rozkladu azidomethanu a všech jeho fluorovaných analogů - azidofluormethanu, azidodifluormethanu a azidotrifluormethanu. Její součástí je lokalizace tranzitních stavů rozkladu a výpočet aktivační energie a aktivační Gibbsovy energie. Diskutován je také mechanismus, ve kterém hraje důležitou roli nitren, který může vznikat jak ve stavu singletním, tak tripletním, který je stabilnější než singletní nitren, jedná se však o spinově zakázanou cestu. Nejstabilnějším azidem byl shledán azidotrifluormethan a nejméně stabilním azidofluormethan. Mezi nimi roste stabilita v řadě  $\text{CF}_2\text{HN}_3$  a  $\text{CH}_3\text{N}_3$ .



# *Teoretické výpočty termodynamických a strukturních vlastností bází nukleových kyselin ve stavu ideálního krystalu*

Lucie Draslarová (B3)

Školitel: Ing. Ctirad Červinka, Ph. D.

Práce navazuje na dosavadní výzkum termodynamických vlastností dusíkatých bází nukleových kyselin, které byly zatím zkoumány ve stavu ideálního plynu. Nyní jsou nově počítány strukturní a termodynamické vlastnosti ve stavu ideálního krystalu, později budou z obou sérií dat stanovena sublimační data pro studované struktury. Pro výpočty optimální geometrie elementární buňky krystalu a jejích vibračních stupňů volnosti (fononů) byla použita teorie hustotního funkcionálu (DFT), konkrétně funkcionál PBE s disperzní korekcí D3. Při následujících výpočtech teplotně závislých termodynamických vlastností krystalů, které vycházejí ze zmíněných parametrů, byla použita kvaziharmonická aproximace. Tato práce prezentuje výsledky výpočtů získané pro krystalický adenin, guanin a cytosin. Největší důraz je kladen na molární objemy a izobarické tepelné kapacity. Z důvodu absence experimentálních termodynamických dat pro krystalické báze slouží kvantově chemicky vypočtené výsledky jako jediný, relativně spolehlivý zdroj zmíněných veličin studovaných látek. Na základě předchozích literárních výpočtů pro podobné molekulární krystaly je očekávaná odchylka teoretických výsledků od experimentálních dat v řádu jednotek procent pro molární objemy, u izobarických tepelných kapacit do dvaceti procent.

# *Fotochemie cyklopropanonu*

Jiří Janoš (B3)

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

Molekuly fotochemicky uvolňující oxid uhelnatý se v poslední době dostávají do hledáčku chemiků, biochemiků a biologů. CO je totiž jedním z důležitých nízkomolekulárních plynných hormonů, podobně jako známější NO či H<sub>2</sub>S. Fotochemické uvolnění CO umožní dálkové řízení fyziologických dějů. Jednou ze skupin látek uvolňujících CO jsou i cyklické ketony. Nejjednodušší molekulou z této skupiny je cyklopropanon, který sice nemá potenciál využití jako zdroj CO za fyziologických podmínek, je to však vhodná molekula pro začátek teoretické studie. Cyklopropanon nese zajímavé fotochemické vlastnosti, mezi něž se řadí zejména závislost uvolňování CO na vlnové délce excitujícího světla. Jeho nespornou výhodou je z výpočetního hlediska nízký počet atomů. V této práci jsem zmapoval hyperplochu potenciální energie cyklopropanonu v základním i v excitovaném stavu vzhledem k předpokládanému mechanismu uvolňování CO. Zabýval jsem se významem dynamické korelace pro tvar hyperplochy. Tento prvotní náhled na fotochemii cyklopropanonu je rozvinut pomocí molekulových simulací v excitovaném stavu. Použity jsou nové metody zahrnující mezisystémové křížení a závislost počátečních podmínek na vlnové délce. Práce poskytuje nový pohled na fotodynamiku cyklopropanonu s porovnáním dosavadních výsledků.

# *Počítačové modelování parciálních atomových nábojů pomocí mimoatomových pozic*

Aneta Leskourová (B3)

Školitel: RNDr. Michal Kolář, Ph.D.

Parciální atomové náboje jsou jedny ze základních chemických konceptů. Byť není tento koncept fyzikálně jednoznačně definován, funguje často spolehlivě. V některých případech ale úplně selhává. Děje se tak například u halogenovaných molekul, na něž se má práce zaměřuje. Kvůli nerovnoměrnému rozložení elektronové hustoty okolo jádra dochází na atomu halogenu k vzniku tzv. “ $\sigma$ -díry”, tedy oblasti s výrazně kladnějším elektrostatickým potenciálem. Má práce si klade za cíl zjistit, jak budou parciální náboje v halogenovaných molekulách ovlivněny po zahrnutí vlivu  $\sigma$ -díry, a snaží se nalézt heuristické řešení pro zjednodušení výpočtu takto zpřesněných nábojů. Pro získání dat bylo potřeba provést kvantově-mechanickou optimalizaci výchozích souřadnic molekul, vytvořit referenční síť bodů elektrostatického potenciálu a přidat mimoatomový bod modelující vliv  $\sigma$ -díry během následného fitování bodových nábojů na jádra. Tím jsem získala jednotlivé parciální náboje pro molekulu se zahrnutým vlivem  $\sigma$ -díry i bez něj. Z předběžných výsledků lze vyčíst, že vliv  $\sigma$ -díry je v průměru výraznější u aromatických sloučenin než u alifatických, nebo, že s vyšším protonovým číslem se zvyšuje i vliv  $\sigma$ -díry na náboj halogenu.

# *Teoretické výpočty termodynamických vlastností cholin acetátu ve stavu ideálního plynu*

Matěj Pur (B2)

Školitel: Ing. Ctirad Červinka, Ph. D.

Cholin acetát patří mezi iontové kapaliny a jeho velkou výhodou oproti většině již používaných iontových kapalin je netoxičita, snadná dostupnost a biokompatibilita, protože kation i anion jsou přírodní látky. Jeho možným využitím je jako elektrolyt v lithiových bateriích nebo jako prostředí při radikálové polymerizaci. Vzhledem k nedostatku spolehlivých experimentálních termodynamických dat pro většinu iontových kapalin představují teoretické výpočty užitečnou možnost (často prakticky jedinou), jak dané termodynamické vlastnosti zjistit. Tato práce se zabývá teoretickými výpočty termodynamických vlastností cholin acetátu ve stavu ideálního plynu, hlavně jeho izobarické tepelné kapacity a entropie. Pro výpočty tepelné kapacity a jednotlivých příspěvků k ní (rotačních, translačních, vibračních a vnitřně-rotačních) byla použita teorie hustotního funkcionálu (DFT), konkrétně funkcionál B3LYP. Existence jednotlivých konformerů cholinu byla zohledněna použitím konformačně-směšovacího modelu. Příspěvek interakce kation – anion v rámci iontového páru byla postihnuta pomocí molekulárně-dynamických simulací využívajících klasické nepolarizovatelné pole CL&P pro všechny atomy. Tato práce je do budoucna základem pro další výzkum ať už jiných aniontů nebo krystalů těchto iontových kapalin.

# *Studium N-terminální domény proteinu HemK metodami výpočetní biochemie*

Ondřej Strnad (B3)

Školitel: RNDr. Michal Kolář, Ph.D.

Jednou ze základních stavebních jednotek buňky jsou aminokyseliny, které spojením peptidovou vazbou tvoří proteiny. Strukturu protein získává během balení, které často probíhá tzv. kotranslačně. Tento děj probíhá na ribozomu, jehož hlavní úkol je přeložit mRNA do sekvence aminokyselin během translace. Proteiny se mohou balit buď uvnitř ribozomálního tunelu, nebo krátce po výstupu z tunelu, přičemž je protein stále připoután k ribozomu. Cílem této práce je porozumět balení N-terminální domény HemK na molekulární úrovni. Za tímto účelem byly vytvořeny molekulově dynamické simulace domény v explicitní vodě. Simuloval jsem 5 fragmentů HemK s různým počtem helixů. U těchto fragmentů jsem zjišťoval hodnoty RMSD, gyračního poloměru a hlavních komponent. Pomocí těchto veličin jsme schopni porovnávat flexibilitu a stabilitu peptidu jako celku, ale i chování stejného helixu v peptidech různé délky. Z výsledků lze například usuzovat, že samotný helix se lépe stabilizuje až v okolí dalších helixů.

# *Predikce kohezních vlastností kubanu pomocí ab initio aditivních metod*

Petr Touš (B3)

Školitel: Ing. Ctirad Červinka, Ph. D.

Kuban je triviální název sloučeniny pentacyklo[4.2.0.0<sup>2,5</sup>.0<sup>3,8</sup>.0<sup>4,7</sup>]oktan, organické molekuly řadí se mezi tzv. Platónské uhlovodíky. Práce navazuje na dosavadní vlastní výpočty termodynamických vlastností kubanu založené pouze na teorii hustotního funkcionálu (DFT). Cílem této práce je zpřesnit výsledky DFT výpočtů za pomoci pokročilejší metodologie – fragmentačně-aditivních ab initio výpočtů. Ty využívají spojení výpočetních metod několika úrovní, což může přinést výsledky přibližně odpovídající vyšším úrovním výpočtům, ale s nižšími výpočetními náklady, tedy větší efektivitou. Interakce blízkých molekulárních dvojic v krystalové mřížce jsou počítány nejpokročilejšími kvantově-chemickými metodami, zde vázané klastry včetně extrapolace na nekonečnou bázi (CCSD(T)/CBS). Vzdálenější a vícečasticové interakce jsou počítány na nižší úrovni – buď polarizovatelné silové pole (Amoeba) nebo levnější kvantově-chemický výpočet s periodickými okrajovými podmínkami (DFT). V této práci budou těmito metodami studovány kohezní vlastnosti nízkoteplotní krystalické fáze kubanu a bude proveden co možná nejpřesnější výpočet sublimační entalpie. Pomocí této hodnoty pak bude posouzeno o správnosti experimentálních termodynamických dat pro kuban.

# Ústav chemického inženýrství (409)

## ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

doc. Dr. Ing. Pavlína Basařová

## SEZNAM SEKČÍ

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

SPONZOŘI ÚSTAVU CHEMICKÉHO INŽENÝRSTVÍ

# ZENTIVA

## ŠKODA



## Lonza



# Chemical Engineering I

MÍSTO: B139

## KOMISE

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

doc. Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D.

Ing. Jakub Mužík

Ing. Vít Zvoníček (Zentiva, k.s.)

Ing. Suada Dukaj

## PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:40 [Bc. Ashley Hannah George](#) (M1, doc. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.)

*Preparation of niosomes and their characterization*

09:00 [Bc. Kristýna Idžakovičová](#) (M1, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

*Modelling of transport and reaction in porous catalytic filters*

09:20 [Beatriz Peixe](#) (M1, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

*Influence of flow distribution on CO oxidation in three-way catalyst*

09:40 [Bc. Erik Sonntag](#) (M2, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

*Reactive Dissolution of Poorly Soluble Prodrug Suspension*

10:20 [Bc. David Zůza](#) (M2, Ing. Ondřej Kašpar, Ph.D.)

*Amorphization of drugs in mesoporous silica using solvent evaporation*

10:40 [Bc. Filip Zavřel](#) (M2, Gabriela Ruphuy Chan, M.Sc.Ph.D.)

*3D printing of PCL/HA scaffolds for bone tissue engineering*

11:00 [Bc. Martin Krov](#) (M1, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.)

*Optimization of liquid dosing for the production of liquid marbles*

## *Preparation of niosomes and their characterization*

Bc. Ashley Hannah George (M1)

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

The recent advancements in drug delivery systems have provided promising alternatives in administering pharmaceutical compounds. Specifically, niosomes have the capability of improving bioavailability, stability and controlled delivery of the drug. These self-assembled structures consist of hydrophilic and lipophilic regions in which the active pharmaceutical ingredient (API) can be entrapped. The preparation of niosomes was extensively studied and tested by various methods and conditions. Based on their characterization, which was done by microscopic analysis (SEM, TEM, and cryo-TEM) and light scattering techniques (DLS, DDLS, and SLS), we were able to select optimal formulations required for the encapsulation of an API and metallic nanoparticles. Drug-based niosomes were prepared and analyzed by UV-Visible spectrophotometric method to understand the incorporation and encapsulation efficiency of the drug. Gold and iron oxide nanoparticles have proven to be effective in cancer therapy and diagnostic tools due to their unique properties. Their encapsulation in niosomes produces a hybrid nanocarrier system, combining the benefits of both nanoparticles. This work discusses the preparations of such niosomal systems and their applications in drug delivery technology.

# *Modelling of transport and reaction in porous catalytic filters*

Bc. Kristýna Idžakovičová (M1)

Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Catalytic monolith converters and particulate filter are devices used in automotive exhaust gas aftertreatment. Purpose of catalytic converters is to abate gaseous pollutants such as CO, nitrogen oxides ( $\text{NO}_x$ ) and hydrocarbons. Particulate filter traps soot and ash particles present in the exhaust gas. Recent efforts aim on making the whole system more compact. One way to accomplish this is to coat catalytic material directly into the filter as on-wall layer or inside the porous wall. This arrangement saves space, weight and cost of the device, reduces overall heat losses and simplifies soot combustion in contact with the catalyst. On the other hand, distribution of the catalytic material must be optimized to meet the antagonistic requirements – low pressure drop and at the same time high filtration efficiency and conversion of gas pollutants. In this work, I study the influence of inlet concentration of reactants and distribution of catalytic material on the overall CO conversion. For the purpose of this work, I use micro-scale 3D-CFD model of porous catalytic filter with nonlinear Langmuir-Hinshelwood kinetics developed in OpenFOAM. The results show sensitivity of the light-off temperature to both gas composition and catalyst distribution in the filter.

# *Influence of flow distribution on CO oxidation in three-way catalyst*

Beatriz Peixe (M1)

Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Automotive catalyst is nowadays an inherent part of the exhaust gas after-treatment systems for combustion engines. During the internal combustion, there is not only the formation of non-toxic gases, but also traces of toxic and polluting substances like carbon monoxide (CO), unburned hydrocarbons, nitrogen oxides (NO<sub>x</sub>) and particulate matter (PM). Aiming on decrease the emissions of these harmful gases, sophisticated devices as the three-way catalyst have been created. One of the most important reactions is the oxidation of carbon monoxide into carbon dioxide (CO<sub>2</sub>). The purpose of this work is to understand how the flow distribution of the inlet mixture can affect CO oxidation in catalytic monolith. The experiments were performed using a special computer-controlled apparatus constituted by a reactor containing a flow distributor and samples of the catalytic monolith, accompanied by analysers, mass-flow controllers and multi-way valve for rapid switching of lean and rich reaction mixtures. CO light-off curves measured with and without several different flow distributors are compared and effects of non-uniform flow distribution on CO conversion are discussed.

# *Reactive Dissolution of Poorly Soluble Prodrug Suspension*

Bc. Erik Sonntag (M2)

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

This work deals with development and validation of *in vitro* dissolution method for an intramuscular depot suspension. Such pharmaceutical formulation is injected into a muscle in a form of a prodrug, which is a substance similar to an API (active pharmaceutical ingredient) with no pharmacological effect on a human body. A depot of solid prodrug particles is formed at the site of administration, which gradually dissolves into the tissue fluid. In a liquid phase, the prodrug is converted to the API by enzymes, which are naturally present in a human body. The API is subsequently transported via blood circulation to the site of action. This research deals with design of the dissolution method, which is an experimental setup that mimics the described process under *in vitro* conditions and allows us to measure the API release kinetics. This dissolution method is part of generic drug development and can also be used for the drug quality control. Various types of dissolution methods were developed for particular depot suspension along with an analytical method to determine the concentration of the API and prodrug. Furthermore, computer simulation was created, which describes the dissolution kinetics of the suspension based on particle size distribution and their specific surface area.

# *Amorphization of drugs in mesoporous silica using solvent evaporation*

Bc. David Zůza (M2)

Školitel: Ing. Ondřej Kašpar, Ph.D.

The amorphization of APIs (Active pharmaceutical ingredients) keeps being an important topic for pharmaceutical companies. The main reason is that the majority of newly discovered APIs are poorly soluble. Preparing them in an amorphous state is a way how to make them dissolve faster. Another reason is that the amorphous form cannot be patented and thus provides a possibility for generic companies to avoid patent collisions. Amorphization in the mesopores of silica particles can be an efficient approach to future drug formulations. The small pores prevent loaded drug from crystallizing, the high specific surface ( $>1000 \text{ m}^2/\text{g}$ ) further promotes dissolution, and the thermal and mechanical stability and biocompatibility make the utilization for oral dosage forms highly desirable. Loading of API into the silica particles can be done by a variety of methods, for example by melt loading, equilibria loading from a solution or by solvent evaporation loading. In this work, the solvent evaporation method is explored in detail in order to obtain general guidelines for the preparation of silica drug formulations in the future. The prepared samples were evaluated by a variety of analytical methods and their dissolution rate was measured and compared with crude API.

# *3D printing of PCL/HA scaffolds for bone tissue engineering*

Bc. Filip Zavřel (M2)

Školitel: Gabriela Ruphuy Chan, M.Sc.Ph.D.

Bone grafting is a widely adopted clinical technique with over 2 million cases every year. It is used for the treatment of wounds that require structural support for the injury to heal properly, followed by a subsequent resorption or a permanent placement of the graft. However, the clinical limitations have been reached with regards to large defects. The incorporated graft, which acts as a cellular scaffold, has to provide a sufficient means for vascularisation and transport of substances both in and out of the structure to prevent necrosis. This places certain requirements on the scaffold surface and porosity as well as the material rate of resorption. The utilisation of 3D printing presents a possible solution to this problem. Using bioresorbable poly( $\epsilon$ -caprolactone) (PCL) polymer, patient-specific structures can be created and enhanced by the addition of hydroxyapatite (HA) particles. This study is aimed to describe the properties and processing parameters of PCL/HA scaffolds created using the 3D printing technique and evaluate their dependency on the hydroxyapatite content.

# *Optimization of liquid dosing for the production of liquid marbles*

Bc. Martin Krov (M1)

Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

In recent years, significant progress has been made in the research of liquid marbles. However, currently, liquid marbles are prepared by manually dripping the liquid onto a layer of powder particles. The aim of this work is to make the fabrication of liquid marbles automated in order to allow larger-scale applications. For the production of liquid marbles and especially for pharmaceutical applications, monodisperse droplets of liquid are required in order to ensure that the content of active pharmaceutical ingredient and the dissolution rate are consistent. In this study, the options of dividing flow and thus using a single pump to drive multiple nozzles are investigated. Furthermore, comparison of different pumping principles was made for dripping and jetting. Moreover, a drop-on-demand system was tested. The effects of a thin wire connected to the nozzle was examined as a potential way to decrease droplet size in the dripping regime. The experiments were carried out using viscous glycerol-water mixtures and a polymer melt. The droplet diameter was measured with a high-speed camera and subsequent image analysis.

# Chemical Engineering II

MÍSTO: B141B

## KOMISE

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

Sandra Kordač Orvalho, Ph.D.

Ing. Denisa Lizoňová

Ing. Kateřina Hejnová (BRE)

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

## PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:40 [Bc. Filip Hládek](#) (M1, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

*Protocells: Comparison of approaches for controlled release*

09:00 [Bc. Jan Šugar](#) (M1, Ing. Viola Tokárová, Ph.D.)

*Temperature-responsive polymer-coated particles for steady cell growth and temperature controlled harvesting*

09:20 [Oskar Marelja](#) (B3, Ing. Martina Ježková)

*Comparison of experiments and numerical models of microfluidic channels*

09:40 [Bc. Adam Baláž](#) (M1, Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D.)

*Formulation of porous poly(lactic-co-glycolic acid) microparticles for controlled drug release*

10:20 [Bc. Martin Šourek](#) (M2, Ing. Martin Isoz, Ph.D.)

*Pore-scale model development for catalytic material washcoating in a filter wall*

10:40 [Bc. Pavel Krýsa](#) (M1, doc. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.)

*Characterization of composite drug particles prepared by dry coating*

11:00 [Bc. Tomáš Lapka](#) (M1, Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D.)

*Optimization of conductive films for electromagnetic shielding applications*

## *Protocells: Comparison of approaches for controlled release*

Bc. Filip Hládek (M1)

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

One of the problems of newly synthesized drugs is their poor water solubility. That can be solved either by amorphization or by loading into a carrier. Though liposomes have been used as carriers, they are not able to effectively carry all APIs. Protocell, that is a mesoporous silica nanoparticle (MSN) core encapsulated within a liposome, might be the solution to that. MSNs are capable of absorbing APIs and improving their solubility and the liposome bilayer prevents leakage and premature release of the loaded API. Thus, the combination of MSNs and liposomes was studied experimentally, exploring the possible means of preparation of protocells. The data were evaluated in means of size distribution, surface charge and morphology, confirming the results by TEM imagery. This work compares the different approaches in order to develop the most appropriate preparation method.

# *Temperature-responsive polymer-coated particles for steady cell growth and temperature controlled harvesting*

Bc. Jan Šugar (M1)

Školitel: Ing. Viola Tokárová, Ph.D.

There is a growing demand for a variety of cells in biotechnology and advanced medicine which pushes the cultivation techniques development further. Moreover, successful cultivation is not only about cell growth, whereas the harvesting seems to play a crucial role in compromising some of the cell features, e.g. cell viability, extracellular proteome, contamination with additives etc. Therefore, utilizing a temperature-controlled harvesting might be a promising method since the temperature drop is easily carried out and causes insignificant stress. The authors will focus on development of novel nanostructured particles coated with temperature-responsive polymer undergoing the hydrophilic/hydrophobic change in a suitable temperature range. These particles will be fabricated to support the anchorage-dependent cell lines to enable their successful growth in perfusion mode either in fluidized bed or agitated bioreactor. The newly developed technique will be validated mainly by the fluorescence microscopy allowing reliable recognition of viable and apoptotic cells or by enzyme activity assays confirming the intactness of cell surface proteins.

