



FAKULTA
CHEMICKO-INŽENÝRSKÁ
VŠCHT PRAHA

Studentská Vědecká Konference

2018

22. 11. 2018

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**

Dr. Ing. Pavlína Basařová

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

doc. Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.

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

Ing. Iva Nachtigalová, Ph.D.

[837](#) **Ústav ekonomiky a managementu**

Mgr. Ing. Marek Botecký, Ph.D.

SPONZOŘI FAKULTY CHEMICKO-INŽENÝRSKÉ

ZeNTIVA



ŠKODA



Anton Paar



Lonza



Petr
Slaviček

Ústav analytické chemie (402)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Martin Člupek, Ph.D.

SEZNAM SEKCI

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

SPONZOŘI ÚSTAVU ANALYTICKÉ CHEMIE



OLYMPUS

Your Vision, Our Future



Analytická chemie I

MÍSTO: A105

KOMISE

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

Ing. Patrik Kania, Ph.D.

Ing. Lucie Habartová, Ph.D.

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

PROGRAM

08:30 **zahájení**

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

Identifikace a analýza padělků léčiv Viagra®, Cialis® a Levitra® metodami vibrační spektroskopie

08:45 [Marina Morozovová](#) (B3, Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.)

Rozpoznávání laků na nehty technikami vibrační spektroskopie

09:00 [Vít Suchopár](#) (B3, doc. Ing. Vladimír Setnička, Ph.D.)

Možnosti identifikace padělků přípravku Xanax® pomocí Ramanovy spektroskopie

09:15 [Bc. Petr Šálek](#) (M2, Ing. Vadym Prokopec, Ph.D.)

Nové SERS-aktivní kompozitní substráty na bázi TiO₂/Ag nanočástic

09:30 [Bc. et Bc. Lukáš Tomaník](#) (M2, doc. Ing. Vladimír Setnička, Ph.D.)

Klasifikace spektrálních dat pro diagnostiku karcinomu pankreatu

09:45 [Bc. Oleksandr Volochanskyi](#) (M2, Ing. Vadym Prokopec, Ph.D.)

Příprava zesilujících dendritických nano/mikrostruktur s využitím bezproudové depozice plasmonických kovů pro potřeby SERS spektroskopie

vyhlášení výsledků

Identifikace a analýza padělků léčiv Viagra®, Cialis® a Levitra® metodami vibrační spektroskopie

Bc. Věra Bochníčková (M2)

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

Farmaceutické přípravky tvoří jednu z nejvíce padělaných komodit na světě. Cílem této práce je analýza nejčastěji používaných přípravků pro léčbu erektilní dysfunkce, které byly získány z různých zdrojů na volném internetovém trhu, a následně identifikace případných padělků. Aktivní účinné látky vybraných léčiv patří do skupiny PDE-5 inhibitorů, konkrétně se jedná o látky sildenafil citrát (Viagra®), tadalafil (Cialis®) a vardenafil hydrochlorid (Levitra®). Méně sofistikované padělky lze mnohdy odhalit pouhým srovnáním základních fyzikálních parametrů podezřelých a originálních tablet, jako jsou vzhled, rozměry či hmotnost. Pro pokročilou analýzu byly zvoleny metody vibrační spektroskopie s primárním zaměřením na Ramanovu spektroskopii, která umožňuje rychlou a nedestruktivní analýzu bez nutnosti složitých úprav vzorku. Na základě porovnání spekter originálních a podezřelých tablet bylo možné jednoznačně identifikovat padělky.

Rozpoznávání laků na nehty technikami vibrační spektroskopie

Marina Morozovová (B3)

Školitel: Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.

Jedním z nástrojů pro spolehlivou analýzu kriminalistických stop jsou i techniky vibrační spektroskopie, které se používají pro svoji rychlost, nedestruktivnost vzorku a specifitu. Tato práce se zabývá analýzou stop, které představují úlomky nehtů, laků nebo barevné škrábance, jež můžeme nalézt na primárních i sekundárních objektech z místa činu. Laky na nehty dnes najdeme v různých provedeních a způsobech aplikace, ve všech barvách i s různými třpytivými a dekorativními komponenty. Základní matricí všech laků, do které se přidávají pigmenty obsahující různé sloučeniny kovů, uhlíkovou čern a jiné, tvoří nitrocelulóza, estery a isopropyl alkohol. V této práci byla měřena infračervená spektra s využitím techniky totálního zeslabeného odrazu (ATR) a Ramanova spektra s použitím laseru o vlnové délce 785 nm. Bylo naměřeno přibližně 60 vzorků. Součástí této práce byl i výběr vhodného podkladového materiálu, na nějž byly následně nanášeny (lakovány) vybrané vzorky. V infračervených spektrech se projevuje především matrice, zatímco v Ramanových spektrech pozorujeme i pásy pigmentů. Naměřená vibrační spektra byla statisticky zpracována analýzou hlavních komponent.