# *Comparison of experiments and numerical models of microfluidic channels*

Oskar Marelja (B3)

Školitel: Ing. Martina Ježková

Comparison of experiments and numerical models of microfluidic channels The science of microfluidics is on the rise, and so-called lab-on-a-chip laboratories have high potential for chemical and bio-medical applications. These chips minimize material consumption while maximizing surface and hence phase-to-phase contact. In nano- and micro-scales, the effect of interfacial processes is significant and it is therefore essential to have information about the shape of the interfacial surface as well as the events that are realized through this surface - such as mass transfer, heat transfer and molecule rearrangement to minimize the interfacial energy. The purpose of this study is to compare the experimental observations of fluid interactions in different microchannels with numerical models created with ANSYS Fluent. Once validated, these models will be in the next step used to predict the behavior of fluids within a microchannel and optimize the geometry of the microchannel without the necessity to perform complicated experiments. Two modelling approaches were taken and compared: the Volume of Fluid and the Mixture method. The finding of 4 different interaction phenomena - dripping, squeezing, jetting and tubing - taking place at the microchannel junction was further approved.

# *Formulation of porous poly(lactic-co-glycolic acid) microparticles for controlled drug release*

Bc. Adam Baláž (M1)

Školitel: Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D.

Poly (lactic-co-glycolic acid) (PLGA) in the form of micro- and nano-particles has attracted much attention for applications in drug delivery systems thanks to its tunable degradation rate. In this work, porous microparticles loaded with various model molecules, i.e. Ibuprofen, Curcumin and Indomethacin were prepared. Physico-chemical properties of the formulations were analyzed by IR, XRD and DSC and the drug loading was determined by UV-visible. The role of the porogen in the preparation of the porous particles and its impact on their final properties were investigated. The impact of the nature of the drug on the morphology and on the drug release performance in a simulated lung environment (pH = 7.4) was assessed and conclusions were drawn. These microparticles can find applications in lung cancer treatment.

# *Pore-scale model development for catalytic material washcoating in a filter wall*

Bc. Martin Šourek (M2)

Školitel: Ing. Martin Isoz, Ph.D.

The increasingly stringent automotive emission regulations enforce the use of particulate filters to effectively control the particulate emissions from both diesel and gasoline engines. Due to the cost and size limitations of the exhaust gas after-treatment system, it is favorable to combine the particulate filter with a catalytic reactor for conversion of gaseous pollutants. The properties of the resulting catalytic filter are highly dependent on the quality of the catalytic coating. This study focuses on a development of methodology for simulation of the washcoating process, as one part of a reliable multi-scale CFD modeling environment for catalytic filters. To describe the flow, particle-particle and particle-wall interactions in the water-based slurry during the washcoating we propose a coupled CFD-DEM solver. Initial solver implementation, definition of suitable benchmark cases and intended solver usage are presented.

# *Characterization of composite drug particles prepared by dry coating*

Bc. Pavel Krýsa (M1)

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

Dry coating process is an alternative method to a conventional film coating. This process results in formation of a coating on the surface of drug particles during application of mechanical forces. The protective layer is made out of an appropriate excipient, mostly a deformable polymer. So prepared powder material can be subsequently utilized in different areas. Among them are stabilization of metastable forms of APIs, controlling the drug release characteristics or influencing powders flow properties. Because this process often takes place in milling devices, the success of dry coating is difficult to predict. Therefore, in this work we are focusing on general understanding of the process. Investigated parameters include ratio of particle size and mass of drug and excipient, size and amount of milling balls, and milling frequency. In our case, we are working with a model system that consists of a drug paracetamol and a coating polymer carnauba wax. To minimize impact of particle size during dissolution tests, obtained coated drug particles are sieved into several size fractions. These defined classes are subsequently characterized with a combination of several analytical techniques including SEM, dissolution experiments or Raman mapping.

# *Optimization of conductive films for electromagnetic shielding applications*

Bc. Tomáš Lapka (M1)

Školitel: Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D.

Electromagnetic waves as an important carrier of information have infiltrated all aspects of life thanks to the rapid development of information technology and electronic devices. Electromagnetic interferences (EMI) caused by electromagnetic waves do not only interfere with electrical equipment, but they are also a serious threat to human health. Therefore, in recent years, designing of lightweight and effective materials for EMI shielding applications has gained attention. Polypyrrole (PPy) is an electrically conductive polymer, which can be prepared with different shapes. Each shape has unique properties and behavior. PPy nanotubes (PPy-NT) have attracted much attention due to their high electrical conductivity (up to  $100 \text{ S}\cdot\text{cm}^{-1}$ ). Incorporation of PPy-NT into cellulose nanofibrils (CNF) results in formation of flexible and electrically conductive thin films. This study deals with the elaboration of PPy/CNF thin films with optimal morphology, mechanical properties and electrical conductivity for applications in EMI shielding. The processing conditions were optimized to tune the properties of the films. Finally, EMI shielding tests in the range of 5,85 – 8,20 GHz were carried out on the most electrically conductive films.

# Chemické inženýrství I

MÍSTO: BS4

KOMISE

doc. Ing. František Rejl, Ph.D. (předseda)

Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.

Ing. Jiří Charvát

Ing. Jiří Svoboda, Ph.D. (Kapaji)

Ing. Jiří Vrána, Ph.D. (Pinflow energy storage, s.r.o.)

## PROGRAM

08:00 **zahájení**

08:20 [Jan Eichler](#) (B3, Ing. Petr Mazúr, Ph.D.)

*Realistické modelování zkratových proudů ve svazku vanadové redoxní průtočné baterie*

08:40 [Petr Fatka](#) (B3, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.)

*Developing of a new method for dissolution testing of poorly soluble APIs*

09:00 [Adéla Gottfriedová](#) (B3, Ing. Viola Tokárová, Ph.D.)

*Příprava mikro-strukturovaných povrchů pro kultivaci buněk*

09:20 [Tomáš Hlavatý](#) (B3, Ing. Martin Isoz, Ph.D.)

*Developing a reliable macro-scale CFD model for multi-scale simulations of catalytic filters for automotive exhaust gas aftertreatment*

09:40 [Adam Hrdý](#) (B3, doc. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.)

*Příprava mikročástic citlivých na pH pro perorální administraci*

10:20 [Richard Knopp](#) (B3, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

*Vylepšení postupu nanášení porézních katalytických vrstev do filtru pevných částic*

10:40 [Lucie Kubíčková](#) (B2, Ing. Martin Isoz, Ph.D.)

*Development of a reliable CFD framework for study and optimization of an ejector*

11:00 [Kristýna Kuklová](#) (B3, Ing. Viola Tokárová, Ph.D.)

*Synthesis and characterization of silica nanoparticles prepared in a microfluidic device*

11:20 [Aneta Mauri](#) (B3, prof. RNDr. Drahoslava Janovská, CSc.)

*Jednodimenzionální populační dynamika*

11:40 [Radek Menci](#) (B3, RNDr. Ivan Řehoř, Ph.D.)

*Hydrogelové mikroplavci (hydrogel microswimmers)*

# *Realistické modelování zkratových proudů ve svazku vanadové redoxní průtočné baterie*

Jan Eichler (B3)

Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Společností poptávané intenzivní zapojování obnovitelných zdrojů elektrické energie do přenosové soustavy je limitováno v důsledku jejich fluktuující produkce. Tuto situaci může změnit významnější využití úložišť elektrické energie, která by stabilizovala výrobu elektřiny z obnovitelných zdrojů. V současné době se k danému účelu nejvíce používají lithium-iontové baterie, nicméně v budoucnu budou hrát významnou roli vanadové redoxní průtočné baterie díky své vysoké životnosti, snadné recyklovatelnosti a nezávislé škálovatelnosti výkonu a kapacity baterie. V rámci vývoje této technologie je však třeba řešit i jedinečné inženýrské výzvy, jež se u klasických pevno-elektrodových akumulátorů nevyskytují. Mezi ně patří potlačení toku zkratových proudů v rámci svazku průtočné baterie, které snižují účinnost akumulace elektrické energie. Tato práce se zabývá realistickým popisem jevu zkratových proudů, kdy je uvažována nestejná rychlost elektrochemických reakcí probíhajících na elektrodách v jednotlivých člancích svazku průtočné baterie. Vytvořený model bude následně porovnán s nejčastěji používaným popisem zkratových proudů založeného na reprezentaci svazku průtočné baterie pomocí ekvivalentního elektrického obvodu.

## *Developing of a new method for dissolution testing of poorly soluble APIs*

Petr Fatka (B3)

Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

V současnosti více než 70% nově syntetizovaných léčiv spadá do skupiny obtížně rozpustných látek. Tato vlastnost způsobuje zásadní problémy jak pro biodostupnost tak pro dostatečně rychlý nástup účinku, které jsou nezbytnou součástí uvedení léčiva na trh. Lipidické formulace léčiv přinášejí mnoho výhod oproti běžně užívaným excipientům (přídavné látky), neboť to jsou pro organismus přirozené látky, které podléhají vlastnímu metabolismu. Tím umožňují zlepšit biodostupnost léčiv tím, že je tělo metabolizuje společně s nimi. Problémem je *in-vitro* měření rychlosti uvolňování tohoto typu formulací kvůli často silné interakci mezi lipidem a léčivem zamezující detekci pomocí UV. Aktuálně se používá nepřímá metoda označovaná jako *in-vitro* lipolýza, která však nepřináší objektivní data. Naší snahou je vytvořit jednoduchou formulaci k měření kinetiky uvolňování léčiva a vývoji nové metody měření pro silně lipofilní léčiva. Interakce a homogenita vzniklé formulace léčiva s lipidem je testována pomocí XRD. Po stanovení interakce využíváme upravený přístroj pro měření kinetiky uvolňování modifikovanou metodou přidávání lipázy.

# *Příprava mikro-strukturovaných povrchů pro kultivaci buněk*

Adéla Gottfriedová (B3)

Školitel: Ing. Viola Tokárová, Ph.D.

Kultivace živých buněk je výrazně ovlivněna podmínkami buněčného okolí. Růst a proliferace buněk závisí na teplotě, tlaku, dostupných živinách, koncentraci kyslíku, oxidu uhličitého apod. Velkou roli hraje též substrát, na kterém buňka roste, a to jak po chemické, tak fyzikální stránce. Cílem předkládané práce je vytvoření hierarchického strukturovaného povrchu, a studium jeho interakce s buněčnou kulturou. Takový povrch může být vytvořen pomocí metody Langmuir-Blodgett nebo spin-coatingu s využitím polystyrenových (PS) částic. Těmito technikami je vytvořena monovrstva částic, ze které je otisky do polymerní vrstvy získána negativní a následně pozitivní replika. Pro jednotlivé velikosti PS částic jsou hledány ideální parametry metod pro vytvoření monovrstvy. Získané negativní i pozitivní repliky jsou pak charakterizovány s využitím rastrovacího elektronového mikroskopu, a poté bude sledováno chování buněk při kontaktu s nimi.

# *Developing a reliable macro-scale CFD model for multi-scale simulations of catalytic filters for automotive exhaust gas aftertreatment*

Tomáš Hlavatý (B3)

Školitel: Ing. Martin Isoz, Ph.D.

The increasing number of vehicles and higher interest in ecology lead to tightening of laws on automotive exhaust gas after-treatment. The exhaust gas after-treatment currently comprises several clean-up devices. In this study, we concentrate on catalytic conversion of environment endangering gases and on trapping of the particulate matter. Historically, the catalytic conversion and the filtration of soot particles were performed in independent devices. However, recent trend is to combine the catalytic converter and soot filter into a single device, the catalytic filter. Compared to the standard two-device system, the catalytic filter is more compact and has lower heat-losses. Nevertheless, it is highly sensitive to the catalyst distribution in the monolithic filter matrix. As a part of an ongoing research aimed at multi-scale modeling of catalytic filters, we build on previously published results and prepare a geometrically-realistic 3D macro-scale model of the catalytic filter. On one hand, the newly developed model enables consistent data transfer from macro- to pore-scale models. On the other hand, the results of the new model are directly comparable to experimental data and to results of available surrogate models.

# *Příprava mikročástic citlivých na pH pro perorální administraci*

Adam Hrdý (B3)

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

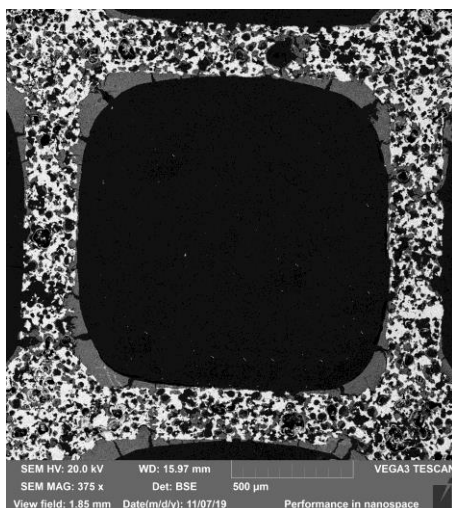
Nízká rozpustnost mnohých účinných látek je jedna z hlavních komplikací při aplikaci těchto látek v praxi. Cílem této práce je vytvořit postup pro přípravu mikročástic umožňujících kontrolované uvolňování léčiva pro perorální administraci. Mikročástice budou tvořené polymerní matricí, která bude stabilizovat účinnou látku v amorfní formě, ale také působit proti vysrážení léčiva. Polymerní matricí rozumíme směs polymerů skládající se z jednoho polymeru, který je rozpustný v kyselém prostředí, zatímco druhý polymer bude tvořit matrice a jeho rozpustnost nebude na pH závislá. Pro přípravu mikročástic bude použit emulgační proces umožňující tvorbu částic o různé velikosti a složení. Pro stabilizaci vytvořené emulze budou testovány dva postupy a to použití surfaktantu nebo aplikace pevných nanočástic stabilizujících emulze typu olej-voda. K formování suspenze dochází díky metodě solvent evaporation patřící do emulzifikačního procesu, kde se používá těkavá složka organické fáze, jako rozpouštědlo polymerů. Po vzniku emulze se za zvýšení teploty se snáze odpařuje organická fáze, přičemž dochází k formování mikročástic. Morfologie spolu s dalšími vlastnostmi mikročástic byly podrobně prozkoumané kombinací několika různých technik včetně OM, SEM, DLS, SLS a UV/VIS spektroskopie.

# Vylepšení postupu nanášení porézních katalytických vrstev do filtru pevných částic

Richard Knopp (B3)

Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Ve spalovacím motoru vznikají během provozu výfukové plyny obsahující také pevné částice (saze). Pomocí katalyzátoru se zdraví škodlivé plynné složky, především  $\text{NO}_x$ , CO a nespálené uhlovodíky, přeměňují na  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}_2$  a  $\text{N}_2$ . Pevné částice se odstraňují pomocí filtru pevných částic. V moderních filtrech se dovnitř nanáší katalytická vrstva, která zajišťuje konverzi nežádoucích plynných produktů spalování přímo ve filtru. Filtry pevných částic jsou tvořeny úzkými kanálky, které jsou na jednom konci – střídavě na vstupu a výstupu – zaslepeny. Proud plynu je proto nucen projít skrz porézní stěnu do sousedního kanálku a pevné částice zůstávají zachyceny ve filtru a neunikají do ovzduší. Cílem práce je vylepšit postup nanášení katalytické vrstvy do filtru. Postupně byly měněny vlastnosti jak nanášené suspenze, tedy pH směsi a velikost částic, tak i podmínky nanášení, tzn. namáčení vzorků před nanášením do vody, tlak profukování a podmínky sušení. Byl zkoumán vliv parametrů přípravy na kompaktnost a tloušťku nanesené vrstvy a dále poměr částic, které se dostaly do pórů ve stěně filtru a které zůstaly na vnější straně kanálku. Získané poznatky umožňují přesněji řídit rozmístění a strukturu katalytické vrstvy ve filtru tak, aby bylo dosaženo co největší konverze a nejmenší tlakové ztráty.



# *Development of a reliable CFD framework for study and optimization of an ejector*

Lucie Kubíčková (B2)

Školitel: Ing. Martin Isoz, Ph.D.

In this study, fundamentals of a CFD-based analysis of an ejector are presented. The ultimate goal of the research performed in cooperation with the Mass Transfer Research Group at UCT Prague is to facilitate the design phase of ejector devices for applications in chemical engineering. The final aim of the current project is to design and validate 3D transient multiphase simulation of the ejector. At the moment, we focus on evaluation of the CFD results sensitivity with respect to various simulation parameters, including the ejector geometry, flow velocity and turbulence modeling. To do so, a fully parametrized and automated CFD framework based on highly structured wedge meshes for axisymmetric RANS simulations is being implemented. We are aware of the loss of fidelity caused by the dimensionality reduction of the model and by computing only the Reynolds-averaged flow solution. However, the reduction in the computational complexity linked to the model and geometry simplification enables fast evaluation of CFD results and testing of multiple configuration in acceptable times. Furthermore, the accuracy of the simplified CFD models is evaluated using specifically tailored experimental data.

# *Synthesis and characterization of silica nanoparticles prepared in a microfluidic device*

Kristýna Kuklová (B3)

Školitel: Ing. Viola Tokárová, Ph.D.

The latest trends show increase in the use of nanoparticles in pharmaceutical, biomedical and genomic industries because of their optical, electromagnetic or mechanical properties. Specifically, silica nanoparticles have found potential applications in medicine due to bioconjugation possibilities. The properties of nanoparticles depend on their size, morphology and structure (e.g. silica nanoparticle surface charge density or size distribution significantly affects utilization in the area of drug and genome delivery or cellular uptake). One of the most common methods for nanoparticle production is the batch process. However, it has some limitations; for example, precipitation reactions are often affected by undesired aggregation phenomena. Therefore, the continuous synthesis of silica nanoparticles in a microfluidic device is alternatively used as a method that reliably controls input variables such as the flow rates of reagents. This presented work is aimed to produce silica nanoparticles with a narrow particle size distribution using the microfluidic setup. Accordingly, part of the work is to set optimal parameters for the microfluidic chip and study the mixing phenomenon of the reactants in order to achieve reproducible nanoparticles with a uniform size distribution.

# *Jednodimenzionální populační dynamika*

Aneta Mauri (B3)

Školitel: prof. RNDr. Drahoslava Janovská, CSc.

Nejprve se stručně seznámíme s některými názornými a intuitivními modely používanými v rámci jednodimenzionální populační dynamiky. Jedním z řady možných způsobů, pomocí kterých můžeme populační dynamiku modelovat, je logistická rovnice. Logistická rovnice, přesněji logistická funkce, nachází uplatnění nejen v biologii a v chemii, ale také např. v modelování neuronových sítí, v ekologii, v ekonomii, v matematické pravděpodobnosti, hraje důležitou roli i ve statistických modelech logistické regrese, atd. V práci uvádíme několik postupů řešení logistické diferenciální rovnice. Logistickou funkci si graficky znázorníme. Teorii budeme ilustrovat na vybraných příkladech a jejich řešení. V závěru práce objasníme pojem “harvesting” (žně) a ukážeme, že tento model hraje neopomenutelnou úlohu v logistické rovnici pro některé biologické systémy.

## *Hydrogeloví mikroplavci (hydrogel microswimmers)*

Radek Menci (B3)

Školitel: RNDr. Ivan Řehoř, Ph.D.

Funkční roboti v mikroměřítku mohou mít v budoucnu velmi široké spektrum aplikací. Například v lékařství mohou být využíváni pro pohyb v krevním řečišti (transport léčiv, monitoring) nebo pro jemné mechanické úkony při operacích, v průmyslu pro manipulaci, konstrukci a výrobu dalších předmětů v mikroměřítku. Pro všechny aplikace je klíčová schopnost robotů se pohybovat. Pohyb v těchto měřítkách není jednoduchý z důvodu vysokých povrchových (sucho) a viskózních sil (mokra) (viz. Scallop theorem, který popisuje problémy spojené s pohybem při nízkých hodnotách Reynoldsova čísla v Newtonovských tekutinách). V tomto projektu vyvíjíme roboty, kteří se ve vodných roztocích pohybují s využitím undulačního pohybu, který připomíná pohyb úhoře. Roboti jsou litograficky vyráběni z fotorezponzivního hydrogelu. Problémy spojené s pohybem řešíme pomocí jednoho stupně volnosti a dvou symetricky sdružených ramen, které vykonávají undulační pohyb a tím posouvají robota vpřed. První experimenty ukazují funkčnost tohoto designu, roboti se při pulzním osvětlení opravdu směrově pohybují. Dále se v tomto projektu zaměříme na optimalizaci designu robota ve smyslu dosažení maximální citlivosti na osvětlení a zvětšení vzdálenosti uražené na jeden světelný pulz.

# Chemické inženýrství II

MÍSTO: BS5

KOMISE

doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha (předseda)

Ing. Vladislav Nevoral, Ph.D.

Ing. Vojtěch Šálek

Ing. Libor Labík, Ph.D. (Mondi Štětí, a.s.)

Ing. Jakub Dvořák

PROGRAM

08:00 **zahájení**

08:20 [David Müller](#) (B3, Ing. Petr Mazúr, Ph.D.)

*Evaluation of electrochemical stability of selected organic electroactive compounds for application in redox flow battery*

08:40 [Jiří Perner](#) (B3, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)

*Studie elektrostatického nabíjení polyethylenových částic v prostředí dielektrických kapalin*

09:00 [Tomáš Pícek](#) (B3, doc. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.)

*Charakterizace orálně disperzních filmů pro doručování léčiv*

09:20 [Jakub Staš](#) (B3, Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.)

*Modelování transportu ve 3D rekonstruovaném dutém vlákne*

09:40 [Jan Trnka](#) (B2, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

*Plug flow reactor for continuous preparation of mesoporous silica*

10:20 [Miroslav Večeřa](#) (B3, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.)

*Optimalizace přípravy léčiv na fluidním loži*

10:40 [Olga Vojtíšková](#) (B3, Ing. Jakub Mužík)

*Studium reakce vzniku soli těžce rozpustné aktivní farmaceutické látky*

11:00 [Miroslav Vrána](#) (B3, Ing. Jan Haidl, Ph.D.)

*Mechanistický model ejektoru kapalina-kapalina*

11:20 [Matouš Pechar](#) (B3, Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D.)

*Investigation of application of polyvinyl alcohol for preparation of API-polymer amorphous solid dispersions*

11:40 [Alžběta Zemánková](#) (B3, Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D.)

*Screening of coamorphous systems for drug delivery by calorimetry*

# *Evaluation of electrochemical stability of selected organic electroactive compounds for application in redox flow battery*

David Müller (B3)

Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Redoxní průtočné baterie jsou slibnou technologií pro stacionární akumulaci velkých objemů elektřiny produkované kupř. obnovitelnými zdroji. Aktuálně nejvyspělejšími a nejrozšířenějšími jsou baterie s vanadovými elektrolyty. Oscilující cena vanadu a některé jeho nepříznivé vlastností motivují výzkum a vývoj v oblasti organických elektrolytů pro průtočné baterie. Cílem práce je studium chemických a elektrochemických vlastností vybraných derivátů antrachinonu. Je sledován vlivu typu a pozice substituentů na aromatickém jádře na relevantní chemické a elektrochemické vlastnosti pro aplikaci v průtočných bateriích (redukční potenciál, mechanismus a vratnost elektrodové reakce a rozpustnost ve vodném prostředí). Hlavní důraz práce je kladen na posouzení chemické a elektrochemické stability látek za podmínek aplikace, a to jak v kyselém (1M  $\text{H}_2\text{SO}_4$ ), alkalickém (1M  $\text{NaOH}$ ) i neutrálním prostředí (1M  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ ). Používané metody jsou cyklická voltametrie a cyklické nabíjení a vybíjení za konstantního proudu v průtočném polo-článku. U vybraných vzorků je následně prováděna *post mortem* NMR analýza (spolupráce s prof. Kvíčalou, ÚOCH) s cílem zjistit příčiny omezené stability.

# *Studie elektrostatického nabíjení polyethylenových částic v prostředí dielektrických kapalin*

Jiří Perner (B3)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Electrostatic charging of liquids is responsible for numerous industrial problems, such as sudden spark discharges that can ignite flammable organic vapours. Another problem is manifested during the slurry ethylene polymerization to PE, where the particle charging affected by the presence of dielectric liquid causes unwanted agglomeration. PE particles get charged by particle-particle, particle-liquid or particle-wall interactions and when the charge exceeds a critical value, the particles adhere to the reactor wall or form agglomerates which negatively impact the reactor operation. Despite the industrial importance, the knowledge of charging mechanisms is lacking. To build this knowledge, we need to develop a method for the measurement of charging of liquid dielectrics and particles in liquid dielectric media. In this work, we used a mixer with a metal charging adaptor for charging the samples. Firstly, we measured the electrostatic charging trends of pure dielectric liquids. We show that charging trends can be correlated with the dielectric constant of hydrocarbons. Secondly, we measured the charging of PE particles in hexane. The particle's charge is shielded by the liquid; therefore we aim to develop a new apparatus that can accurately measure the charge on "wet" particles.

# *Charakterizace orálně disperzních filmů pro doručování léčiv*

Tomáš Pícek (B3)

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

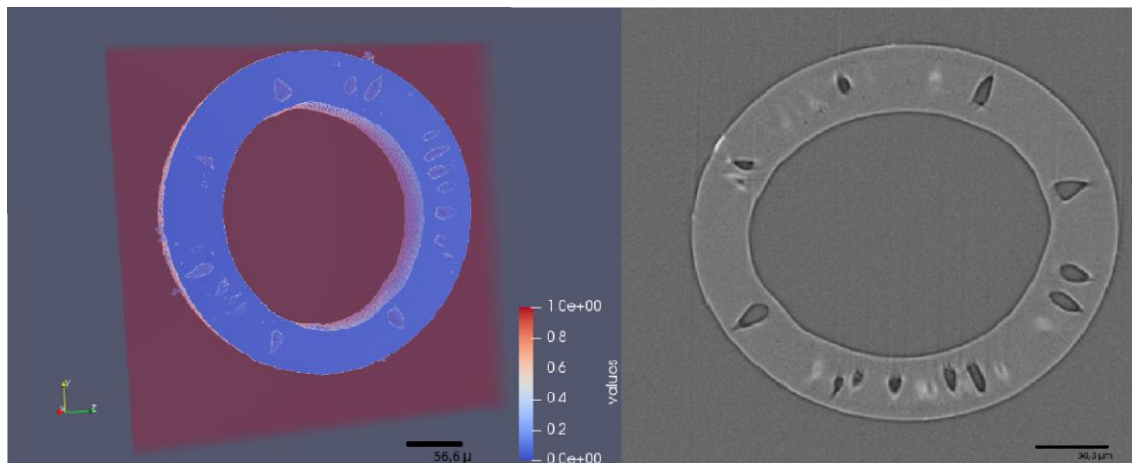
Orálně disperzní filmy (ODF) jsou novou formou léčiv usnadňující aplikaci a dávkování léčiva do lidského organismu. Jedná se o alternativní formu léčiva, která usnadňuje aplikaci u pacientů, pro které je klasická forma podání nepříjemná nebo nemožná. ODF je možné vyrábět několika způsoby, např. tvorby filmu odpařením rozpouštědla nebo elektrovlákňováním. Vzhledem na strukturu a vlastnosti vytvořených filmů byly připravené filmy analyzovány kombinací několika technik, a to měřením kinetiky disoluce, analýzou morfolgie pomocí SEM ale také měřením mechanických vlastností filmu. Pro porovnání byla také testována rozpustnost ODF oproti fyzické směsi léčiva a pomocné látky. Vzhledem na vláknitou strukturu filmu připraveného pomocí elektrovlákňování byl otestován také vliv laminačního tlaku na strukturu filmu a rozpustnost léčiva ve vodném prostředí. Z výsledků vyplývá, že laminační tlak nemá vliv na strukturu filmu a na rozpustnost účinné látky. Tyto závěry pomohou optimalizovat budoucí výrobu a skladování této nové formy léčiva.

# Modelování transportu ve 3D rekonstruovaném dutém vlákně

Jakub Staš (B3)

Školitel: Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.

V dnešní době si již uvědomujeme, že ložiska fosilních paliv nejsou bezedná. To se týká rovněž zemního plynu, který lze nahradit bioplynem jakožto alternativou, která vzniká jako vedlejší produkt mnoha procesů. Bioplyn ovšem není tvořen pouze energeticky významným metanem, ale nezanedbatelnou část tvoří nespalitelné plyny jako např. oxid uhličitý. K odstraňování těchto příměsí se běžně používají membránové moduly složené ze svazků dutých vláken. V rámci spolupráce s firmou MemBrain s.r.o. se zabýváme optimalizací porézní struktury dutých vláken pro co nejúčinnější separaci plyných směsí, zejména bioplynu. Předmětem tohoto příspěvku je pak vytvoření dynamického modelu transportu směsi plynů skrze stěnu dutého vlákna s obecnou morfologií pórů. Pro tyto účely je prostorově trojrozměrná geometrie pórů generována jednak uměle jako uživatelsky definovaná pravidelná struktura, jednak rekonstrukcí reálného vlákna z mikro-tomografických snímků. Vytvořený model je založen na popisu difuze Fickovým zákonem, ale následně bude rozšířen o popis dělení plyných směsí na základě Maxwellových-Stefanových rovnic.



# *Plug flow reactor for continuous preparation of mesoporous silica*

Jan Trnka (B2)

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

Mezoporézní silikové částice se díky svým mimořádným schopnostem amorfizace látek absorbovaných do jejich pórů nově začínají používat i jako farmaceutický excipient pro formulaci špatně rozpustných léčiv. V dnešní době je bohužel jejich výroba poměrně nákladná a průmyslově vyráběné částice zatím nedosahují kvalit částic připravovaných v laboratoři. Současné laboratorní přípravy částic jsou však náročné na převedení do větších měřítek. Dosud se mezoporézní silika vyrábí pouze vsádkovým způsobem. Zlevnit a zefektivnit produkci částic by mohlo převedení výroby do kontinuálního režimu. Slibným řešením se zdá být využití průtočného reaktoru s pístovým tokem, a to zejména díky stabilnímu toku, snadnému nastavení doby zdržení reakční směsi a možnosti převedení výroby do větších měřítek pomocí paralelizace. Cílem práce je navrhnout průtočný reaktor s pístovým tokem na výrobu silikových částic, následně pak navázat na reaktor další jednotkovou operaci, jako například mletí částic na definovanou velikost či jejich roztrídění dle velikosti, aby bylo možné připravovat částice s přesně definovanými parametry. Pro porovnání připravených vzorků bude vyhodnocena jejich velikost pomocí statického rozptylu světla, morfologie pomocí elektronového mikroskopu a měrný povrch pomocí sorpce dusíku.

## *Optimalizace přípravy léčiv na fluidním loži*

Miroslav Večeřa (B3)

Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Jeden z hlavních problémů léčivých látek je jejich nízká rozpustnost ve vodném prostředí, která vede k nízké biodostupnosti a pozdnímu nástupu účinku. Tento problém se dnes řeší mnohazpůsoby: kontrola velikosti částic, amorfizace, tvorba solí ze silných zásad a další. Nová příprava soli aktivní látky je prováděna ze slabé zásady ve vodném prostředí. Voda představuje procesní problém při vytváření pevnofázového produktu. S optimalizovaným množstvím vody byl vzniklý roztok soli nastříkovan na částice cukru na fluidním loži, kde dochází k potahování, sušení a tvorbě granulí. Pomocí fluidního lože kontrolujeme velikost částic v granulátu. Amorfní stav léčiva potvrdila analýza na rentgenové difraktometrii. Díky tomu má produkt vysokou rychlost uvolňování aktivní látky, jež byla detekována pomocí UV-imagingu. Do formulace přidáváme biodegradovatelný polymer, který funguje jako stabilizátor při disoluci a chrání léčivo v amorfní formě. Výhodami této metody jsou rapidní snížení počtu výrobních kroků a pomocných látek, bezprašný proces a kontrola rychlosti uvolňování léčiv. Oproti originálnímu produktu je naše sůl výrazně méně hygroskopická a stabilnější. Navíc díky kontrole a monitoringu produktu na úrovni částic budeme schopni předvídat chování tablet připravených z tohoto granulátu.

# *Studium reakce vzniku soli těžce rozpustné aktivní farmaceutické látky*

Olga Vojtíšková (B3)

Školitel: Ing. Jakub Mužík

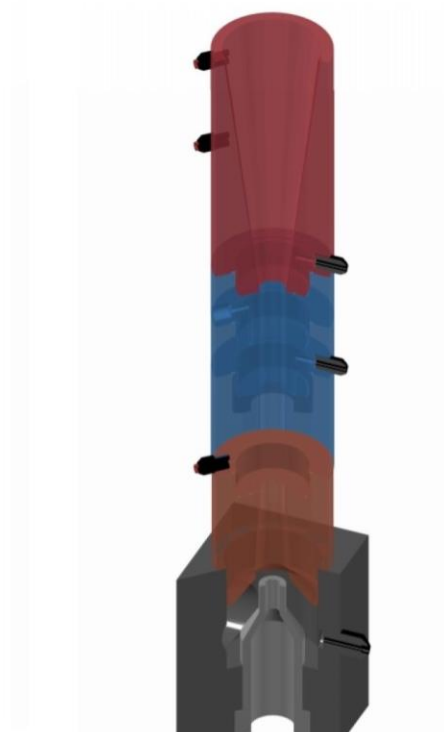
Řada léčiv se potýká s nízkou rozpustností, která je nežádoucí a představuje problém pro jejich biodostupnost v těle. Jednou z možností řešení je převod látky ve formě volné kyseliny na ve vodě rozpustnou sůl pomocí tepelně indukované reakce s alkalizérem ve vodném prostředí. V současné době se pro tento účel jako alkalizér využívá hydroxid sodný, ten je ale značně problematický, jeho sůl je velmi agresivní a hygroskopická, což vede k chemické nestabilitě a procesním problémům, záměnou za slabý alkalizér došlo k eliminaci těchto potíží. Tato studie objasňuje kinetiku této reakce pomocí UV spektrofotometrie reakční směsi. Znalost kinetiky je zcela zásadní a značně zjednodušuje odhad a přizpůsobení optimálních reakčních podmínek, čímž má výsledek této studie potenciál nejen pro vědecké, ale i procesní využití.

# *Mechanistický model ejektoru kapalina-kapalina*

Miroslav Vrána (B3)

Školitel: Ing. Jan Haidl, Ph.D.

Ejektorové čerpadlo kapalina-plyn je konstrukčně jednoduché a spolehlivé zařízení, které využívá energii paprsku kapaliny k čerpání plynu. Při čerpání dochází k tvorbě jemné disperze a ejektor lze tak využít jako efektivní zařízení pro sdílení hmoty. Současný popis ejektoru spočívá však téměř výhradně v empirických korelacích bez bližšího porozumění dějům probíhajících uvnitř. V této práci otevíráme problematiku pochopení chování ejektoru prostřednictvím studie provedené na jednodušším jednofázovém zařízení typu kapalina-kapalina. Pro účely této práce byl upraven stávající poloprovozní ejektor voda-vzduch pro čerpání kapaliny a byly provedeny experimenty zahrnující různé geometrie trysek i těla ejektoru. Naměřená data pro jednotlivé konfigurace jsou zpracována v podobě energetické účinnosti, bilance hybnosti a bilance mechanické energie. Na základě naměřených tlakových profilů podél zařízení jsou identifikovány zóny, ve kterých dochází k šokové ztrátě energie. Tyto dílčí ztráty jsou popsány pomocí individuálních součinitelů místních odporů.



# *Investigation of application of polyvinyl alcohol for preparation of API-polymer amorphous solid dispersions*

Matouš Pechar (B3)

Školitel: Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D.

A promising way to improve the bioavailability of poorly soluble active pharmaceutical ingredients (APIs) is their integration into polymer matrices and formation of amorphous solid dispersions (ASDs). Hot melt extrusion (HME) belongs among the most promising methods for preparing ASDs. It offers a platform for the development of a variety of solid dosage forms covering oral, parenteral and topical applications. It is used to manufacture a wide range of delivery systems providing sustained, modified and targeted drug delivery. Therefore, it is now considered as a well-recognized pharmaceutical technology. In this project, the application of polyvinyl alcohol (PVA) for preparation of API-polymer ASDs was investigated. First, the solubility of selected APIs (indomethacin, naproxen, and ibuprofen) in PVA and glass transition temperatures ( $T_g$ ) of API-PVA mixtures were determined by calorimetry. Based on these results in combination with theoretical models for solid-liquid equilibrium, such as Flory-Huggins solution theory, and description of  $T_g$  of mixtures, the temperature – composition phase diagrams were constructed. Mixtures of PVA with indomethacin and ibuprofen were prepared by hot melt extrusion and their stability was compared with prediction of stability from phase diagrams.

# *Screening of coamorphous systems for drug delivery by calorimetry*

Alžběta Zemánková (B3)

Školitel: Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D.

Co-amorphous drug delivery systems have recently attracted a considerable interest in the pharmaceutical field due to their potential to improve oral bioavailability of poorly water-soluble drugs via drug dissolution enhancement as a result of the amorphous nature of the material. A co-amorphous system is obtained by using low molecular weight components that are mixed into a homogeneous single-phase system. The amount of amorphous stabilizer can be significantly reduced compared with other amorphous stabilization techniques. In this study, screening of different combinations of model drugs, such as indomethacin with various co-formers, such as amino acids or nucleobases, was carried out. Screening was performed based on measurement of glass transition temperatures by differential scanning calorimetry and their comparison with theoretical values calculated from Gordon-Taylor equation. Arginine was chosen as the best co-former based on data obtained by the screening. The co-amorphous system indomethacin - arginine was further investigated including dissolution tests. The obtained dissolution profiles were confronted with those for mixture of crystalline indomethacin and arginine and with pure indomethacin. Moreover, physical stability of co-amorphous overtime was assessed.

# Chemické inženýrství III

MÍSTO: B07

## KOMISE

prof. Dr. Ing. Juraj Kosek (předseda)

Ing. Zdeněk Grof, Ph.D.

Ing. Jakub Crha

Ing. Jiří Maršálek, Ph.D. (Membrain, s.r.o.)

Ing. Tereza Čmelíková

## PROGRAM

08:00 **zahájení**

08:20 [Bc. Helena Bakešová](#) (M1, doc. Dr. Ing. Milan Jahoda)

*Měření sálání pomocí deskových termočlánků*

08:40 [Bc. Samuel Frei](#) (M1, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

*Vývoj magnetolipozomů a využití jejich magnetických vlastností*

09:00 [Bc. Ondřej Navrátil](#) (M2, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

*Drying of Multilayer Pharmaceutical Coating: Modeling and Experimental Study*

09:20 [Bc. Kristina Oftnerová](#) (M1, doc. Dr. Ing. Milan Jahoda)

*Modelování výtoku metanu z bezpečnostní pojistky u aut na CNG*

09:40 [Bc. Tomáš Pacht](#) (M1, Ing. Bc. Jan Němec)

*Modelování konverze plynu v katalytickém filtru pevných částic*

10:20 [Bc. Martina Reisnerová](#) (M1, Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.)

*Stanovení hydraulických a transportních charakteristik strukturované výplně Mellapak 250Y*

10:40 [Bc. Přemysl Richtř](#) (M2, Ing. Petr Mazúr, Ph.D.)

*Optimalizace nabíjecího cyklu zinko-vzduchové baterie*

11:00 [Bc. Václav Šmíd](#) (M1, Ing. Jan Haidl, Ph.D.)

*Možnosti zvýšení energetické účinnosti ejektorového čerpadla kapalina-plyn*

11:20 [Bc. Jakub Strnad](#) (M2, doc. Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.)

*Tvorba elektrokineticky řízených vírů na heterogenních iontově-výměnných membránách*

# *Měření sálání pomocí deskových termočlánků*

Bc. Helena Bakešová (M1)

Školitel: doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

Radiace neboli sálání je, vedle konvekce (proudění) a kondukce (vedení), dalším mechanismem sdílení tepla. Přestože je radiační složka při základních výpočtech často zanedbávána, v prostoru požáru, kde teploty přesahují i 1000 °C, tvoří dominantní složku celkového tepelného toku. Z tohoto důvodu je její pochopení a popsání nezbytné pro zdokonalení požární bezpečnosti v oblastech predikce teploty a chování různých materiálů při hoření. Tato práce se zabývá deskovými termočlánky, které byly původně vymyšleny k měření a kontrolování teploty ve zkušebních pecích pro testování stavebních materiálů a konstrukcí. V posledních letech se zkoumá i jejich možné využití pro měření dopadajícího radiačního tepelného toku na tělesa. Na rozdíl od běžně užívaných komerčních radiometrů jsou deskové termočlánky velmi robustní, a kromě toho jsou i cenově mnohem dostupnější. Podstatnou výhodou je také jejich jednoduchost, především co se experimentů přímo v terénu (požárních zkoušek) týče. Práce se konkrétně zaměřuje na kalibraci deskových termočlánků pomocí kónického kalorimetru a jejich budoucí použití při terénních experimentech.

# *Vývoj magnetolipozomů a využití jejich magnetických vlastností*

Bc. Samuel Frei (M1)

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

Tato práce se zabývá možnými postupy přípravy magnetolipozomů. Magnetolipozom je částice tvořená dvěma komponenty: i) lipozomy, kulovité částice tvořené fosfolipidovou dvojvrstvou, které slouží jako nosič hydrofilních a hydrofobních látek a ii) magnetickými nanočásticemi, kterými jsou v tomto případě nanočástice  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ . Zvolený postup přípravy zahrnuje vytvoření tenkého filmu a jeho hydrataci následovanou úpravou velikosti pomocí extruze přes membránu nebo sonikace. Koprecipitací byli připraveny a dále použity tři druhy nanočástic  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  a to hydrofilní, které byly stabilizované pomocí dextranu 40 nebo citrátu, a hydrofobní stabilizované pomocí DPPC (diaplmitylfosfatidylcholin). Pomocí laserové skenovací konfokální mikroskopie byla potvrzena schopnost enkapsulovat hydrofilní barviva 5(6)-karboxyfluorescein a Atto 532. Pro hydrofobní látky byla tato schopnost potvrzena rovněž využitím dvou barviv, a to kurkuminu a nilské červeně. Magnetické vlastnosti byly potvrzeny pozorováním chování vzorku v blízkosti neodymového magnetu. Rovněž bylo zaznamenáno vylučování hydrofobní látky v přítomnosti komponentu, který je jí schopen odebírat (buňky/prázdné lipozomy). Dále byl studován vliv proměnlivého magnetického pole na efektivitu vylučování.

# *Drying of Multilayer Pharmaceutical Coating: Modeling and Experimental Study*

Bc. Ondřej Navrátil (M2)

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

In the pharmaceutical industry, multilayer drug coating is used for the manufacturing of drug forms with enhanced release characteristics. Additional layers allow to alter the release kinetics of an API (active pharmaceutical ingredient) or to stack multiple APIs, thus to create a more efficient drug delivery system. Coatings are commonly applied in the form of a polymer solution to improve their mechanical properties. On an industrial scale, coating methods such as fluid bed coating or spray coating are capable of forming uniform layers. However, pharmaceutical products must meet strict quality requirements and the knowledge of the coating drying kinetics is important for better process control and error avoidance. This work aims to study both experimentally and theoretically the drying kinetics of a polymer solution in a single layer setup. As a model coating medium, we use a water solution of polyvinylpyrrolidone. For this setup, we present a custom convective dryer suitable for the evaluation of the heat and mass transfer coefficients. To better understand the drying kinetics, we also develop a mathematical model describing involved mass and heat fluxes and compare the predicted results to experimental data.

# *Modelování výtoku metanu z bezpečnostní pojistky u aut na CNG*

Bc. Kristina Oftnerová (M1)

Školitel: doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

Ochrana životního prostředí je v posledních letech jednou z celosvětových priorit. Její součástí je snaha o minimalizaci emisí v silniční dopravě. Jednou z cest je využívání vozidel s alternativními palivy, mezi která patří vozidla poháněná zemním plynem (CNG). Stlačený zemní plyn je skladován v tlakové nádobě a z hlediska bezpečnosti je každá nádrž opatřena bezpečnostní pojistkou. Bezpečnostní tlaková pojistka používaná u aut je spouštěná teplotou. Uvnitř ní se nachází nízko-teplotně tavitelná slitina, která udržuje píst v pojistce stlačený, plyn tak za normálních okolností neuniká. Po zahřátí na teplotu 110 °C se slitina roztaví, píst se uvolní a CNG začne z tlakové lahve unikat přes 6 otvorů, které se nachází po stranách na vrchní části pojistky. Cílem mé práce je sestrojení modelu pro výtok metanu z bezpečnostní pojistky, výpočet tlakové ztráty v oblasti výtoku a porovnání zjištěné hodnoty s experimentálními daty. Znalost charakteru vzniklého nadzvukového proudění je důležitá například při zásahu hasičského sboru u nehody.