Možnosti identifikace padělků přípravku Xanax® pomocí Ramanovy spektroskopie

Vít Suchopár (B3)

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

Alprazolam, lépe známý pod svým obchodním jménem Xanax®, je jedním z nejčastěji předepisovaných léků ze skupiny benzodiazepinů. Ve většině vyspělých zemí je Xanax® k dostání pouze na lékařský předpis. Není tak překvapivé, že v dnešní době existuje na internetu velké množství zdrojů, přes které je možné tento přípravek zakoupit mimo oficiální distribuci. Většinou se jedná o padělky obsahující nesprávné množství účinné látky a užívání takových přípravků může představovat vážné zdravotní riziko. V této práci byly analyzovány a porovnány základní fyzikální vlastnosti (vzhled, hmotnost, rozměry) originálních a padělaných tablet přípravku Xanax®. Již na základě těchto vlastností bylo možné některé vzorky označit za padělky. Přípravky byly dále podrobeny analýze Ramanovou spektroskopií. Po porovnání Ramanových spekter originálních a podezřelých přípravků bylo možné jednoznačně identifikovat padělky.

Nové SERS-aktivní kompozitní substráty na bázi TiO_2/Ag nanočástic

Bc. Petr Šálek (M2)

Školitel: Ing. Vadym Prokopec, Ph.D.

Povrchem zesílená Ramanova spektroskopie (SERS) je analytická metoda umožňující detekci látek o velmi nízkých koncentracích. Molekuly analytu musí být v bezprostřední blízkosti morfologických nerovností povrchu vhodně připraveného substrátu. SERS substrát by měl splňovat požadavek vhodných fyzikálních a chemických vlastností, zejména vyhovovat podmínce povrchové plasmonové rezonance. Z tohoto důvodu jsou pro SERS spektroskopii využívány především ušlechtilé kovy jako jsou zlato a stříbro. Současným trendem ve vývoji nanočástic pro SERS je využití kompozitních materiálů, které mohou mít výhody oproti tradičním kovovým substrátům. Kombinace TiO_2 a ušlechtilého kovu (Ag) může za určitých okolností poskytovat vyšší hodnoty zesílení spektrálního signálu především v důsledku posuvu pásu plasmonové rezonance, synergického efektu, případně vyšší afinity specifických analytů vůči povrchu substrátu. Tato práce je zaměřena na přípravu a testování kompozitních substrátů na bázi nanočástic TiO_2 a Ag. Jako testovací analyt SERS-aktivity byla využita methylenová modř, jakožto látka poskytující vhodnou a stabilní spektrální odezvu.

Klasifikace spektrálních dat pro diagnostiku karcinomu pankreatu

Bc. et Bc. Lukáš Tomaník (M2)

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

Karcinom pankreatu je obzvláště závažným druhem nádorového onemocnění s velmi špatnou prognózou. Je tomu tak mimo jiné i proto, že se jedná o onemocnění, jež lze zavedenými postupy diagnostikovat často až v pokročilém stádiu, kdy je naděje na vyléčení prakticky nulová. Výzkum v této oblasti hojně využívá spektroskopické metody schopné zachytit patologické změny na molekulární úrovni. Nicméně pro jejich aplikaci je nutné vytvořit statistický model pro vyhodnocení získaných dat. Proto se tato práce zaměřuje na zkoumání možností vývoje predikčního modelu kombinujícího data z různých spektroskopických metod, a to elektronového cirkulárního dichroismu, Ramanovy optické aktivity, infračervené a Ramanovy spektroskopie. Celkem byla vyhodnocena spektrální data 40 pacientů s karcinomem pankreatu a 55 kontrolních jedinců. Předkládaná práce shrnuje výsledky z více než 200 separátních analýz provedených na různých datových souborech. Nejlepších výsledků je dosaženo použitím metody podpůrných vektorů; z klasických přístupů se pak jeví jako nejvhodnější lineární diskriminační analýza. Dosažené výsledky indikují značný potenciál tohoto přístupu pro diagnostiku karcinomu pankreatu.