# *Modelování konverze plynu v katalytickém filtru pevných částic*

Bc. Tomáš Pachl (M1)

Školitel: Ing. Bc. Jan Němec

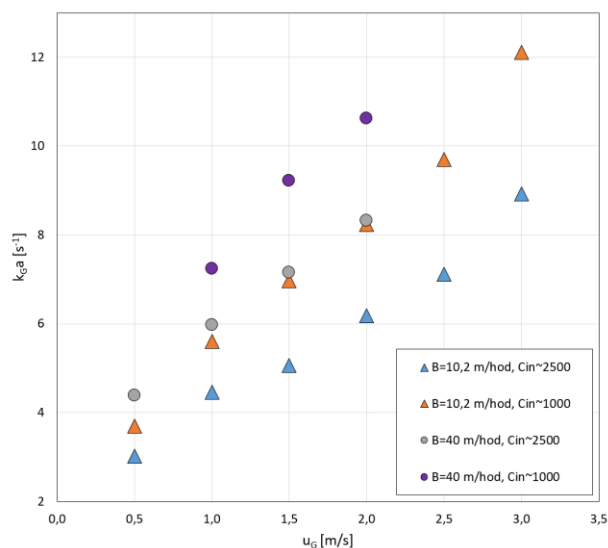
Ochrana zdraví obyvatel je velice důležitá, a proto se stále zpřísňují emisní normy pro automobily. Dnes jsou katalytické konvertory a filtry pevných částic nedílnou součástí každého vozu. Konvertory snižují množství škodlivých složek jako jsou oxidy dusíky, oxid uhelnatý, nespálené uhlovodíky a převádějí je na běžně se vyskytující atmosférické plyny. Filtry zachytávají malé částice hmoty, které jsou tvořeny především sazí. Do filtru je možné nanést katalytickou vrstvu a spojit tak funkce katalytického konvertoru a filtru do jednoho zařízení. Pak je nutné minimalizovat tlakovou ztrátu, zajistit dostatečnou konverzi plynů i filtrační účinnost. Matematické modely pomáhají při vývoji těchto katalytických filtrů. Detailní 3D modely mají vysokou náročnost na výpočetní techniku, proto byl v této práci použit tzv. 1D+1D model. První část značí souřadnici podél kanálku a druhá skrze stěnu. Pro zpřesnění výpočtu konverze plynu byl stávající model rozšířen o difuzi plynu ve stěně filtru ke katalytickým centrům. Výsledný model obsahuje další 1D část, jedná se tedy o 1D+1D+1D.

# Stanovení hydraulických a transportních charakteristik strukturované výplně Mellapak 250Y

Bc. Martina Reisnerová (M1)

Školitel: Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.

Absorpce, založená na rozdílné rozpustnosti plyných složek v rozpouštědle, je velice významný proces sdílení hmoty především kvůli širokému uplatnění při čištění odpadních plynů. Absorpční kolony mohou být patrové nebo plněné sypanou či strukturovanou výplní. V naší laboratoři se zabýváme zkoumáním transportních a hydraulických vlastností strukturovaných a sypaných výplní. Pro popis procesů se spojitým stykem fází je potřeba znát koeficienty přestupu hmoty a efektivní mezifázovou plochu. Experimentální stanovení koeficientů se provádí ve vhodně zvoleném systému, kde uvažujeme pouze přestup v jedné fázi. Pro získání objemového koeficientu přestupu hmoty v plynné fázi neboli  $k_{Ga}$  existuje řada metod, mezi dvě nejpoužívanější patří chemisorpce oxidu siřičitého do roztoku hydroxidu sodného a čpavku do roztoku zředěné kyseliny sírové. Literární hodnoty  $k_{Ga}$  stanovené různými metodami na různých pracovištích se liší až násobně. Cílem práce je stanovit  $k_{Ga}$  dvěma metodami na jednom zařízení a na jednom pracovišti, což doposud nebylo v otevřené literatuře publikováno. V rámci této práce byla změřena tlaková ztráta a stanoveny hodnoty  $k_{Ga}$  chemisorpcí  $SO_2/NaOH$  v závislosti na průtocích fází na strukturované výplni Mellapak 250Y.



# *Optimalizace nabíjecího cyklu zinko-vzduchové baterie*

Bc. Přemysl Richtr (M2)

Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

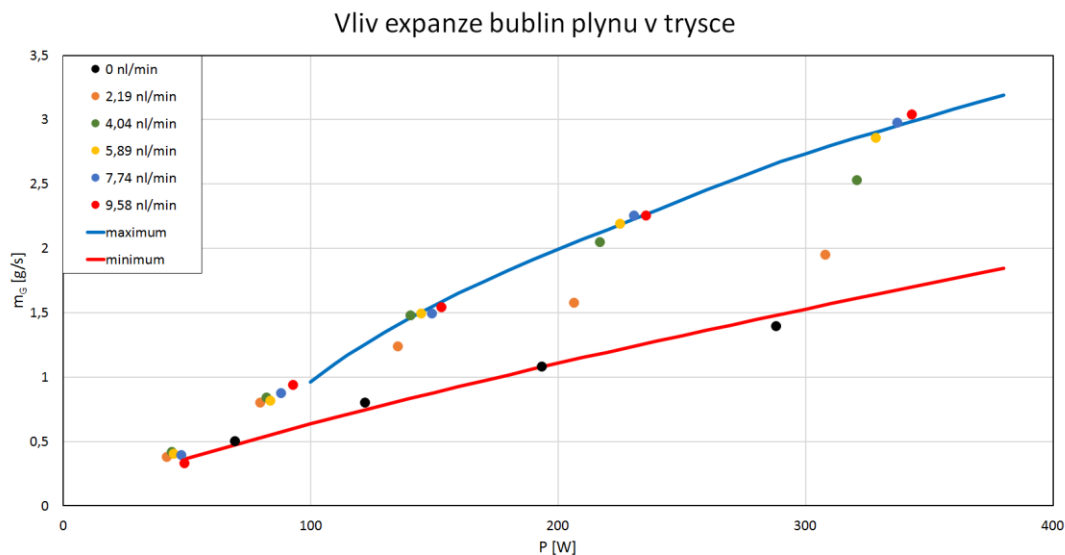
Současnou snahou Evropské unie je dekarbonizace energetického sektoru, což vede k růstu produkce elektrické energie z obnovitelných zdrojů. Ta je však značně kolísavá kvůli proměnlivosti přírodních živlů. Výrobu elektřiny z obnovitelných zdrojů lze stabilizovat pomocí stacionárních úložišť energie a v současné době se k těmto účelům používají Li-iontové baterie, vodíkové technologie nebo vanadové redoxní průtočné baterie. Dané technologie však limituje dostupnost nerostných zdrojů, nízká účinnost či potenciální bezpečnostní rizika při provozu, a proto jsou intenzivně zkoumány a vyvíjeny i jiné elektrochemické systémy. Jedním z nich jsou například zinko-vzduchové průtočné baterie, které poskytují výhody v podobě vysoké hustoty energie, ekologičnosti a bezpečnosti. Nicméně jejich výzkum je teprve na počátku a úspěšné komercializaci brání vícero technických problémů. Cílem této práce bylo studium vlivu různých módů nabíjení na coulombickou a energetickou účinnost laboratorní zinko-vzduchové průtočné baterie. K tomuto účelu byla sestrojena nová měřicí aparatura, která umožňuje využívat potenciostat k provádění složitých experimentů, a dále byl inovován design baterie. Získané výsledky poskytují cenné informace pro další rozvoj této technologie.

# Možnosti zvýšení energetické účinnosti ejektorového čerpadla kapalina-plyn

Bc. Václav Šmíd (M1)

Školitel: Ing. Jan Haidl, Ph.D.

Ejektor kapalina-plyn představuje kompaktní alternativu ke konvenčním výměníkům hmoty – absorpčním a bublaným kolonám. Vyniká zejména v aplikacích, které vyžadují tvorbu velké mezifázové plochy, např. rychlé heterogenní reakce či mechanické čištění plynů. Díky svému jednoduchému designu bez pohyblivých částí má navíc nízké pořizovací náklady, je velmi spolehlivý, odolný a prakticky bezúdržbový. Jeho současné průmyslové použití je však omezeno nedostatečným množstvím spolehlivých návrhových dat a především pak jeho vysokou energetickou náročností. Tato práce studuje možnosti zvýšení energetické účinnosti ejektoru rozrušením paprsku kapaliny. Je popsán vliv (i) expanze bublin plynu v těle trysky, (ii) zařazení rotačního tělíska – swirlu – před trysku, (iii) použití vysokoodporové trysky. Na základě široké databáze experimentálních dat byla navržena korelace popisující maximální dosažitelný hmotnostní tok přisávaného vzduchu. Spolu s korelací nominálních hodnot vymezuje pracovní oblast ejektoru, která by mohla být využita jako jedno z návrhových kritérií ejektorů.



# *Tvorba elektrokineticky řízených vírů na heterogenních iontově-výměnných membránách*

Bc Jakub Strnad (M2)

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

Heterogenní iontově-výměnné membrány jsou základní součástí elektrodialyzérů, ve kterých představují permselektivní médium a slouží k požadované separaci iontů v elektrickém poli. V současné době tyto elektrodialyzéry pracují v tzv. podlimitní oblasti při nízkých proudových hustotách. Při vyšších proudových hustotách systém přechází do tzv. nadlimitní oblasti, ve které probíhají vedle intenzivnějšího odsolování iontů ze zpracovávané suroviny ještě další jevy, které mohou být pro celý proces prospěšné, nebo nechtěné. Mezi tyto jevy se řadí např. elektrokineticky řízené víry, nebo štěpení vody. Cílem této práce je pozorovat a kvantifikovat intenzitu vírů vznikajících při vyšších proudových hustotách pomocí PIV (particle image velocimetry) a intenzitu štěpení vody pomocí měření změn pH. K experimentům byly použity heterogenní kationtové a aniontové-výměnné membrány, které byly integrovány do speciálně vyvinutých miniaturizovaných cel. Tyto cely umožňují pozorování intenzity vznikajících vírů i měření změn pH, které nastávají v důsledku štěpení vody. Na závěr práce budou porovnány výsledky pro kationtové a aniontové-výměnné membrány.

# Chemické inženýrství IV

MÍSTO: BS9

## KOMISE

doc. Dr. Ing. Milan Jahoda (předseda)

RNDr. Ivan Řehoř, Ph.D.

Ing. Simon Jantač

Ing. Jakub Šiška, Ph.D. (Synthomer a.s.)

Ing. Jiří Hronza, Ph.D. (Ricardo Prague s.r.o.)

## PROGRAM

08:00 **zahájení**

08:20 [Bc. Patrik Bouřa](#) (M2, Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.)

*Preparation and characterization of micro-cellular scaffolds for medical applications*

08:40 [Bc. Jakub Klimošek](#) (M2, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)

*Understanding diffusion in semi-crystalline polymers: theory and experiments*

09:00 [Bc. Kateryna Kornienko](#) (M1, Ing. Viola Tokárová, Ph.D.)

*Enkapsulace enzymu alliináza pro řízený antibakteriální účinek*

09:20 [Bc. Katarína Kováčová](#) (M1, doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha)

*Stanovenie transportných charakteristík pervaporačného membránového modulu*

09:40 [Bc. Markéta Kubiková](#) (M1, Ing. Jitka Čejková, Ph.D.)

*Rotující dekanolové kapky jako součástky tekutých robotů*

10:20 [Bc. Jakub Píchal Bc.](#) (M1, doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha)

*Optimalizace přípravy dlouhodobě stabilních elektrod polarografické sondy pro měření koncentrace  $H_2$  v primárním okruhu jaderné elektrárny*

10:40 [Bc. Klára Lukášová](#) (M1, Ing. Ondřej Kašpar, Ph.D.)

*Využití rozprašovacího sušení k přípravě biomimetických materiálů s antibakteriálními účinky*

11:00 [Bc. Tereza Ludvíková](#) (M1, doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha)

*Software development for hydrogen concentration measurements in nuclear power plants*

11:20 [Bc. et Bc. Jana Steinhauserová](#) (M1, Ing. Jitka Čejková, Ph.D.)

*Experimentální studium kolektivního chování nebiologických samopoháněných objektů*

11:40 [Bc. Pavel Zelenka](#) (M1, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

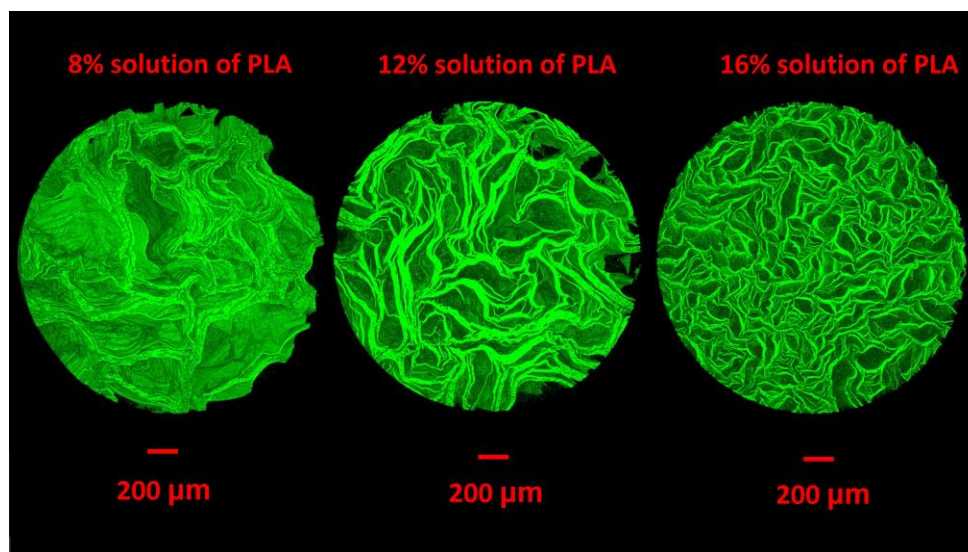
*Pokročilá optimalizace metody charakterizace částic vzniklých rozpadem lékové formy*

# *Preparation and characterization of micro-cellular scaffolds for medical applications*

Bc. Patrik Bouřa (M2)

Školitel: Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.

Cell transplantation is a therapeutic strategy for tissue repair and organ replacement. Eventual implant can be produced from a small donor cell population which is expanded *in vitro* by well-known cell culture technologies. Therefore, there is needed only a small portion of donor cells instead of a whole organ. However, isolated donor cells cannot form new tissues by themselves and specific environment in form of supporting material is essential for cell growth. This work focuses on preparation and characterization of such material – biopolymer scaffolds. Scaffolds were prepared using polylactic acid (PLA) by thermally induced phase separation (TIPS), which is a versatile method allowing preparation of various morphologies. Acetic acid was, to the best of our knowledge, used for the first time as a solvent in TIPS. Crucial step of TIPS involves removal of frozen solvent. This work primarily focuses on removal by extraction using H<sub>2</sub>O. Summarized, all potential residues in final product are completely safe to the human organism. Phase diagram of PLA/acetic acid system was measured using turbidimetry. Binodal and spinodal curves were then computed using Flory-Huggins theory. In the end, properties of prepared scaffolds were characterized using micro-CT, SEM and mercury porosimetry.



# *Understanding diffusion in semi-crystalline polymers: theory and experiments*

Bc. Jakub Klimošek (M2)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Diffusion of small gaseous hydrocarbon molecules in semi-crystalline polymers is a dynamic process, which is not easy to describe. For the experimental observation of the diffusion we have designed and assembled a new differential pressure decay apparatus. The principle of the method is to observe pressure evolution in the gas tight cell containing the polymer sample. The apparatus is fully automated to reach maximum reproducibility and to provide high number of experiments in a short time interval. Main advantages of the apparatus are low time-demanding experimentation and capability to simulate industrial conditions. We use Fickian approach to describe diffusion and to obtain the diffusion coefficient. Diffusion coefficients evaluated from high number of experiments are thus statistically reliable. The Fickian approach describes data well but the theoretical description is not suitable for the non-ideal system like polymer-penetrant. Thus we decided to use a well established Free Volume Theory (FVT) as a second approach to estimate diffusion coefficients of penetrants in polymers. Application of FVT to our experimental data resulted in the description of diffusion coefficient dependency on penetrant pressure, and this processes cannot be described by simple Fickian diffusion.

# *Enkapsulace enzymu alliináza pro řízený antibakteriální účinek*

Bc. Kateryna Korniienko (M1)

Školitel: Ing. Viola Tokárová, Ph.D.

V dnešní době dochází k nadužívání antibiotik a jejich následnému výskytu v běžných potravinách a vodě. Výsledné vybudování rezistence u bakterií vůči známým antibiotikům vede k nezbytnosti vývoje nových způsobů podání antibiotik. Alicin je organosírová sloučenina se silnými antibakteriálními účinky, která vzniká enzymatickou reakcí enzymu alliinázy a substrátu alliinu. Alicin je vysoce reaktivní látka, ke které si bakterie nemají čas vybudovat rezistenci. Tato práce se zabývá enkapsulací enzymu alliinázy do alginátových mikročástic. Enkapsulace je proces zapouzdření bioaktivní látky do polymerní matrice definovaného tvaru. Princip enkapsulace spočívá v protlačování roztoku alliinázy v alginátu sodném skrz trysku s následným vytvořením laminárního toku materiálu. Pomocí vibrační frekvence je tento tok rozrušován na kapky o stejných rozměrech, které se dispergují pomocí elektrického napětí do vytvrzovacího roztoku. Příprava částic o předem zvolených charakteristikách se uskutečnila pomocí přístroje Enkapsulátor BÜCHI B-395Pro. Byla zkoumána efektivita enkapsulace enzymu. Rovněž byl sledován účinek imobilizace na stabilitu a aktivitu enzymu. Obdržené částice se využijí pro přípravu alicinu *in-situ* tak, že enzymatická reakce se iniciuje přidáním roztoku alliinu na povrch částic.

## *Stanovenie transportných charakteristík pervaporačného membránového modulu*

Bc. Katarína Kováčová (M1)

Školiteľ: doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha

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

# *Rotující dekanolové kapky jako součástky tekutých robotů*

Bc. Markéta Kubiková (M1)

Školitel: Ing. Jitka Čejková, Ph.D.

Systémy obsahující organické kapky ve vodných roztocích surfaktantů se v posledních letech staly populární ve vědní oblasti „umělý život“ (angl. Artificial Life, běžně zkracováno jako ALife). Kapky napodobující některé vlastnosti a chování živých buněk nebo malých organismů jsme začali nazývat tekutí roboti. Tito roboti jsou schopni chemotaktického pohybu, přenosu chemikálií a malých předmětů (mohou sloužit jako „chemické taxíky“). Dále byly pozorovány změny tvaru – tvorba chapadlovitých struktur, kolektivní chování a samovolná rotace. Tato práce je zaměřená na studium poslední zmíněné schopnosti – tedy samovolného otáčení dekanolových kapek v roztoku dekanoátu sodného. Pohyb kapek a drobných objektů (např. vlasu) na nich umístěných byl studován zejména z kinematického hlediska. Byly sledovány vlastnosti rotace a jejich změny závisící na umístění vlasu na kapce, na délce vlasu a také na velikosti kapky dekanolu.

# *Optimalizace přípravy dlouhodobě stabilních elektrod polarografické sondy pro měření koncentrace $H_2$ v primárním okruhu jaderné elektrárny*

Bc. Jakub Píchal Bc. (M1)

Školitel: doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha

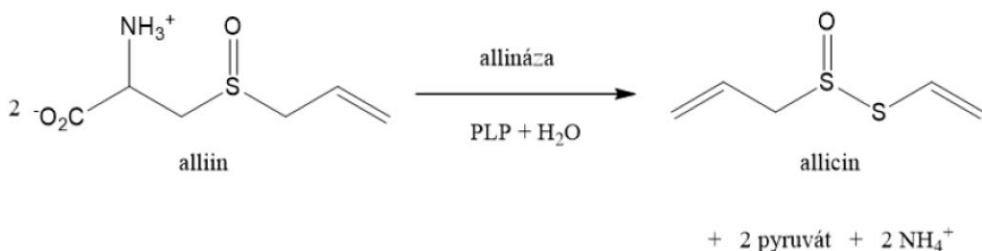
V primárním okruhu jaderné elektrárny vzniká vodík, který zabraňuje nežádoucímu vzniku kyslíku rozkladem vody. Z bezpečnostních a ekonomických důvodů je třeba vodík měřit. Zatím neexistuje metoda, jak měřit vodík přímo. Při výrobě sondy na vodík se vychází ze zkušeností získaných výrobou a prací s podobnou kyslíkovou sondou. Vodíková sonda se skládá z platinové anody a katody z chloridu stříbrného. Sonda dále obsahuje membránu nataženou nad platinovou anodou a elektrolyt z chloridu draselného. Mezi tekutinou obsahující vodík a povrchem platinové elektrody vzniká koncentrační gradient, který je ovlivněn permeabilitou membrány. Koncentrace vodíku na povrchu platinové elektrody je téměř nulová. Na platině se vodík oxiduje, odevzdává elektrony platině, které jsou obvodem přeneseny na katodu (AgCl), kde se vyredukuje stříbro. Na elektrody je přivedeno polarizační napětí a je měřen proud procházející obvodem. Tento proud je závislý na koncentraci vodíku v přiváděné tekutině. V tuto chvíli jsou námi vyráběné sondy stabilní průměrně po dobu dvou měsíců, avšak s přihlédnutím k jejich využití je nutné garantovat alespoň tříměsíční stabilitu. Cílem této práce je navrhnout postup přípravy elektrod, který by vedl ke vzniku dlouhodobě časově stabilní vodíkové sondy.

# Využití rozprašovacího sušení k přípravě biomimetických materiálů s antibakteriálními účinky

Bc. Klára Lukášová (M1)

Školitel: Ing. Ondřej Kašpar, Ph.D.

V poslední době dochází ke zvýšení počtu bakterií, které jsou imunní vůči účinku běžně podávaných antibiotik. K této antibiotické rezistenci dochází z mnoha důvodů, ať je to vývojem samotných bakterií daný jejich krátkým reprodukčním cyklem, anebo lidský faktor v podobě neodborného užívání antibiotik. Jedním z možných řešení této nastalé situace je vývoj alternativních léčivých přípravků, na které si bakterie nemohou vytvořit účinnou obranu. Allicin je molekula, která má velmi silné antibakteriální účinky a je typická pro zástupce rostlin rodu *Allium* (např. cibule, česnek). K produkci allicinu dochází přeměnou aminokyseliny allinu katalyzovanou enzymem allinázou. Tyto dvě látky se nacházejí v různých částech česnekové buňky a k jejich reakci dochází až v případě, kdy je rostlina ohrožena a její struktura nějakým způsobem poškozena. K přípravě materiálů pro napodobení tohoto přírodou ověřeného děje využíváme proces rozprašovacího sušení, kde jsme schopni účinně enkapsulovat enzym allinázu do polymerního nosiče, který plní stabilizační funkci a zároveň tvoří transportní bariéru zabraňující okamžité reakci s allinem. Na výslednou enzymatickou aktivitu enkapsulovaného enzymu má vliv mnoho procesních parametrů a faktorů (např. teplotní stres), které jsou předmětem zkoumání této práce.