Příprava zesilujících dendritických nano/mikrostruktur s využitím bezproudové depozice plasmonických kovů pro potřeby SERS spektroskopie

Bc. Oleksandr Volochanskyi (M2)

Školitel: Ing. Vadym Prokopec, Ph.D.

Spektroskopie povrchem zesíleného Ramanova rozptylu (Surface-Enhanced Raman Scattering, SERS) využívá fyzikálních vlastností nano/mikrostrukturovaných plasmonických kovů (Ag, Au, Cu) k zesílení signálu studovaného analytu. Jednou z aplikací daného jevu je detekce látek ve velmi nízkých koncentracích pomocí kompozitních plasmonických systémů. Často se takovými látkami stávají sloučeniny přírodní povahy, jako jsou alkaloidy nebo vitamíny, neboť obsahují ve své struktuře heteroatomy (běžně dusík), jejichž prostřednictvím dochází k fyzisorpci analytu na plasmonický povrch. Pro přípravu velkoplošných SERS-aktivních nosičů existuje řada technik, které však bývají časově, finančně a manuálně náročné, protože využívají, např. katodickou redukci příslušného kovu nebo imobilizaci koloidních systémů na povrch inertního nosiče (sklo, platina). Práce je zaměřena na bezproudovou depozici plasmonické vrstvy tvořené dendritickými útvary na Al podklad s využitím rozdílu elektrodových potenciálů ušlechtilého a méně ušlechtilého kovu, což umožňuje připravit levný, jednoduchý a účinný SERS nosič. V rámci studie byla sledována morfologie vznikajících povrchů v závislosti na době přípravy a byly vyzkoušeny různé excitační vlnové délky z důvodu vlivu na zesílení signálu modelového analytu riboflavinu.

Analytická chemie II

MÍSTO: A238 - SEKRETARIÁT

KOMISE

Ing. Vadym Prokopec, Ph.D. (předseda)

Ing. Jan Koucký, Ph.D.

Mgr. Alla Sinica, Ph.D.

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

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 [Bc. Kristýna Dobšíková](#) (M1, doc. Ing. Vladimír Setnička, Ph.D.)

Sledování biomarkerů u pacientů s Alzheimerovou chorobou pomocí ^1H NMR spektroskopie

08:45 [Bc. Anna Freislebenová](#) (M2, doc. Dr. RNDr. David Sýkora)

LC-MS analýza analogů neuropeptidů v potkaní plasmě: optimalizace přípravy vzorků

09:00 [Bc. Ivana Gallová](#) (M2, doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.)

Studium chirálních komplexů butylonu a methylonu s cyklodextrínem spektroskopickými metodami

09:15 [Bc. Barbora Mužíková](#) (M1, doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.)

Identifikace a kvantifikace bioaktivních složek ve vzorcích omamných a psychotropních látek pomocí NMR

09:30 [Bc. Tereza Navrátilová](#) (M1, doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.)

Vývoj chemických jazyků s využitím solvatochromních derivátů stilbazolu

09:45 [Bc. Karolína Salvadori](#) (M1, prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka)

Spektroskopické studium interakce močovinových receptorů s biogenními anionty

vyhlášení výsledků

Sledování biomarkerů u pacientů s Alzheimerovou chorobou pomocí ^1H NMR spektroskopie

Bc. Kristýna Dobšíková (M1)

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

Alzheimerova nemoc (AN) je chronické neurodegenerativní onemocnění mozku, při němž dochází k poklesu kognitivních funkcí. AN je nejčastěji diagnostikována pomocí kombinace psychologického vyšetření, zobrazovacích metod mozkové tkáně a vyšetření mozkomíšního moku. I přes různorodost vyšetření stále neexistuje technika, která by prokázala nástup AN v počáteční fázi, kdy by bylo možné minimalizovat její rozvoj. Proto se výzkum v posledních letech soustřeďuje na hledání nových technik a biomarkerů, které by dokázaly rozpoznat AN v raném stadiu. V této práci jsou prezentovány pilotní výsledky analýzy krevní plazmy pacientů s AN, které byly studovány pomocí metabolomického přístupu technikou NMR spektroskopie. Nejprve byl optimalizován protokol pro přípravu vzorků krevní plazmy. Nejvhodnější bylo vysrážení proteinů methanolem v kombinaci se CPMG experimentem schopným experimentálně odfiltrovat široké signály makromolekul, zejména reziduálních krevních proteinů. NMR metabolomická analýza umožnila kvantifikovat 21 metabolitů. Následující statistická analýza odhalila metabolity, a to kreatinin, glutamin, tryptofan, tyrosin, leucin a threonin, kterými se pacienti s AN odlišovali od zdravých kontrol. Mírné a střední stadium AN se vzájemně lišilo i v koncentracích jednotlivých metabolitů.