## *Software development for hydrogen concentration measurements in nuclear power plants*

Bc. Tereza Ludvíková (M1)

Školitel: doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha

Pressurized water reactors (PWRs/VVERs) are the most common nuclear reactors worldwide. In the primary circuit of a reactor, high pressurized water serves as a coolant, moderator and heat transfer medium. The coolant water is treated with several chemicals so that certain operating conditions are created. The main additives used in the primary circuits are boric acid, hydroxides, and hydrogen. Excess of  $H_2$  suppresses radiolytic oxygen formation, which would lead to pipeline corrosion and deposits on the fuel. Hydrogen is often generated directly in the circuit by the addition of ammonia which is decomposed in the core by the radiolytic reaction. It would be desirable to carry out precise online hydrogen concentration measurements so that the dosing rates could be quickly adjusted. At present, the concentration is mostly determined indirectly. Hence, a new device using a polarographic probe to measure it is being developed. Several prototypes have been tested so far. One of the current goals is to develop controlling software. Designed software should allow a user to set parameters of measurements or save and display output values. It should also comprise a section that would evaluate different variables, for example, temperature dependencies needed for correct signal processing.

# *Experimentální studium kolektivního chování nebiologických samopoháněných objektů*

Bc. et Bc. Jana Steinhauserová (M1)

Školitel: Ing. Jitka Čejková, Ph.D.

Kolektivní chování je pozorováno především v biologických společenstvech, ale lze ho pozorovat i u neživých systémů. Tato práce se zabývá chováním kapek dekanolu v roztoku dekanoátu sodného. Zajímají nás vzájemné interakce mezi těmito kapkami, které reprezentují nebiologické samopoháněné objekty. Byly provedeny sady experimentů s různým počtem kapek a tyto experimenty následně s pomocí obrazové analýzy vyhodnoceny. Cílem předložené práce bylo najít metodologii, jak experimenty vyhodnotcovat a získaná data později použít pro teoretické výpočty.

# *Pokročilá optimalizace metody charakterizace částic vzniklých rozpadem lékové formy*

Bc. Pavel Zelenka (M1)

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

Klíčovou vlastností lékové formy je její chování ve vodném prostředí. Rychlost uvolňování aktivní látky je silně závislá na rozpadu a rozpouštění pevné lékové formy. Proto je důležité studovat dynamiku těchto procesů. Tato práce se zabývá vývojem a optimalizací nové metody pro charakterizaci částic vzniklých rozpadem lékové formy. Metoda je založena na principu usazování částic v nehomogenním laminárním proudění kapalného média. Pro tento účel byla navržena a sestavena průtočná cela. V cele byly provedeny experimenty s modelovými částicemi. Kamerový záznam pohybu částic v cele byl analyzován pomocí algoritmu pro sestavení trajektorie jednotlivých částic. K vyhodnocení trajektorií byla použita teoretická predikce pohybu částic založená na předpokladech o profilu proudění uvnitř cely. Tato práce se dále zabývá zlepšením popisu profilu proudění uvnitř cely pomocí CFD (Computational Fluid Dynamics) simulace a porovnává výsledky získané metodou konečných objemů a metodou konečných elementů.

# Chemické inženýrství V

MÍSTO: BIII

KOMISE

prof. Ing. Pavel Hasal, CSc. (předseda)

Ing. Mária Zedníková, Ph.D.

Ing. Marie Plachá

Ing. Václav Babuka (Synthos Kralupy, a.s.)

zástupce Chemoprojekt, a.s.

## PROGRAM

08:00 **zahájení**

08:20 [Martin Bureš](#) (M2, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)

*Modelování strategií pro zmírnění ztrát ve vanadových redoxních průtočných bateriích*

08:40 [Bc. Ondřej Dupal](#) (M2, doc. Dr. Ing. Milan Jahoda)

*Měření hustoty zuhelnatělých zbytků pomocí fotogrammetrie*

09:00 [Bc. Petr Jelínek](#) (M2, doc. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.)

*Příprava agregátů pro biomedicínské aplikace v mikrofluidním zařízení*

09:20 [Bc. Lenka Kolářová](#) (M2, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)

*PVC elimination from plastic mixtures: the change from waste to a useful resource*

09:40 [Bc. Jindřich Kropáček](#) (M1, RNDr. Ivan Řehoř, Ph.D.)

*Samoskladba hydrogelových mikrorobotů do aktuujících struktur*

10:20 [Bc. Rustem Omarov](#) (M1, doc. Ing. František Rejl, Ph.D.)

*HETP pro výplň Mellapak 452Y v kolonách o průměru 300 mm a 150 mm*

10:40 [Bc. Jakub Vaculík](#) (M1, Ing. Jitka Čejková, Ph.D.)

*Studium chování organických kapek v roztocích surfaktantů v závislosti na koncentraci surfaktantu*

11:00 [Bc. Adam Vondra](#) (M1, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

*Vliv přítomnosti oxidů ceru na kinetiku dvojitého zapálení CO v automobilovém katalyzátoru*

11:20 [Bc. Kristýna Žemlová](#) (M1, Ing. Jan Haidl, Ph.D.)

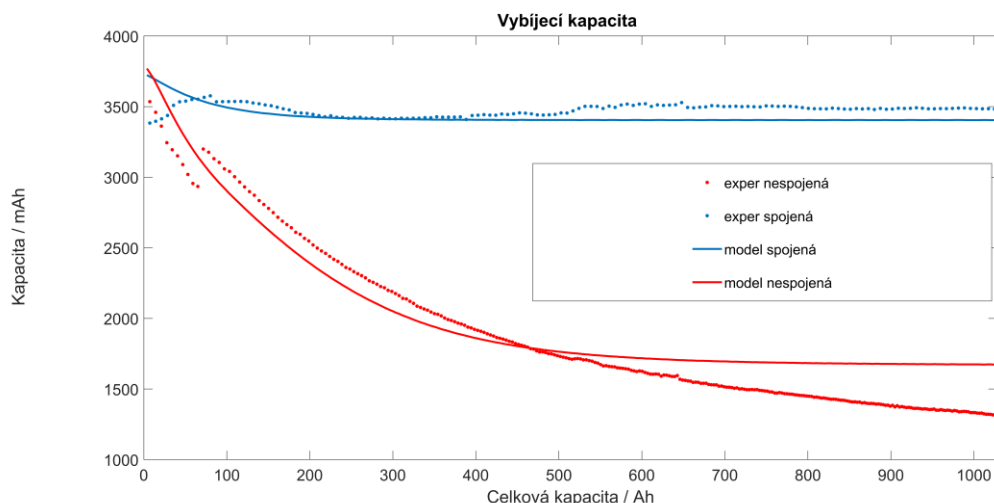
*Automatické vyhodnocení termografických dat při destilaci*

# Modelování strategií pro zmírnění ztrát ve vanadových redoxních průtočných bateriích

Bc. Martin Bureš (M2)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Vanadové průtočné baterie jsou jednou z možností, jak uskladnit energii z obnovitelných zdrojů. Energie se ukládá elektrochemickou reakcí na porézních elektrodách, skrz které protéká elektrolyt. Elektrodové cely jsou oddělené kationt-selektivní membránou. Ty jsou v ideálním případě propustné pouze pro vodíkové ionty, které přenáší elektrický náboj. Ve skutečnosti jsou však propustné i pro vanadové kationty a vodu, což snižuje účinnost baterie a současně vede k vratnému poklesu její kapacity při dlouhodobém provozu. V této práci je pomocí matematického modelu simulováno chování monočlánu reálné baterie. Využíváme její rozdělení na 4 části: pozitivní a negativní polo-článek a 2 zásobní tanky k nim připojené. Model zahrnuje popis transportu iontů skrz membránu Nernst-Planckovu rovnicí, popis kinetiky synproporcionačních reakcí a elektrochemických reakcí Butler-Volmerovou rovnicí. K výpočtu přetoku vody využíváme hodnoty osmotických tlaků elektrolytů. K popisu rovnovážného napětí je použita Nernstova rovnice. Model je zpřesněn fitováním parametrů kinetiky elektrodových dějů na zátěžovou křivku. Model lze využít k testování různých strategií s cílem zpomalit pokles kapacity baterie a zachovat tak vysokou účinnost provozu. Jako nadějně je hydraulické spojení zásobníků elektrolytu.



# *Měření hustoty zuhelnatělých zbytků pomocí fotogrammetrie*

Bc. Ondřej Dupal (M2)

Školitel: doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

Matematické modelování požárů umožňuje zredukovat náklady na finančně nákladné požární zkoušky a pomáhá zefektivnit volbu požárně-bezpečnostního systému. Aby bylo možné vytvořit komplexní model šíření požáru, je nutné zadání velkého množství vstupních parametrů pokrývajících mimo jiné tepelné vlastnosti hořících materiálů. Velkým problémem bývá nedostupnost těchto parametrů v literatuře nebo ve správném formátu pro model a musí být zjišťovány experimentálně. Cílem této práce bylo experimentálně vyhodnotit objemovou hustotu zuhelnatělých zbytků vznikajících při hoření dřevěných materiálů, protože tyto zbytky významně ovlivňují transport tepla a hmoty při procesu hoření. Jelikož se jedná o porézní materiál, který v kapalinách bobtná a pohlcuje kapalinu svými póry, nebylo možné měřit hustotu pomocí Archimedova zákona. Bylo přistoupeno k měření pomocí fotogrammetrie, která rekonstruuje tvary a rozměry z fotografií a využívá se pro 3D tisk nebo mapování reliéfu zemského povrchu. K tomuto účelu byl sestaven nízkonákladový 3D skener, na kterém byly měřeny zuhelnatělé vzorky. Jeho výstupem byla sada fotografií, která byla zpracována vhodným softwarem.

# *Příprava agregátů pro biomedicínské aplikace v mikrofluidním zařízení*

Bc. Petr Jelínek (M2)

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

Mikrofluidní zařízení umožňující produkci kapek jsou v dnešní době intenzivně zkoumána díky mnoha výhodám a značnému potenciálu například při přípravě mikrostrukturovaných léčiv či pokročilých funkčních materiálů. Oproti práci ve velkém objemu je jejich hlavní výhodou lepší kontrola parametrů toku a podmínek uvnitř kanálku. Cílem práce byl návrh a výroba mikrofluidního zařízení pro agregaci nanočástic. Zařízení bylo navrženo v programu AutoCAD a vyrobeno pomocí CNC obrábění. Byly připraveny dvě geometrie mikrofluidního čipu a otestovány různé průtoky kontinuální (butanol) a dispergované (voda) fáze. Připravené zlaté, železné a polymerní nanočástice byly agregovány v mikrofluidním zařízení. Podmínky agregace byly zvoleny dle výsledku parametrické studie. Kombinace zlatých nanočástic s unikátními opticko-elektrickými vlastnostmi, železných magnetických nanočástic a biokompatibilního polymeru nabízí potenciál pro zlepšení nosičů pro cílené doručování léčiv. Připravené homogenní i heterogenní agregáty a samotné nanočástice byly charakterizovány pomocí metody dynamického rozptylu světla, UV-VIS spektrometrie a optické i skenovací elektronové mikroskopie.

## *PVC elimination from plastic mixtures: the change from waste to a useful resource*

Bc. Lenka Kolářová (M2)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

The accumulation of plastic waste in our world is alarming. Recycling reduces the amount of plastic waste. However, the technology for cost-efficient recycling is still not developed. Nowadays, the best option comprises in recovery of the chemical energy stored in the petroleum products, i.e., incineration. But halogenated compounds in the plastics severely complicate this process. Such compounds are used as flame retardants, and produce toxic gases while burning, including dioxins. But if we separate halogenated plastics, we can burn the rest and minimize the waste. One of the promising methods of waste processing is the triboelectric separation. In this work, we chose a simple model mixture: PVC, PET and PP. We charged the mixture by rubbing it against certain counter-materials so that the plastics gained specific charge according to the material they are made of. And hereby charged plastics were separated in electric field according to the charge, ergo material. We found out that the best efficiency is reached by separating one material every cycle when rubbing against different counter-material. We were able to separate 89% of non-halogenated plastics from the mixture. Moreover, the purity of separated products was 95% and 93% for PET and PP, respectively.

# *Samoskladba hydrogelových mikrorobotů do aktuujících struktur*

Bc. Jindřich Kropáček (M1)

Školitel: RNDr. Ivan Řehoř, Ph.D.

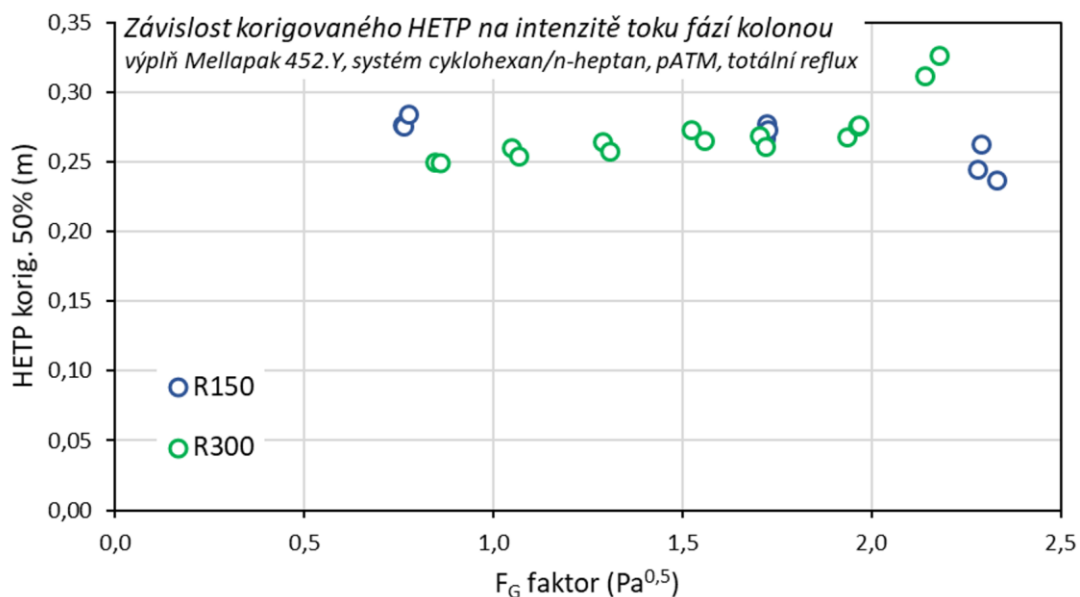
Miniaturizace robotů umožňuje jejich rozšíření do nových oblastí, jakými jsou mikromanipulace, neinvazivní diagnostika nebo mikrochirurgie. Takoví mikroskopičtí roboti mohou být v budoucnu například stavebními jednotkami, tvořícími uspořádané mikrostruktury, které mohou sloužit jako náhrada biologických tkání v místech poškození nebo jako aktuátory fyziologických procesů. Miniaturní velikost takových robotů neumožňuje implementaci inteligence, dostatečné k samovolnému uspořádávání na základě algoritmů používaných v makroskopické robotice, a je proto potřeba hledat nové přístupy pro jejich sebeorganizaci. V tomto projektu představujeme způsob, jak mobilní mikroroboty uspořádávat do periodických mříží metodami samoskladby. Roboti jsou schopni se libovolně pohybovat po substrátu, avšak narazí-li na minimum potenciální energie (prohlubeň), formují se spontánně (bez vložení energie) do periodických struktur. Takto uspořádané roboty lze chemicky spojit do jediného celku, jehož tvar a velikost lze definovat nastavením parametrů spojování. Výsledné objekty mají velikost 1-2 mm a jsou schopny pomocí anizotropní deformace vykonávat mechanickou práci. Obdobné struktury bude v budoucnu možné využívat jako robotické mikroimplantáty, případně k přípravě samozacelujících se materiálů.

# HETP pro výplň Mellapak 452Y v kolonách o průměru 300 mm a 150 mm

Bc. Rustem Omarov (M1)

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

Tato práce prezentuje separační účinnost strukturované výplně Mellapak 452.Y pro atmosférickou destilaci binární směsi cyklohexan/n-heptan. Separační účinnost byla vyhodnocena ve formě výšky ekvivalentní teoretického patru (*HETP*) z měření provedených za podmínek nekonečného poměru zpětného toku v kolonách o průměru 300 mm a 150 mm. *HETP* určité výplně je obvykle prezentováno v závislosti na intenzitě toku fází. Univerzálnost této závislosti komplikuje pro systém cyklohexan/n-heptan nezanedbatelná závislost *HETP* na destilačním rozmezí, pro které bylo stanoveno. V souladu s teorií byla tato závislost aproximována lineární funkcí,  $HETP = ax_A + b$ , kde za hodnotu  $x_A$  bylo zvoleno složení ve středu úseku lože, pro které je *HETP* stanoveno. Následná implementace této závislosti umožnila korekci experimentálních hodnot *HETP* přepočtem na ekvimolární složení. Korigované hodnoty *HETP* získané v obou destilačních kolonách byly vyneseny v závislosti na intenzitě toku fází a porovnány.



# *Studium chování organických kapek v roztocích surfaktantů v závislosti na koncentraci surfaktantu*

Bc. Jakub Vaculík (M1)

Školitel: Ing. Jitka Čejková, Ph.D.

Biologická chemotaxe, kterou definujeme jako orientovaný pohyb organismu v gradientu koncentrace chemické látky, byla inspirací pro zkoumání tohoto jevu i u neživých objektů. V našem případě jsou těmito 'chemickými roboty', kteří jsou schopni přeměny chemické energie na mechanickou, olejové kapky v systému s roztokem povrchově aktivní látky. Vzhledem k faktu, že systém dekanol – dekanoát sodný – sůl byl v naší laboratoři z hlediska umělé chemotaxe již důkladně prozkoumán, je při pokusu o detailnější popis tohoto jevu snaha nalézt další systémy, které by umělou chemotaxi vykazovaly. V první fázi je však třeba uvažovat vzájemné interakce mezi povrchem, roztokem surfaktantu a kapkou. Cílem této práce je proto popsat chování organických kapek v roztoku surfaktantu, a to jednak v závislosti na typu použitého surfaktantu a jeho koncentraci s ohledem na kritickou micelární koncentraci, a také vlivu barviv, přidávaných do systému pro zvýraznění kapky. Součástí práce je též vyhodnocení povrchových napětí roztoků i kapek obsahujících barviva, stejně jako mezifázových napětí mezi roztokem a kapkou. Tato data přiřazená k jednotlivým typům chování kapky mohou pomoci předvídat chování kapek u neznámých systémů, či mohou být základem pro návrh nových systémů ke studiu umělé chemotaxe kapek.

# *Vliv přítomnosti oxidů ceru na kinetiku dvojitého zapálení CO v automobilovém katalyzátoru*

Bc. Adam Vondra (M1)

Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Výfukové plyny, které vznikají při nedokonalém spalování automobilového paliva, obsahují škodlivé látky, jejichž množství je proto regulováno emisními normami. V rámci plnění těchto limitů je nezbytné použití katalytických reaktorů umožňujících efektivní zreagování škodlivých složek, zejména oxidu uhelnatého, oxidů dusíku, uhlovodíků a pevných částic, na zdraví neškodné látky: oxid uhličitý, vodní páru a dusík. Hlavní katalytickou funkci zastávají většinou nanočástice platiny či palladia. Do katalyticky aktivní vrstvy jsou často přidávány oxidy ceru, které zvyšují katalytickou aktivitu, zabraňují slnutí vrstvy za vyšších teplot a dále slouží jako zásobárna kyslíku při jeho náhlém přebytku či nedostatku. V této práci byla vyhodnocena reakční kinetika katalyzátorů Pt/CeO<sub>2</sub>/γ-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> a Pd/CeO<sub>2</sub>/γ-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, zejména s ohledem na průběh oxidace CO a C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>. Dosažené výsledky a jejich porovnání s katalyzátory bez oxidů ceru (Pt/γ-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> a Pd/γ-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) ukazují, že přídavek oxidů ceru pozitivně působí na konverzi škodlivin výfukových plynů, a navíc výrazně potlačuje nežádoucí jev zvaný dvojité zapálení CO.

# *Automatické vyhodnocení termografických dat při destilaci*

Bc. Kristýna Žemlová (M1)

Školitel: Ing. Jan Haidl, Ph.D.

Strukturované výplně se v destilačních kolonách používají pro intenzifikaci mezifázového sdílení hmoty. Kvalita výplní se obvykle kvantifikuje prostřednictvím objemových koeficientů přestupu hmoty, tj. součinu příslušných koeficientů a plochy aktivního fázového rozhraní jejichž individuální hodnoty však zůstávají neznámé. Tato práce přispívá k termografické studii tvorby a aktivity fázového rozhraní na výplni v destilačních podmínkách. V průběhu práce budou pomocí termokamery pořizovány fotografie a videa povrchu izolovaného plechu strukturované výplně při probíhající destilaci. Získané snímky bude nutné dále vyhodnotit s ohledem na výsledky kalibračních experimentů i geometrii aparatury. Za tímto účelem byl vytvořen program vybavený uživatelským rozhraním umožňující načtení výstupu termokamery ve formě videosekvence, její segmentaci, výběr analyzované oblasti a následné vyhodnocení teploty na smáčené desce. Program byl implementován s využitím skriptovacího jazyka Python a jeho knihoven. Výhledově je plánováno do programu zahrnout i výsledky kalibračních experimentů a pokročilou statistickou analýzu dat.

# Chemické inženýrství VI

MÍSTO: B03

## KOMISE

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

Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.

Ing. Lenka Krajáková

Ing. František Plát, Ph.D. (Škoda Auto a.s.)

Ing. Martin Hubička, Ph.D. (Lovochemie, a.s.)

Ing. Radoslav Ružinský (STUBA)

## PROGRAM

08:00 **zahájení**

08:20 [Bc. Tomáš David](#) (M1, Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.)