LC-MS analýza analogů neuropeptidů v potkaní plasmě: optimalizace přípravy vzorků

Bc. Anna Freislebenová (M2)

Školitel: doc. Dr. RNDr. David Sýkora

Modifikace struktury peptidů pomocí zbytku vyšší mastné kyseliny (tzv. lipidace) představuje jednu z možných cest překonání problémů spojených s použitím nativních peptidů v terapii (zejména nízké stability v organismu). Na druhou stranu přináší tato strukturní změna určité komplikace při analýze těchto látek. Cílem této práce je vývoj metod analýzy lipidovaných analogů peptidu uvolňujícího prolaktin (prolactin-releasing peptide) v plasmě s využitím techniky kapalinové chromatografie ve spojení s hmotnostní spektrometrií. Pozornost je vedle optimalizace separačních a ionizačních podmínek věnována zejména nalezení vhodného postupu přípravy vzorků před analýzou. V tomto směru budou porovnány dva přístupy – srážení plasmatických proteinů a metoda zahrnující pouhé zředění plasmy. Práce vychází z poznatků získaných během vývoje metody pro strukturně podobný analog v rámci bakalářské práce.

Studium chirálnych komplexů butylonu a methylonu s cyklodextrínom spektroskopickými metodami

Bc. Ivana Gallová (M2)

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

Táto práca sa zaoberá štúdiom komplexov chirálnych látok, konkrétne syntetických drog butylonu a methylonu s karboxymethylovaným β -cyklodextrínom. K analýze bola použitá UV-VIS spektroskopia a elektrónový cirkulárny dichroizmus (ECD). Experimenty boli vykonané v prostredí octanového pufru s $\text{pH} = 4,5$, pričom koncentrácia syntetickej drogy bola $100 \mu\text{mol/l}$ a koncentrácia cyklodextrínu bola v rozsahu 0 až 3 mmol/l . Pri meraní na ECD boli experimenty vykonané pri teplote 25°C až 75°C . Pre komplexy analyt-cyklodextrín boli zistené konštanty stability, ktoré boli vypočítané nelineárnou regresiou z dát získaných UV-VIS spektrometriou a ECD. Z dát z ECD boli ďalej vypočítané aj entalpia a entropia študovaných komplexov.

Identifikace a kvantifikace bioaktivních složek ve vzorcích omamných a psychotropních látek pomocí NMR

Bc. Barbora Mužíková (M1)

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

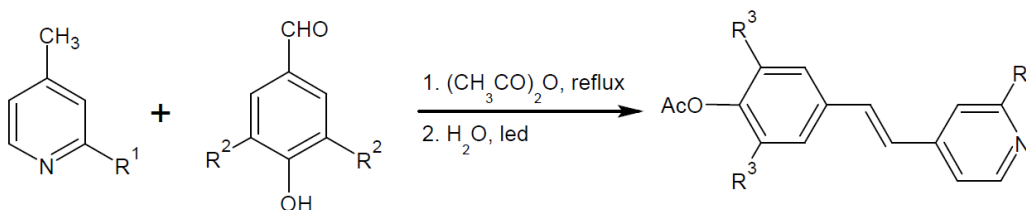
Nové psychoaktivní substance (NPS) jsou analoga klasických přírodních nebo syntetických drog s psychoaktivními účinky. Přestože se NPS začaly na drogovém trhu objevovat teprve na začátku tisíciletí, ke konci roku 2017 Evropské monitorovací centrum pro drogy a drogovou závislost (EMCDDA) eviduje již přes 670 různých NPS. Nejvíce zachycených NPS náleží do skupiny syntetických kanabinoidů a syntetických katinonů. Podobně jako klasické drogy jsou NPS často prodávány ve směsích s pomocnými látkami, které jsou přidávány kvůli potlačení vedlejších účinků nebo pro zvýšení zisku. Cílem práce je optimalizovat NMR experimenty k identifikaci a kvantifikaci NPS a pomocných látek ve vzorcích drog obsahujících katinony.