*Modelování stabilizace a jejího vlivu na viskozitu koloidních suspenzí*

08:40 [Bc. Martin Jůza](#) (M1, doc. Dr. Ing. Milan Jahoda)

*Modelování hoření metanu*

09:00 [Bc. Pavlína Michaláková](#) (M1, Ing. Denisa Lizoňová)

*Studium interakce aktivně směřovaných nanočástic s nádorovými a imunitními buňkami*

09:20 [Bc. Vladimír Němec](#) (M2, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

*UV imaging as a tool for granule characterisation*

09:40 [Bc. Milan Žalud](#) (M1, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

*Příprava a charakterizace tenkých katalytických vrstev v automobilovém filtru pevných částic*

10:20 [Bc. Kateřina Sladká](#) (M2, doc. Dr. Ing. Pavlína Basařová)

*Experimentální studie adheze bublin na povrch pevné částice ve vodných roztocích propanolu*

10:40 [Bc. David Tichý](#) (M2, doc. Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.)

*Předkoncentrace a odsolování pomocí iontové koncentrační polarizace*

11:00 [Bc. Barbora Tučková](#) (M1, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)

*Studium utváření morfologie polymerních latexových vrstev*

11:20 [Bc. Adam Tylich](#) (M1, doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha)

*Měření příkonu a kompletní disperze plynu v míchané poloprovozní nádobě s nekoalescentní vsádkou*

11:40 [Bc. Adrián Žák](#) (M2, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

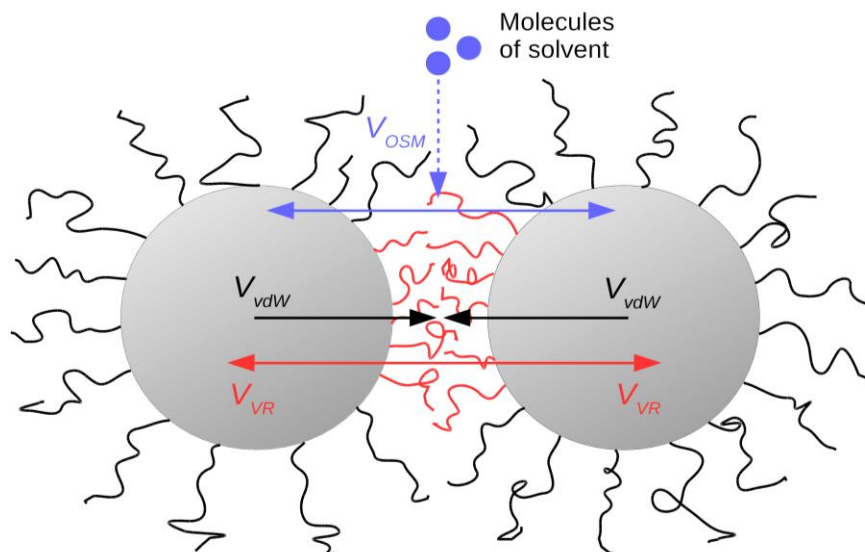
*Influence of coating distribution on catalytic filter performance*

# Modelování stabilizace a jejího vlivu na viskozitu koloidních suspenzí

Bc. Tomáš David (M1)

Školitel: Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.

Koloidní suspenze jsou nepostradatelné v mnoha průmyslových odvětvích, jako jsou například nátěrové hmoty, detergenty, farmacie a další. Pro všechny aplikace koloidních suspenzí je kritická jejich stabilita. Nestabilní suspenze agregují, což může vést ke znehodnocení produktu a finančním ztrátám. Ke stabilizaci koloidních suspenzí lze použít dva druhy povrchově aktivních látek (surfaktantů): (i) ionogenní (elektrostatická stabilizace) a (ii) neionogenní (sterická stabilizace), kterými mohou být například řetězce krátkých polymerů kompatibilních jak s rozpouštědlem, tak s povrchem koloidních částic. Popis a pochopení dílčích mechanismů přispívajících ke sterické stabilizaci je poměrně složitý a zůstává otevřeným problémem. Za účelem modelování stericky stabilizovaných suspenzí používáme tzv. metodu diskrétních elementů. Chování suspenze je určeno pohybem jednotlivých částic, jenž je dán výslednicí sil působících na ně. V modelu jsou zahrnuty kontaktní i nekontaktní mezičásticové interakce, interakce se stěnou, vzájemná interakce mezi částicemi a tekutinou. Model poskytuje cenná data o chování suspenze a jejích vlastnostech, zejména viskozitě. Model je kvantitativně validován srovnáním s experimentálními daty popisujícími rheologické vlastnosti suspenze za různých podmínek.



# *Modelování hoření metanu*

Bc. Martin Jůza (M1)

Školitel: doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

Numerický model hoření methanu je snadno aplikovatelný na předpověď průběhu úniku zemního plynu z trubek nebo zásobníků a jeho následném zahoření. Díky němu lze získat představu o rychlosti proudění plynných složek, koncentraci methanu nebo o teplotním profilu ve sledovaném prostoru. Funkční model hoření methanu lze později využít v oblasti požární bezpečnosti, například při prevenci (umístění koncentračních čidel nebo výpočet teploty v blízkosti stavebních konstrukcí), represí (ochrana zasahujících jednotek hasičů) nebo při vyšetřování příčin vzniku požárů. Správnost modelu je vždy třeba ověřit experimentem (validovat), teprve potom lze model aplikovat na další procesy. Tato práce se zabývá numerickou simulací hoření methanu v programu Fluent v místnosti podle experimentu provedeného L. Stecklerem a kol. (1982). Experiment byl zvolen z důvodu velkého množství publikovaných experimentálních dat. Vytvoření modelu slouží k získání základních dovedností při práci v řešiči Fluent a ověření vhodnosti nastavení parametrů modelových rovnic a numerického řešiče.

# *Studium interakce aktivně směřovaných nanočástic s nádorovými a imunitními buňkami*

Bc. Pavlína Michaláková (M1)

Školitel: Ing. Denisa Lizoňová

Cílené doručování léčiv by mohlo být revolučním přístupem při léčbě rakoviny. Tato metoda přináší výhodu specifického doručení léčiva do nádoru, což vede ke snížení vedlejších účinků a zvýšení účinnosti léčby. Jedním z největších omezení současné aplikace této léčby je odstranění nanočástic buňkami imunitního systému - makrofágy. Toto vede ke snížení doby cirkulace v krevním řečišti a tím pádem také k potlačení účinnosti léčby. Křemičité nanočástice byly modifikovány polymerem poly N-(2-Hydroxypropyl) methacrylamidu a monoklonální protilátkou IgG M75 (protilátka proti Karbonické Anhydráze IX, která je exprimovaná na povrchu mnoha nádorových buněk a umožňuje tedy aktivní cílení nanočástic do nádorových tkání). Fluorescenční mikroskopie v kombinaci s průtokovou cytometrií byla použita za účelem pochopení procesů fagocytózy makrofágů (buněčná linie J744.A1) a specifických interakcí protilátka-antigen (buněčná linie HT-29 nadměrně exprimující CA IX). Získaná data budou dále použita pro vývoj farmakokinetického modelu popisujícího výše uvedené procesy.

## *UV imaging as a tool for granule characterisation*

Bc. Vladimír Němec (M2)

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

This work deals with a model pharmaceutical formulation, consisting of ibuprofen as the API, lactose and microcrystalline cellulose as filler and pregelatinized starch as a binder, where water was added as liquid binder to the mixture during high-shear granulation. This formulation was subjected to a parametric study in a laboratory scale high-shear wet granulator. Firstly bulk dissolution tests were measured. The structure of the produced granules was examined by x-ray micro computed tomography, while single granule dissolution experiments were conducted using the Sirius Surface Dissolution UV-Imager providing the real-time 2D UV maps of API concentration profiles in the vicinity of the granule. By coupling those two techniques, a toolbox for investigation of a granule structure-dissolution relationship was created and the granule properties were correlated with the granulation formulation parameters and bulk dissolution tests.

# *Příprava a charakterizace tenkých katalytických vrstev v automobilovém filtru pevných částic*

Bc. Milan Žalud (M1)

Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Mezi škodlivé látky vznikající nedokonalým spalováním v automobilových motorech patří zejména plynné škodliviny jako oxid uhelnatý či nespálené uhlovodíky, ale také pevné mikročástice, obecně nazývané saze. Všechny tyto látky je zapotřebí co nejúčinněji zachycovat již ve výfukovém potrubí automobilu, což umožňuje katalytický filtr pevných částic. Jedná se o keramický monolitický filtr pevných částic, na jehož stěny je nanесena tenká katalytická vrstva obsahující vzácné kovy, jež zajišťují konverzi nežádoucích plynů. Jako základ této vrstvy je použit porézní  $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$  ve vodné suspenzi, do které je filtr namáčen, přebytečná suspenze je vyfouknuta stlačeným dusíkem a vrstva vysušena. Výslednou tloušťku, strukturu a umístění nanесené vrstvy lze ovlivnit zejména různou velikostí částic  $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ , různě voleným pH vodné suspenze či navlhčením filtru před nanášením. Připravené vzorky katalytických filtrů jsou následně analyzovány pomocí snímků z elektronového mikroskopu (SEM). Klíčové je, aby při průchodu spalin vrstvou docházelo k co největší chemické konverzi škodlivých plynů, účinné filtraci pevných částic při současném zachování nízké tlakové ztráty filtru. Toho lze docílit například vhodnou distribucí vrstvy do pórů stěny filtru či větším výskytem různě velkých makropórů ve vrstvě.

# *Experimentální studie adheze bublin na povrch pevné částice ve vodných roztocích propanolu*

Bc. Kateřina Sladká (M2)

Školitel: doc. Dr. Ing. Pavlína Basařová

Tato práce se zabývá studiem adheze bublin na pevném povrchu ve vodných roztocích *n*-propanolu. Ve vodných roztocích alkoholů dochází vlivem přítomnosti vodíkových vazeb k tvorbě mikrostruktur, což výrazně ovlivňuje chování kapalné fáze i bublin. Příkladem anomálního chování je nelineární průběh povrchového napětí, viskozitní maximum nebo měnící se odporový koeficient pro výpočet stoupavé rychlosti bublin. V případě propanolu dochází ke skokové změně při koncentraci 7 mol. %. Přídavek alkoholu do vody ovlivňuje adhezi bubliny, při níž dochází ke změně velikosti třífázového rozhraní, úhlu smáčení a mobility povrchu bubliny. V experimentální části této práce byly vysokorychlostní kamerou snímány adheze bublin v roztocích propanolu v celém koncentračním rozsahu. Data byla vyhodnocena pomocí obrazové analýzy NIS-Elements. Z experimentálních dat byla vyhodnocena mobilita povrchu bubliny. V čisté vodě má bublina plně mobilní povrch. Se zvyšující se koncentrací roztoku mobilita klesá a kapalina se chová jako roztok povrchově aktivní látky. Při koncentraci nad 7% propanolu dochází ke skokové změně charakteru fázového rozhraní, které je plně imobilní s extrémně rychlou desorpcí molekul alkoholu.

# *Předkoncentrace a odsolování pomocí iontové koncentrační polarizace*

Bc. David Tichý (M2)

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

Příprava biomedicínských vzorků (například proteinů nebo DNA) pro jejich analýzu je mnohdy kvůli nízkým detekčním limitům zásadní pro úspěšnost celého procesu. Předkoncentrace, neboli lokálního zvýšení koncentrace dané molekuly nebo iontu, lze docílit pomocí iontové koncentrační polarizace. Umístěním iontově-výměnné membrány do vnějšího DC elektrického pole vznikají na jejích opačných stranách oblasti obohacené a ochuzené o ionty, v nichž se ustanoví nelineární gradient elektrického pole. Iontově vyčerpaná vrstva může v některých případech působit jako nemechanický filtr pro nabitě molekuly a ionty. V této práci je iontově vyčerpaná vrstva využita k předkoncentraci záporně nabitých částic fluoresceinu v mikrofluidním kanálku se dvěma kationtově výměnnými membránami. Byl zkoumán vliv rozdílných hodnot průtoků a aplikovaného napětí na pozici a tvar zakoncentrovaného útvaru ve třech geometrických variantách čipu: s rovným, zužujícím a rozšiřujícím se kanálkem. V druhé části práce byly tyto čipy porovnávány z hlediska účinnosti odsolování protékajícího roztoku od molekul chloridu draselného. Cílem tohoto výzkumu je vytvoření průtočného systému realizujícího předkoncentraci a separaci iontů z roztoku uplatňujícího iontovou koncentrační polarizaci.

# *Studium utváření morfologie polymerních latexových vrstev*

Bc. Barbora Tučková (M1)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Many tons of latex for coating purposes are synthesized every year. This widely used material forms a stable dispersion (emulsion) of polymer microparticles in an aqueous medium. Polymer latexes are synthesized from petroleum-based chemicals, and are further processed, e.g., to tires, gloves or coatings, which are formed from latex paints. The formation of latex films is thoroughly discussed in literature, because it is important to understand this process in order to determine the required properties of the manufactured latex and the optimum film-forming conditions. It was shown in many studies that the time and the temperature of film formation and storage conditions have a great impact on the degree of particle coalescence. Therefore, in this work the temperature dependence of the latex film formation and its morphology are investigated by the use of scanning electron microscope (SEM) and atomic force microscope (AFM). To obtain the uniform latex layer, the latex was sprayed onto a thin glass using electro-spray or was simply cast on a glass. The samples used for the investigation of latex film formation were monodisperse polystyrene particles (PS) and poly(butyl acrylate) solution (PBA).

# *Měření příkonu a kompletní disperze plynu v míchané poloprovozní nádobě s nekoalescentní vsádkou*

Bc. Adam Tylich (M1)

Školitel: doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha

V mnoha odvětvích chemického, farmaceutického a potravinářského průmyslu jsou mj. využívány mechanicky míchané reaktory, ve kterých je dispergován plyn. Takovéto reaktory jsou využívány například k fermentaci, chloraci či hydrogenaci. Pro správný návrh a konstrukci zařízení je nutné znát transportní charakteristiky, zejména objemový koeficient přestupu hmoty  $k_L a$ . Hodnota  $k_L a$  je mj. závislá na velikosti zádrže plynu a příkonu míchadel. Znalost uvedených charakteristik je nutná pro predikci přestupu hmoty při návrhu mechanicky míchaných zařízení. Měření příkonu probíhalo na poloprovozní nádobě o vnitřním průměru 59 cm. Nekoalescentní vsádka byla simulována 0,5 M roztokem síranu sodného. K formulaci výpočetních vztahů pro predikci transportních charakteristik v navrhovaných provozních nádobách byla také využita data naměřená na laboratorní nádobě. Vedle měření příkonu a následného testování korelačních rovnic byla také stanovována hodnota otáček míchadla, při níž dochází ke kompletní disperzi plynu,  $N_{CD}$ . Znalost hodnot  $N_{CD}$  bude po vybudování obsáhlejší databáze rovněž využita k vytvoření nových korelačních rovnic pro predikci přestupu hmoty. Získané korelace přispějí ke snížení energetických a materiálových nákladů nově navrhovaných zařízení.

# *Influence of coating distribution on catalytic filter performance*

Bc. Adrián Žák (M2)

Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

The increasing emphasis on reducing emissions from transportation is forcing the automotive industry to improve its technology. One of such recently proposed improvements is a catalytic particulate filter, combining catalytic converter with a filter. This combination has many advantages such as lower production costs, space requirements and overall heat losses. The required key properties of this device are minimum pressure drop and maximum conversion and filtration efficiency. They depend mainly on the quality and distribution of catalytic layer (washcoat) and the size, number and structure of the pores. This study investigates influence of the catalyst distribution on pressure drop and conversion in several bare and coated filters. The filter microstructure is reconstructed in 3D using X-ray tomography images and its impact on the sample performance is studied by pore-scale mathematical models of flow, diffusion and reaction implemented in OpenFOAM.

# Ústav fyziky a měřicí techniky (444)

## ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

RNDr. Pavel Galář, Ph.D.

## SEZNAM SEKČÍ

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

SPONZOŘI ÚSTAVU FYZIKY A MĚŘICÍ TECHNIKY



# Ústav fyziky a měřicí techniky

MÍSTO: B220

## KOMISE

prof. Dr. Ing. Martin Vršata (předseda)

Mgr. Dr. Jana Jirešová

doc. Ing. Jaroslav Hofmann, CSc

RNDr. Kateřina Kůsová, Ph.D.

doc. RNDr. Jaroslav Julák, CSc.

Ing. Martin Straka, Ph.D. (ÚJV Řež)

## PROGRAM

08:30 **zahájení**

[Bc. Silvie Hejzlarová](#) (M2, doc. Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.)

*Inaktivace Schistosoma spp. využitím nízkoteplotního plazmatu*

[Jan Hrudka](#) (B2, doc. Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.)

*Vývoj zařízení pro měření koncentrace CO při rozkladu oxidu uhličitého nízkoteplotním plazmatem a jeho aplikace*

[Bc. Jan Kejzlar](#) (M1, Ing. Přemysl Fitl, Ph.D.)

*Použití softwarově definovaného rádia pro vyhodnocování odezvy senzorové sítě tvořené QCM senzory*

[Karolína Kestlerová](#) (B3, Ing. Josef Khun, Ph.D.)

*Detekce oxidu uhelnatého pomocí spektrometrických metod*

[Marcela Korcová](#) (B3, Ing. Ladislav Fišer, Ph.D.)

*Studium vlastností polovodičového senzoru oxidu uhelnatého*

[Bc. Eliška Lokajová](#) (M1, doc. Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.)

*Projekt DAAD z jiného úhlu pohledu*

[Bc. Tereza Měřínská](#) (M1, doc. Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.)

*Inaktivace akantaméb využitím nízkoteplotního plazmatu*

[Jakub Marián Pálež](#) (B3, Mgr. Anna Fučíková, Ph.D.)

*Degradácia odtlačkov prstov študovaná pomocou AFM*

[Tereza Svatoňová](#) (B3, Mgr. Anna Fučíková, Ph.D.)

*Degradace biologických vzorků - otisků - studována pomocí AFM a prozkoumání možnosti použití v kriminalistice*

[Lucie Vabroušková](#) (B3, Ing. Přemysl Fitl, Ph.D.)

*Senzorová pole a jejich využití v odorologii*

# *Inaktivace Schistosoma spp. využitím nízkoteplotního plazmatu*

Bc. Silvie Hejzlarová (M2)

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

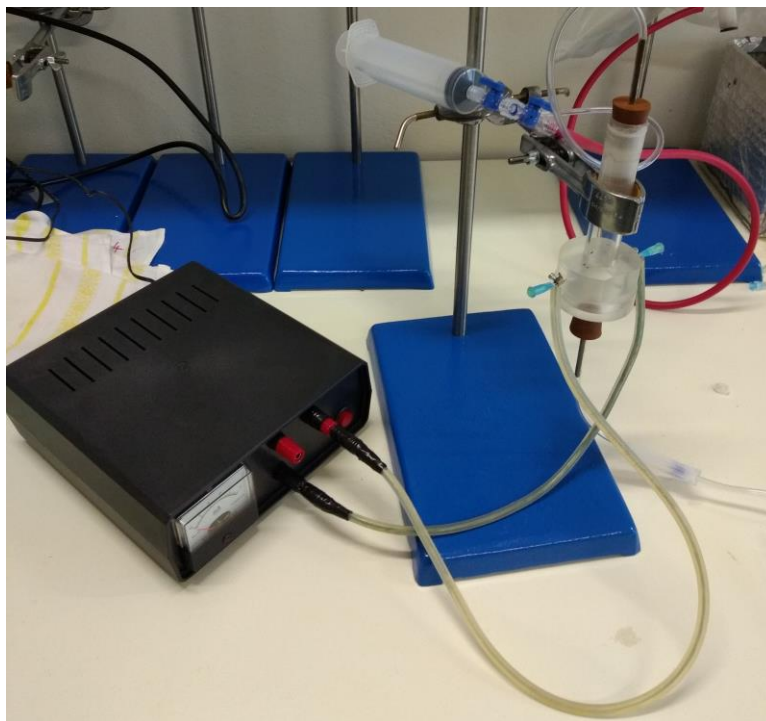
Parazitický rod *Schistosoma* je původcem tropického onemocnění zvaného schistosomosa, které se projevuje především specifickými záněty v napadené tkáni. V této práci jsou zkoumány inaktivační účinky nízkoteplotního plazmatu na dvou životních stádiích *Schistosoma* spp. Byly porovnány účinky kladného, záporného koronového výboje typu hrot proti rovině a záporného axiálního koronového výboje na cercáriích a následně i miracidích tohoto rodu. Vyhodnocení účinnosti inaktivace spočívalo v pozorování cercárií a miracidí pod mikroskopem, kde byl hodnocen především jejich pohyb. Úspěšně inaktivované vzorky byly následně fixovány v parafinu a obarveny histologickými barvivami k dalšímu zkoumání optickým i elektronovým mikroskopem k určení druhu poškození.

# *Vývoj zařízení pro měření koncentrace CO při rozkladu oxidu uhličitého nízkoteplotním plazmatem a jeho aplikace*

Jan Hrudka (B2)

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

Kazineutrální komplex nabitých a neurálních částic o nízké teplotě, vykazující kolektivní chování, nadále označovaný jako nízkoteplotní plazma, má unikátní vlastnosti, které jsou zejména v současnosti předmětem horlivého zkoumání. Jedním z potencionálních průmyslových způsobů využití nízkoteplotního plazmatu je jeho aplikace na rozklad oxidu uhličitého za vzniku oxidu uhelnatého. Se vzrůstajícím zájmem o toto téma, vzrůstá i poptávka po efektivních verifikačních analytických metodách, o které by se daly tyto výzkumy opřít, ovšem aby ony metody byly opravdu spolehlivé, je nutné je aplikovat na přístrojích k tomuto účelu ideálně na míru navržených, schopných stabilně pojmout a zpracovat velké množství dat, bez ztráty jejich kvality, což je předmětem mé práce.

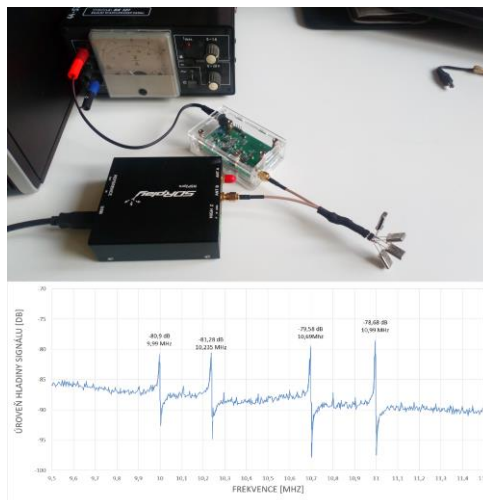


# Použití softwarově definovaného rádia pro vyhodnocování odezvy senzorové sítě tvořené QCM senzory

Bc. Jan Kejzlar (M1)

Školitel: Ing. Přemysl Fitl, Ph.D.

Signál chemických senzorů na bázi křemenné krystalové mikrováhy neboli QCM z anglického *Quartz Crystal Microbalance*, je obvykle vyhodnocován za pomoci čítače ve spojení s oscilátorem, či pomocí impedančního analyzátoru. Cílem této práce bylo posoudit možnost použití softwarově definovaného rádia (SDR) a širokospektrálního zdroje šumu jako levné alternativy pro vyhodnocení signálů ze sítě QCM senzorů. Tato alternativa nabízí možnost zpracování několika signálů z QCM senzorů najednou [Obr.1], čímž řeší problematiku časové náročnosti impedanční analýzy. Pro měření byly použity senzory s rezonanční frekvencí od 10 MHz do 18 MHz. Další zkoumanou proměnnou byla velikost napájecího napětí zdroje šumu, která se pohybovala od 4 V do 12 V, a jeho vliv na rozlišení a úroveň signálu. Použitým softwarem pro zaznamenávání signálů byl RSP spectrum analyser a SDRuno. V místě rezonance byl odstup signálu od šumu 6-8 dB. Použitím senzoru s nanesenou vrstvou PMMA citlivém na páry etanolu došlo při expozici k posunu rezonanční frekvence o 2,72 kHz. Výsledky byly ověřeny měřením pomocí impedančního analyzátoru Agilent 4294. Provedené měření potvrdilo, že SRD ve spojení se širokospektrálním zdrojem šumu je vhodnou a levnou alternativou pro vyhodnocování signálů ze sítě QCM senzorů.

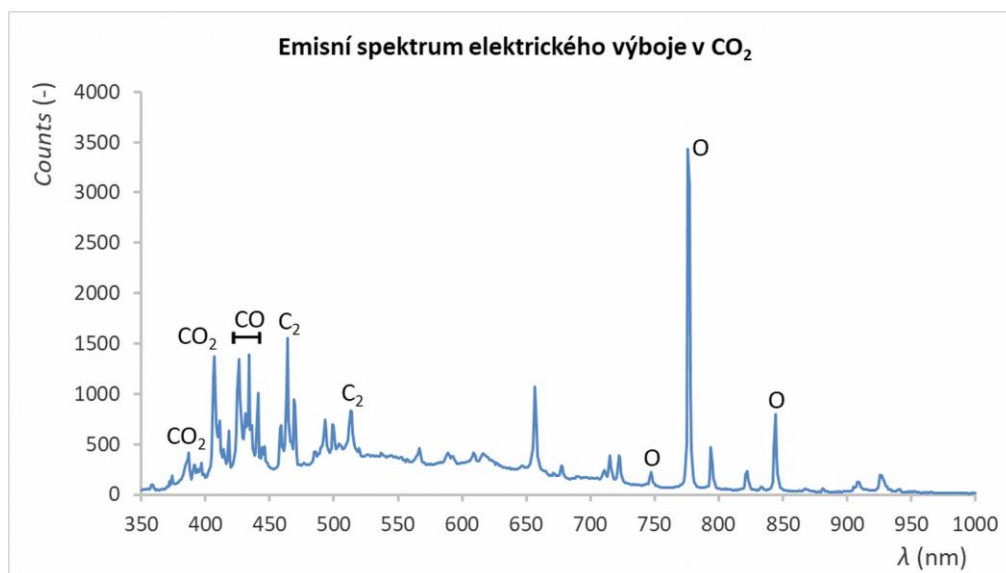


# Detekce oxidu uhelnatého pomocí spektrometrických metod

Karolína Kestlerová (B3)

Školitel: Ing. Josef Khun, Ph.D.

V zemské atmosféře se kvůli spalovacím procesům zvyšuje koncentrace  $\text{CO}_2$ , který neprospívá životnímu prostředí. Jedna z možností, jak řešit tuto produkci, je použít jej jako zdroj uhlíku pro syntézu paliv či jiných organických látek. Možnou cestou je rozklad  $\text{CO}_2$  v netermálním plazmatu elektrického výboje za vzniku CO a dalších produktů. Tento proces je nutné monitorovat. Proto je potřeba vytypovat vhodný senzor či senzory, které se dělí na 3 hlavní skupiny – optické, elektrochemické a chemirezistory. V případě optických senzorů je možné využít skutečnosti, že CO absorbuje infračerveného záření v určité spektrální oblasti. Tyto senzory jsou komerčně dostupné a tato práce se zabývá studiem vlastností jednoho z nich. Studovaný senzor se nazývá nedisperzní infračervený senzor NDIR (= nondispersive infrared), typ GRI CO GP-40-50. Obecnými charakteristikami senzoru jsou selektivita, citlivost, rychlost odezvy, potřebné množství analyzovaného plynu a vliv teploty a vlhkosti. V experimentální části bylo zjištěno, že tento NDIR senzor vykazuje lineární charakteristiku. Měření také ukázala, že není zcela selektivní, reaguje také na  $\text{CO}_2$ , nicméně na CO vykazuje o 3 řády větší citlivost oproti odezvě na  $\text{CO}_2$ . V budoucnu se budu zabývat i případným vlivem teploty a vlhkosti plynné směsi.

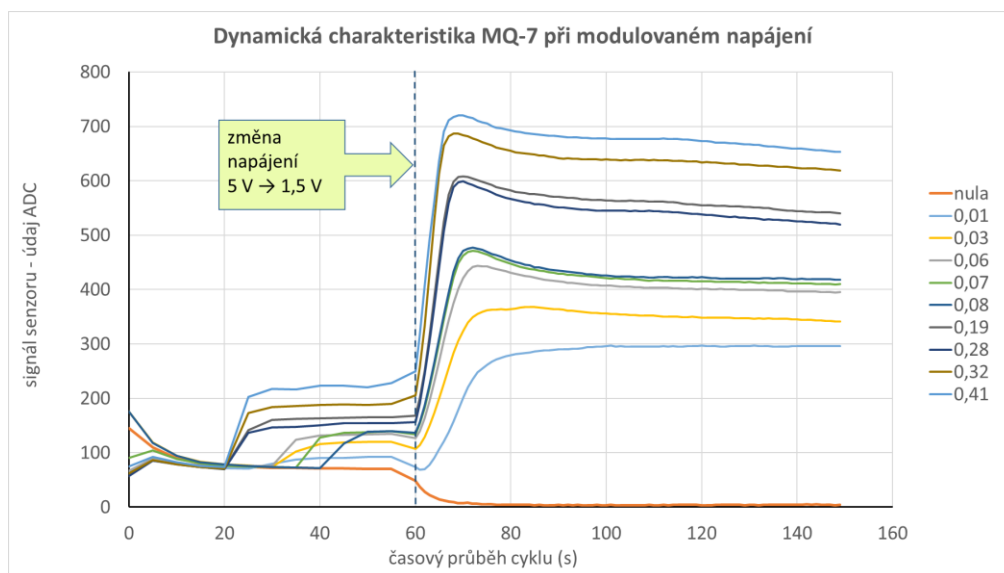


# Studium vlastností polovodičového senzoru oxidu uhelnatého

Marcela Korcová (B3)

Školitel: Ing. Ladislav Fišer, Ph.D.

Oxid uhličitý je v současné době nechtěný odpad činnosti člověka a je považován za skleníkový plyn. Proto je řada iniciativ jej využít jako surovinu, zdroj uhlíku. Jedna z cest je jeho rozklad v nízkoteplotním plazmatu na CO a dále syntetizovat organické sloučeniny. Dobrý monitoring CO je pro jeho toxicitu evidentně nezbytnou součástí. Senzory CO lze rozdělit podle principu detekce na optické, elektrochemické a chemirezistory. V případě chemirezistorů se detekce CO provádí změnou elektrické vodivosti aktivní vrstvy. Aktivní vrstva je realizována polykrystalickým polovodičem na bázi vhodného oxidu (např.  $\text{SnO}_2$ ). Na povrchu dochází k sorpci a aktivaci kyslíku. Aktivovaný kyslík reaguje s CO za vzniku řady nabitých radikálů, což se projeví změnou elektrické vodivosti. V práci se zabývám studiem vlastností chemirezistoru MQ-7. Jsou testovány jeho statické a dynamické vlastnosti. Sensor výrobce doporučuje provozovat v režimu modulovaného napájení pro dosažení vyšší citlivosti, což bylo ověřováno. Bylo navrženo a realizováno zapojení umožňující testovat tento režim, byla naměřena řada přechodových charakteristik pro různé koncentrace CO a z těchto dat sestrojena i statická charakteristika, jak pro napájení konstantním příkonem, tak pro modulované napájení.

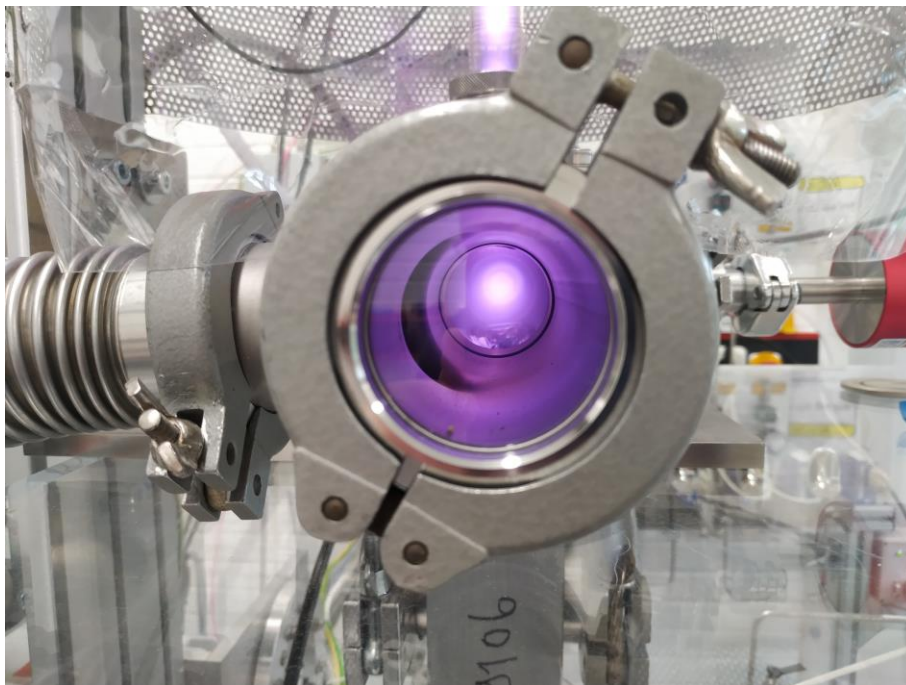


## Projekt DAAD z jiného úhlu pohledu

Bc. Eliška Lokajová (M1)

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

Projekt DAAD z jiného úhlu pohledu"Německá akademická výměnná služba (DAAD) je jednou z největších organizací na světě zabývajících se výměnou pracovníků na poli vědy. Organizace byla založena v roce 1925 a hlavní sídlo má v německém Bonnu. Práce DAAD je financována z prostředků ministerstva zahraničí Německa, Spolkového ministerstva pro vzdělání a výzkum a fondů EU." Jak uvádějí oficiální stránky projektu.V září jsem měla tu čest se tohoto projektu na 3 týdny zúčastnit a v rámci své prezentace bych chtěla přiblížit posluchačům, že zahraniční stáže i když krátkodobé mají své opodstatnění ve studiu a rozvoji vědeckého odvětví. Chtěla bych tento projekt představit ze svého úhlu pohledu, ale zároveň odprezentovat své výsledky. Během stáže jsem si vyzkoušela i samostatnou práci v laboratoři a i v tak krátkém časovém rozmezí jsem připravila několik mikrogramů křemíkových nanočástic ze silanu, změřila VUV spektra několika plazmových zdrojů a seznámit se s provozem na pracovišti v německém Kielu.Stáž jsem absolvovala na univerzitě CAU v Kielu. A byla zaměřena na využití plazmatu.



# *Inaktivace akantaméb využitím nízkoteplotního plazmatu*

Bc. Tereza Měřínská (M1)

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

*Acanthamoeba* spp. je rod volně žijících měňavek vyskytujících se všude kolem nás. Kromě jiného mohou tyto améby způsobovat u lidí akantamébovou keratitidu. Jedná se o infekční onemocnění oční rohovky postihující hlavně nositele kontaktních čoček, kteří se o ně špatně starají. V této práci se zabýváme inaktivací velice odolných cyst *Acanthamoeba* spp. nízkoteplotním plazmatem generovaným kladným korónovým výbojem. Dále zkoumáme působení plazmatu přímo na kontaktní čočky ponořené v roztoku. Zajímá nás, zda se mění povrchové složení a optické parametry čoček, tj. zakřivení, průměr a jejich dioptrická hodnota.

# *Degradácia odtlačkov prstov študovaná pomocou AFM*

Jakub Marián Páleš (B3)

Školiteľ: Mgr. Anna Fučíková, Ph.D.

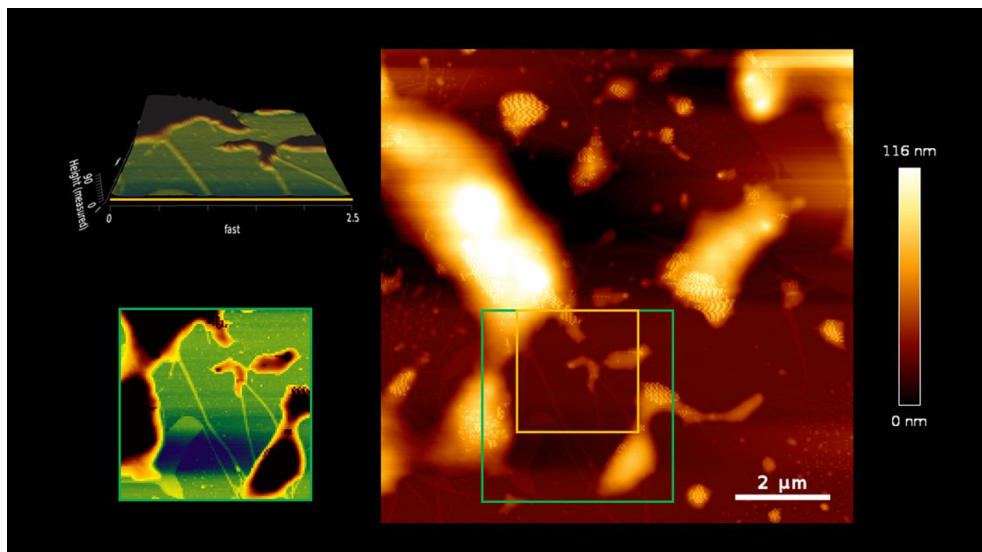
Práca sa zaoberá využitím Atómového silového mikroskopu (AFM) na datovanie odtlačkov prstov vo forenznom vyšetrovaní. Odtlačky prstov, ako biologická stopa podliehajú degradácií či už prirodzene, alebo vplyvom prostredia. Touto metódou je možné získať 3D sken odtlačku prstu a zároveň aj zistiť fyzikálne vlastnosti ako napr. adhéziu. Práve tá zohráva úlohu pri určení veku odtlačku prstu. Za použitia prístroja NanoWizard AFM od spoločnosti JPK Instruments v dvoch pracovných módoch boli zistené zmeny topografie a adhézie odtlačku prstu ponechaného prirodzenej degradácií za laboratórnych podmienok.

# *Degradace biologických vzorků - otisků - studována pomocí AFM a prozkoumání možnosti použití v kriminalistice*

Tereza Svatoňová (B3)

Školitel: Mgr. Anna Fučíková, Ph.D.

Všechny biologické vzorky postupem času degradují, mezi biologické vzorky patří i otisky prstů. Bylo již publikováno několik studií, které řešily změnu složení otisků prstů v čase. V praxi se ale zatím zkoumání stáří otisků prstů nevyužívá. Tato práce pojala tuto problematiku jiným způsobem než dosavadní studie. Snaží se zjistit, jak se mění topografie otisků prstů od momentu otisknutí. K tomuto studiu slouží mikroskop atomárních sil, který umožňuje zkoumat otisky prstů v řádech mikrometrů až nanometrů. Bylo zjištěno, že topografie otisků se mění především u dětí a také u dospívajících. Z literatury je známo, že se v otiscích vyskytuje laktát sodný, který degraduje specifickým způsobem a to tak, že začne po otisknutí otisku prstu polymerizovat a vytvářet struktury připomínající „řetízky“, kterých v čase přibývá. U starších lidí se již laktát na prstech nevyskytuje a stárnoucí struktura otisku prstu se proto nemění. Z výsledků práce vyplývá, že jsme schopni rozlišit otisk prstu dítěte a dospívajícího člověka od otisku prstu staršího člověka. Zároveň jsme u otisků dětí a dospívajících schopni určit stáří otisku v řádu dnů, týdnů a měsíců. Práce dává příležitost využití mikroskopie atomárních sil v dalším odvětví kriminalistiky.

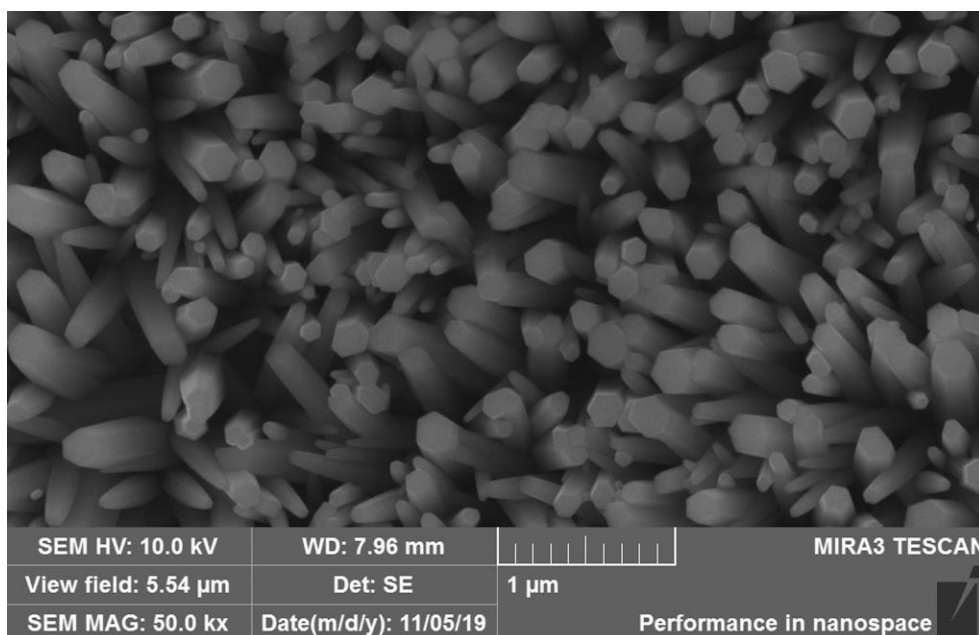


# *Senzorová pole a jejich využití v odorologii*

Lucie Vabroušková (B3)

Školitel: Ing. Přemysl Fitl, Ph.D.

Odorologie je věda zabývající se analýzou zápachů a je využívána hlavně v kriminalistice pro identifikaci osob a věcí. Jedním z cílů této vědy je nahrazení současných metod, tedy využití čichacích psů, přesnějšími přístroji s definovanou konzistentní odezvou. Takovým přístrojem je například senzorové pole chemických senzorů založené na principu změny vodivosti, impedance nebo elektromotorického napětí. Na rozdíl od psů nehrozí u těchto přístrojů takové riziko interference a zkreslení výsledků. Zároveň se nabízejí jako dlouhodobě levnější a efektivnější řešení. V rámci této práce bylo provedeno měření na aparatuře elektronického nosu obsahující senzorové pole stávající z 8 chemických vodivostních senzorů pro měření prezence stopového množství plynných látek na bázi nanodrátů ZnO a CuO (viz obr.). Na těchto senzorech se zkoumala odezva ve formě změny elektrického odporu pro vybrané látky z řad alkoholů, aldehydů, ketonů a esterů. V rámci práce se testovala odezva senzorů na koncentraci 1000 ppm látek ethanolu, ethanal, ethylesteru kyseliny mravenčí a heptan-2-onu. Látka byly vybrány tak, aby měly vysokou tenzi par a silnou pachovou signaturu. V rámci práce byla otestována funkčnost a uživatelská přívětivost programu pro ovládání senzorového pole.



# Ústav počítačové a řídicí techniky (445)

## ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Iva Nachtigalová, Ph.D.

## SEZNAM SEKČÍ

1. [Modelování a analýza obrazů](#)
2. [Řízení a zpracování dat](#)

SPONZOŘI ÚSTAVU POČÍTAČOVÉ A ŘÍDICÍ TECHNIKY



# Modelování a analýza obrazů

MÍSTO: A330

## KOMISE

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

Ing. Jan Kohout

Ing. Hana Soušková, Ph.D.

Ing. Mgr. Darina Bártová, Ph.D.

## PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 [Bc. Tomáš Karlík](#) (M2, doc. Ing. Jan Mareš, Ph.D.)

*Obrazová analýza snímků ze SEM pro lokalizaci a navádění mikrorobotů*

08:50 [Bc. Jakub Steinbach](#) (M2, Ing. Mgr. Darina Bártová, Ph.D.)

*Tepelný systém*

09:10 [Bc. Gabriela Soukupová](#) (M1, doc. Ing. Dušan Kopecký, Ph.D.)

*Stavba a testování 3D tiskárny a její využití při vývoji molekulární elektroniky*

09:30 [Bc. Richard Šípka](#) (M2, Ing. Mgr. Darina Bártová, Ph.D.)

*Nelineární tepelný systém*

09:50 [Bc. Jan Hajíček](#) (M2, Ing. Iva Nachtigalová, Ph.D.)

*Experimentální identifikace míchaného zásobníku*

10:10 [Bc. Lukáš Mrazík](#) (M2, Mgr. Ing. Pavel Kříž, Ph.D.)

*Modelování transportu plynů grafénoxidovou membránou pomocí parciálních  
diferenciálních rovnic*

# *Obrazová analýza snímků ze SEM pro lokalizaci a navádění mikrorobotů*

Bc. Tomáš Karlík (M2)

Školitel: doc. Ing. Jan Mareš, Ph.D.