Vývoj chemických jazyků s využitím solvatochromních derivátů stilbazolu

Bc. Tereza Navrátilová (M1)

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

Předkládaná práce se věnuje přípravě solvatochromních derivátů stilbazolu využitelných pro konstrukci chemických jazyků rozpoznávajících rozpouštědla a jejich směsi. Deriváty vhodné k tomuto účelu musí vykazovat různé solvatochromní chování vůči různým rozpouštědlům. Cílem této práce bylo připravit stilbazoly A, B a C, které se liší od dříve připraveného stilbazolu D povahou substituentů na aromatických jádrech. Po *N*-alkylaci těchto stilbazolů lze očekávat odlišné solvatochromní chování. Látky A, B a C byly připravovány aldolovou kondenzací odpovídajících aldehydů a methylpyridinů (viz schéma). Průběh chemických reakcí byl sledován pomocí TLC analýzy. Izolace látek byla provedena sloupcovou chromatografií. Analýza vzniklých směsí a identifikace připravených látek byla provedena pomocí NMR spektroskopie za využití ^1H a ^{13}C NMR spekter a korelačních 2D NMR spekter, a to ^1H - ^1H COSY, ^1H - ^1H ROESY, ^1H - ^{13}C HSQC, ^1H - ^{13}C HMBC a ^1H - ^{15}N HMBC.



stilbazol A ... $\text{R}^1 = \text{H}$; $\text{R}^2 = \text{tBu}$; $\text{R}^3 = \text{tBu}$

stilbazol B ... $\text{R}^1 = \text{H}$; $\text{R}^2 = \text{OMe}$; $\text{R}^3 = \text{OMe}$

stilbazol C ... $\text{R}^1 = \text{CN}$; $\text{R}^2 = \text{OH}$; $\text{R}^3 = \text{OAc}$

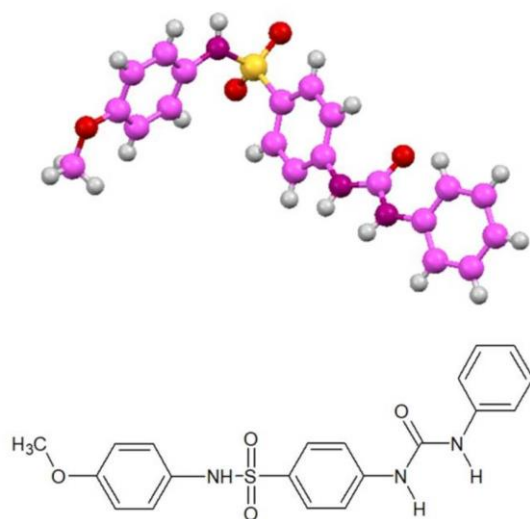
stilbazol D ... $\text{R}^1 = \text{H}$; $\text{R}^2 = \text{H}$; $\text{R}^3 = \text{H}$

Spektroskopické studium interakce močovinových receptorů s biogenními anionty

Bc. Karolína Salvadori (M1)

Školitel: prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka

Anionty zaujímají důležitou roli v biologických systémech. Řada z nich patří k závažným polutantům životního prostředí. Jako příklad lze uvést fosforečnany, které společně s dusičnany představují hlavní příčinu eutrofizace. Fosforečnany dále mohou působit značnou komplikaci například při hemodialýze. Rozpoznávání a odstraňování fosforečnanových aniontů by našlo uplatnění v mnoha odvětvích. Naštěstí řada struktur má schopnost interagovat s těmito anionty a jsou potenciálně využitelné pro jejich selektivní odstraňování. Vhodnými kandidáty pro vázání těchto polutantů jsou receptory na bázi močovinového strukturního motivu, jež jsou známy jako látky schopné vytvářet stabilní komplexy. V rámci svého výzkumu jsem vypracovala syntézu několika nových derivátů močoviny na bázi modifikované nosylové skupiny a vedle nich také derivátů močoviny vhodných pro ukotvení na další substrát. U vybraných derivátů jsem zkoumala jejich schopnost vytvářet supramolekulární komplexy pomocí ^1H NMR titračních experimentů. Vzhledem k omezené rozpustnosti močoviny v běžných organických rozpouštědlech jsem komplexační vlastnosti studovala v polárním aprotickém rozpouštědle DMSO. Mezi zkoumanými anionty vystupují biologicky významné ionty, jež jsou přítomny v krvi, například H_2PO_4^- , nebo chloridový aniont.



Analytická chemie III

MÍSTO: A21

KOMISE

doc. Dr. RNDr. David Sýkora (předseda)

Ing. Gabriela Broncová, Ph.D.

Ing. Antonín Kaňa, Ph.D.

Mgr. Jan Fährnich, CSc.