Hydrogeloví mikroroboti jsou perspektivním nástrojem pro manipulaci na úrovni buněk a velmi malých částic. Kvůli jejich miniaturním rozměrům je často třeba zprostředkovat jejich pohyb externě. V současnosti se ovládají mikroroboti pomocí laserových pulsů a pohyb robota je sledován skenovacím elektronovým mikroskopem (SEM) s kamerou. Cílem projektu je automatizace tohoto procesu s využitím programovatelné desky Arduino, programového prostředí Matlabu a obrazové analýzy. Tato práce je věnována především části o obrazové analýze, kde za pomoci software Matlab byli identifikováni roboti pravoúhlých tvarů.

## *Tepelný systém*

Bc. Jakub Steinbach (M2)

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

Cílem tohoto projektu je matematicko-fyzikální popis laboratorní stanice GUNT RT682, jež má sloužit jako věrná miniatura průmyslového reaktoru s regulovatelnou hladinou a nepřímým ohřevem obsahu vodou v duplikátoru. Stanice v současné době slouží jako výuková pomůcka pro předmět Aplikace měření a řízení v chemii pro řízení vícerozměrného systému teplota-hladina. V rámci projektu je nejprve soustava identifikována a jsou určeny omezující podmínky, jež vyplývají z konstrukčního provedení soustavy. Následně je sestaven matematicko-fyzikální model pro nepřímý ohřev vody v reaktoru.

# *Stavba a testování 3D tiskárny a její využití při vývoji molekulární elektroniky*

Bc. Gabriela Soukupová (M1)

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

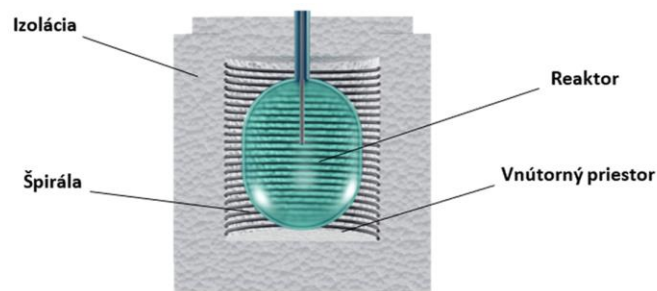
3D tisk je relativně levnou moderní aditivní metodou výroby prototypů, jednotlivých součástek i náhradních dílů k zařízením v nejrůznějších odvětvích lidské činnosti, např. ve zdravotnictví, v automobilovém či v leteckém průmyslu. Příspěvek se zabývá představením nové 3D tiskárny Original Prusa i3 MK3S. Jedná se o tiskárnu typu FFF (Fused Filament Fabrication) s tiskovou strunou o průměru 1,75 mm, která na základě digitálního 3D modelu vytiskne zadaný objekt postupným nanášením vrstev roztaveného plastu o výšce mezi 0,05 – 0,35 mm. Cílem práce bylo tiskárnu sestavit ze zakoupené stavebnice, nakalibrovat ji a otestovat na ní tisk pomocí různých typů tiskových strun (PLA, PETG, ABS a HIPS). V další části práce byl navržen prototyp nosníku nového typu tenzometrického senzoru tlaku, který byl následně vymodelován v software Autodesk Inventor a vytištěn.

# Nelineárny tepelný systém

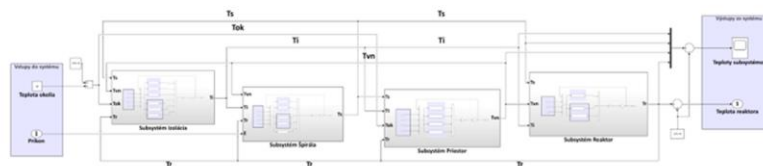
Bc. Richard Šípka (M2)

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

Práca sa zaoberá matematickým modelovaním reaktorovej pece slúžiacej k vyhrievaniu chemického reaktora obsahujúceho látku, ktorej vlastnosti sa v závislosti od zmeny teploty menia. Teplota sústavy sa môže počas pracovného režimu pohybovať v rozsahu od 20 – 800 °C a práve pri pohľade na veľký teplotný rozsah môžeme očakávať nelineárne chovanie reaktorovej pece v okolí vyšších teplôt, spôsobené prestupom tepla sálaním. Tepelná sústava bola rozdelená na štyri časti (subsystémy): (i) izoláciu, (ii) topnú špirálu, (iii) vnútorný priestor a (iv) reaktor. Model pece je znázornený na Obrázku 1. Cieľom práce bolo vytvoriť matematický model nelineárnej tepelnej sústavy, ktorý bude dostatočne presne vykazovať zhodné správanie so skutočným systémom. K regulácii teploty reaktora bol použitý jednoduchý PID regulátor s parametrami nastavenými pomocou vybraných inžinierskych metód (Ziegler-Nichols, Freuhaus, Aström a Hägglung) za súčasného prepínania medzi viacerými matematickými modelmi získanými linearizáciou v rôznych pracovných bodoch. Priebeh regulácie a identifikácie tepelnej sústavy je možné sledovať pomocou grafického užívateľského prostredia (GUI) vytvoreného v programe Matlab.



Obrázok 1 Model tepelnej sústavy



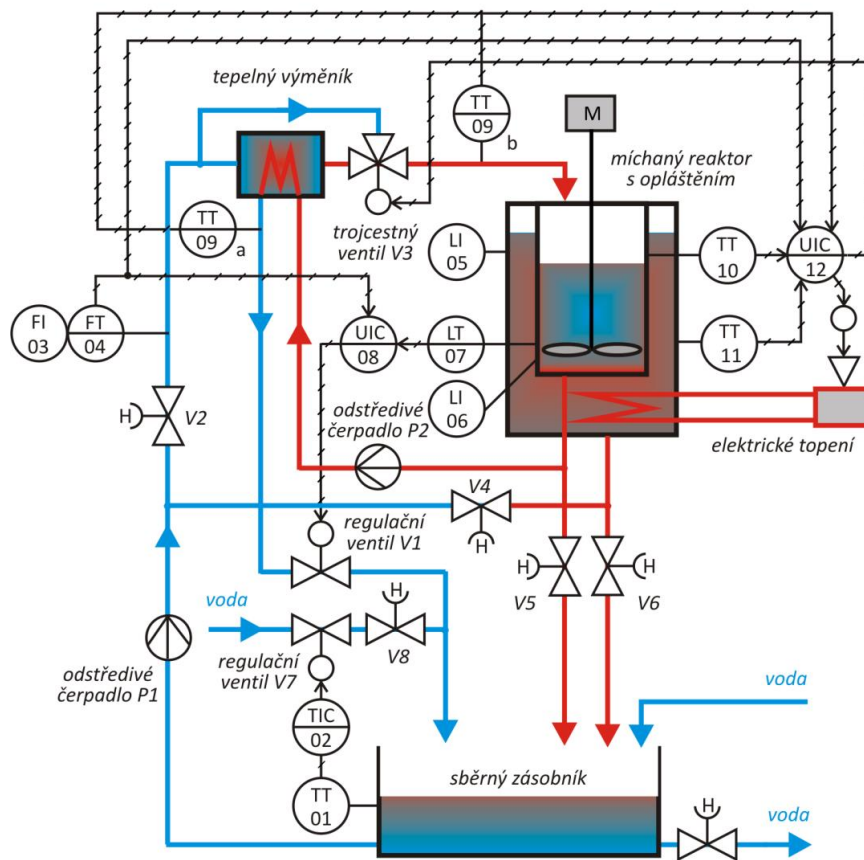
Obrázok 2 Matematický model nelineárnej tepelnej sústavy v prostredí Simulink

# Experimentální identifikace míchaného zásobníku

Bc. Jan Hajíček (M2)

Školitel: Ing. Iva Nachtigalová, Ph.D.

Laboratorní stanice GUNT RT682 je výuková pomůcka vyráběná německou firmou GUNT. Soustava slouží jako učební pomůcky při výuce laboratoří Aplikace měření a řízení v chemii. Jedná se o systém sloužící pro výuku pokročilého řízení vícerozměrného systému hladina-teplota. Hlavním technologickým zařízením stanice je model reaktoru s nepřímým ohřevem v duplikátoru. Stanice je navržena tak aby byla jednoduchá pro ovládání a odolná vůči chybám. Cílem této práce je seznámením se soustavou a jejími funkcemi, experimentální identifikace této stanice a vytvoření hmotnostního matematického modelu.



MaR schéma stanice GUNT RT 682

# *Modelování transportu plynů grafénoxidovou membránou pomocí parciálních diferenciálních rovnic*

Bc. Lukáš Mrazík (M2)

Školitel: Mgr. Ing. Pavel Kříž, Ph.D.

Práce se zabývá matematickým modelováním difuze plynů grafénoxidovou membránou pomocí nelineární diferenciální rovnice známé jako "porous medium equation":  $u_t = D\Delta(u^m)$ . Teoretická část se věnuje numerickému řešení modelu v software OpenFOAM - modifikace solveru a geometrii systému. Experimentální část představuje aparaturu a vyhodnocuje data z měření jedné membrány pod různým tlakem s vybranými plyny ( $H_2$ ,  $CO_2$ ,  $N_2$ ,  $CH_4$ ). Získaná data kvalitativně potvrzují nelineární chování systému, fitování dvojice parametrů ( $D$ ,  $m$ ) modelu na data je v řešení.

# Řízení a zpracování dat

MÍSTO: A40

## KOMISE

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

Mgr. Markéta Zikmundová, Ph.D.

Ing. Zuzana Krbcová

Ing. Jan Vrba

## PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 [Matěj Fričl](#) (B3, prof. Ing. Aleš Procházka, CSc.)

*Optická reflexní spektroskopie při analýze dentálních tkání*

08:50 [Ondřej Golda](#) (B3, Ing. Jan Vrba)

*Vizualizace technologického procesu*

09:10 [Patricia Holigová](#) (B3, doc. Ing. Dušan Kopecký, Ph.D.)

*Analýza pôdneho vzorku metódou SEM/EDS*

09:30 [Tomáš Jirsa](#) (B2, Ing. Naďa Tylová)

*Optimization of 3D model*

09:50 [Tomáš Jíra](#) (B3, Mgr. Markéta Zikmundová, Ph.D.)

*Metropolisův-Hastingsův algoritmus pro analýzu obrázku z elektronového mikroskopu*

10:10 [Vojtěch Martin Kupka](#) (B3, Ing. Jan Kohout)

*Aplikace pro regulaci vlhkosti vzduchu a sledování vnitřního prostředí*

10:30 [Jakub Tomeš](#) (B2, Ing. Naďa Tylová)

*Využití virtuální reality pro vizualizaci dat*

# *Optická reflexní spektroskopie při analýze dentálních tkání*

Matěj Fričl (B3)

Školitel: prof. Ing. Aleš Procházka, CSc.

Práce se zabývá užitím obecných matematických metod číslicového zpracování signálů pro rozlišování zdravé a postižené zubní tkáně. Navržená metodika probíhá na základě analýzy křivek naměřených difuzní reflexní spektroskopií – metody využívající rozdílného odrazu světla o různých vlnových délkách od různých materiálů. Sledují se charakteristické vlastnosti křivek známých měření, ze kterých se dále tvoří mapa vlastností. Podle ní se metodou k-nejbližších sousedů klasifikují neznámá měření. Pro tento účel bylo navrženo grafické uživatelské rozhraní v programovacím prostředí MATLAB. Přesnost klasifikace pro soubor 272 pozorování dosahuje až 93 % v závislosti na velikosti použitého okolí. Metodika umožňuje rozlišení zdravých a postižených tkání bez použití rentgenového záření u extrahovaných zubů s pozdějším možným uplatněním v klinické praxi.

# *Vizualizace technologického procesu*

Ondřej Golda (B3)

Školitel: Ing. Jan Vrba

Proces vedení a výměny tepla je velice důležitou součástí chemického inženýrství. Tímto procesem se zabývá nemalá část průmyslu a v dnešní době je nedílnou součástí našich životů. Příkladem z praxe jsou výměňkové stanice (rozumíme stanice výměny tepla). Tyto stanice mimo jiné zajišťují dodávky teplé vody pro topení a teplé užitkové vody do domů a bytů. Cílem této práce je vytvořit aplikaci, která by umožnila vizualizaci, kontrolu, sběr dat a do jisté míry i zásah do běhu technologického procesu výměny tepla na základě reálné technické dokumentace výměňkové stanice. Projekt je zpracováván v systému SCADA (z anglického Supervisory, Control And Data Acquisition), který obecně zastává funkci dispečerského dohledu, parametrizace a případného řešení poruch a problémů (troubleshooting). Dále zprostředkovává konektivitu a sběr dat ze sledovaných technologických procesů. Přesněji je použit program PROMOTIC, komplexní SCADA objektový softwarový nástroj pro tvorbu aplikací, který monitoruje, řídí a zobrazuje technologické procesy v nejrůznějších oblastech průmyslu.

# *Analýza pôdneho vzorku metódou SEM/EDS*

Patrícia Holigová (B3)

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

Skenovacia elektrónová mikroskopia je metóda, ktorá vďaka svojmu vysokému rozlíšeniu (až 1 nm) presahuje schopnosti optickej mikroskopie. Táto metóda sa často využíva v spojení s elektrónovou disperznou spektrometriou, ktorá umožňuje kvalitatívnu a kvantitatívnu prvkovú analýzu. V tejto práci sme túto dvojicu metód využili k forenznej analýze pôdnej vzorky, ktorá by mohla slúžiť ako jeden z usvedčujúcich dôkazov v súdnych procesoch. Táto vzorka bola odobraná z Nizozemska z okolia mesta Nijega a z výsledku analýzy vyplynulo, že obsahuje prevažné  $\text{SiO}_2$  (Si=27,0 atom. %), nízku koncentráciu  $\text{Al}_2\text{O}_3$  (Al=0,88 atom. %), a stopové prímеси Fe a Cu. Zámer našej práce bol stanoviť presnosť, využiteľnosť a odhalenie prípadných nedostatkov, ktorými môže byť toto meranie sprevádzané. Ďalej otestovať spôsob prípravy vzorky a spracovanie nameraných dát v software Fiji a Esprit 2.1.

## *Optimization of 3D model*

Tomáš Jirsa (B2)

Školitel: Ing. Nad'a Tylová

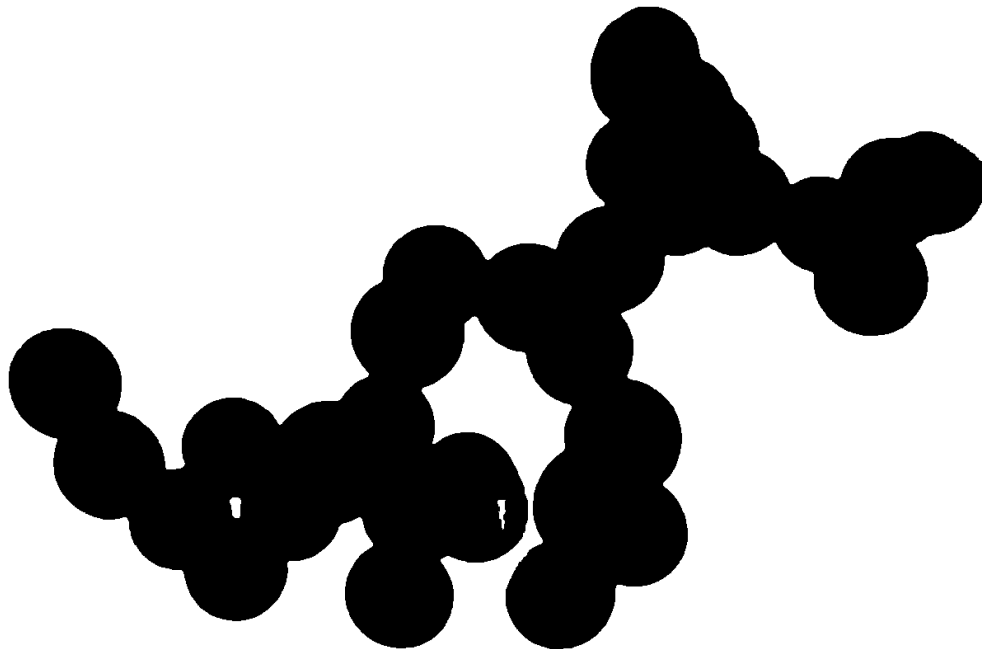
Visualization is a crucial part of understanding image data. Standard methods display images in a limited viewing angle. 3D model is a representation of real objects shape, which is advantageous especially in computer visualization. Basic models can be created by 3D modeling. More complex structures are usually obtained by scanning real-world objects. Scanning methods can be categorized based on whether the surface (e.g. photogrammetry, depth cameras) or full volume (e.g. computed tomography) is being examined. 3D model can be rotated, translated and scaled in real-time without loss of quality because of using vector graphics. 3D model is stored as a combination of vertices, edges and faces defining final polygon mesh. For the more complex model longer processing time is required. The aim of this project is to compare optimization algorithms for reducing complexity of 3D model. The project was implemented in MATLAB.

# *Metropolisův-Hastingsův algoritmus pro analýzu obrázku z elektronového mikroskopu*

Tomáš Jíra (B3)

Školitel: Mgr. Markéta Zikmundová, Ph.D.

Jednou z moderních metod vhodných pro analýzu obrazu z elektronového mikroskopu je stochastické modelování. Binární obrazy lze modelovat pomocí sjednocení disků, kde výsledný model závisí na geometrických charakteristikách, jako jsou celková plocha či obvod sjednocení disků. Analyzovaný obraz jsme schopni převést do bitové mapy, kterou použijeme jako podklad pro výpočet těchto charakteristik. Chování výsledného modelu lze řídit pomocí parametrů příslušných jednotlivých charakteristik. Simulace teoretického modelu se zvolenými parametry je založena na Metropolisovu-Hastingsovu algoritmu. Cílem práce je zkoumání skutečných snímků z elektronového mikroskopu a jejich modelování pomocí výše zmíněného modelu.

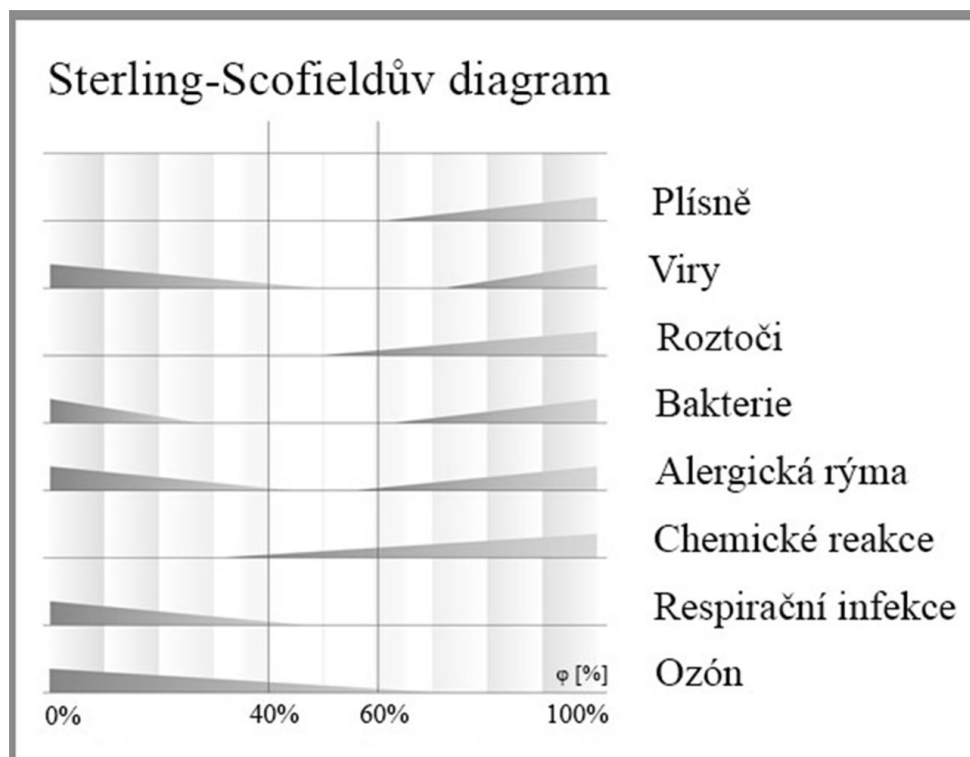


# Aplikace pro regulaci vlhkosti vzduchu a sledování vnitřního prostředí

Vojtěch Martin Kupka (B3)

Školitel: Ing. Jan Kohout

Moderní člověk tráví více než 80 % svého času v uzavřených prostorách vystaven vnitřnímu prostředí budov. Vnitřní prostředí pak svými faktory ovlivňuje fungování lidského organismu. Důležitým a v současnosti zanedbávaným faktorem vnitřního prostředí je vlhkost vzduchu. Sterling-Scofieldův diagram znázorňuje vlivy prostředí na lidský organismus v závislosti na relativní vlhkosti vzduchu. Lze z něj vyčíst ideální rozmezí vlhkosti vzduchu pro člověka, tedy 40–60 %. Pro regulaci vlhkosti vzduchu ve vnitřním prostředí budov je potřeba vzduch zvlhčovat. Práce se zabývá problematikou vlhkého vzduchu a procesem jeho zvlhčování. Na základě získaných poznatků byla vytvořena aplikace pro simulaci procesu zvlhčování vzduchu v definovaném vnitřním prostředí. Práce se dále zabývá vývojem aplikace pro operační systém Android, která má sloužit jako pohodlný nástroj pro sledování a regulaci vlhkosti vzduchu v prostorách, ve kterých se člověk pravidelně vyskytuje.



# *Využití virtuální reality pro vizualizaci dat*

Jakub Tomeš (B2)

Školitel: Ing. Naďa Tylová

Data visualization is one of the most important processes in data evaluation. Virtual reality allows for realistic visualization of three dimensional data, since the user can observe and interact with an object as if it was in front of them. The goal of this project is to explore the possibilities of visualizing three dimensional models of medical data. Medical data usually come stored in two dimensional DICOM files and a three dimensional model will have to be reconstructed to allow proper visualization in virtual reality. The two dimensional slices can be used to produce a volumetric dataset that can be later converted into a standard model and loaded in virtual reality to be observed. This task requires high degree of parallelism along with fast implementation of vector and matrix computation. Thus, most of the functions were implemented on the GPU in order to decrease the processing time to minimum. The GPU is highly efficient at processing these datasets as it is designed to accelerate manipulation and creation of computer graphics, a task comprised of mainly vector and matrix computation. Such implementation allows real time model reconstruction on moderately equipped machines.