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 [Bc. Jana Čechová](#) (M1, prof. RNDr. Štěpán Urban, CSc.)

Závislost molekulového složení lidské pachové signatury na věku

08:45 [Nina Habanová](#) (B3, doc. Mgr. Taťjana Šiškanova, CSc.)

Pyrrol- β -cyklodextrin: polymerizace a rozpoznávání hydrochloridů methyl esterů aminokyselin

09:00 [Bc. Tereza Jandřurová](#) (M1, doc. Mgr. Taťjana Šiškanova, CSc.)

Elektrochemická studie interakce mezi phenylpropanolaminem a dibenzo-18-crown-6-etherem kovalentně imobilizovaným na povrch polymeru

09:15 [Bc. Denisa Macková](#) (M2, doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.)

Enantioseparace a stanovení mefedronu a jeho metabolitů kapilární elektroforézou

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

Příprava vícevazebných stacionárních fází pro kapilární elektrochromatografii

09:45 [Bc. Lenka Vatrsková](#) (M2, doc. Mgr. Taťjana Šiškanova, CSc.)

Forenzní elektrochemie nových psychoaktivních látek

vyhlášení výsledků

Závislost molekulového složení lidské pachové signatury na věku

Bc. Jana Čechová (M1)

Školitel: prof. RNDr. Štěpán Urban, CSc.

Cílem této práce bylo zjistit, jak chemické složení lidské pachové stopy závisí na věku. Od 13 dobrovolníků (muži 22 až 72 let) byly odebrány vzorky pachů z dlaní pomocí skleněných kuliček. Vzorky byly následně extrahovány do ethanolu a analyzovány metodou GS-MS. Získaná data byla statisticky zpracována. Bylo nalezeno 213 poměrů látek (splňujících podmínku $p < 0,05$), které byly dále zpracovány metodou PCA. Bylo zjištěno, že věkové skupiny od sebe nejsou jednoznačně odděleny. Následně bylo pro potřeby PCA využito 6 poměrů, splňujících podmínku $p < 0,001$. Skupinu nejstarších dobrovolníků se podařilo oddělit od skupin mladších dobrovolníků.

Pyrrrol- β -cyklodextrin: polymerizace a rozpoznávání hydrochloridů methyl esterů aminokyselin

Nina Habanová (B3)

Školitel: doc. Mgr. Tatjana Šiškanova, CSc.

Vývoj nových selektivných a špecifických elektródových materiálov pre stanovenie enantiomérov fenylalanínu je aktuálny a žiaduci predovšetkým pre klinickú analýzu. Cieľom predpokladanej práce bolo vytvorenie polymérnych filmov na báze pyrolu (PY) substituovaného β -cyklodextrínom (PY- β -CD) elektrochemickou oxidáciou na povrchu skelného uhlíku (GC). Interakcia nemodifikovaných (GC) a modifikovaných (PY a PY- β -CD) elektród s alanínom (Ala) a enantiomérmí fenylalanínu (L-Phe, D-Phe) v prítomnosti elektroaktívneho páru $K_3[Fe(CN)_6]/K_4[Fe(CN)_6]$ bola študovaná metódou lineárnej voltametrie (Linear Sweep Voltametry, LSV). Voltametrické meranie ukázalo, že PY- β -CD/GC modifikovaná elektróda v porovnaní s nemodifikovanou GC elektródou a PY-modifikovanou elektródou prejavuje väčšiu schopnosť rozlišovať enantioméry fenylalanínu.

Elektrochemická studie interakce mezi phenylpropanolaminem a dibenzo-18-crown-6-etherem kovalentně imobilizovaným na povrch polymeru

Bc. Tereza Jandřurová (M1)

Školitel: doc. Mgr. Taťjana Šiškanova, CSc.

Cílem předložené práce bylo kovalentně imobilizovat 4-amino-dibenzo-18-crown-6-ether (DB18C6) na povrch Pt elektrody modifikované polymerní vrstvou na bázi 3-aminobenzoové kyseliny (3ABA) a detekovat psychotropní látku ze skupiny aminů. Polymerní vrstva poly(3ABA) byla deponována na povrch Pt elektrody metodou cyklické voltametrie z roztoku 0,5 M H_2SO_4 obsahující $1,0 \times 10^{-3}$ M monomer 3ABA v rozsahu potenciálu od 0 do 1,2 V (vs. Ag/AgCl). Kovalentní imobilizace receptoru DB18C6 proběhla po aktivaci polymerní vrstvy 1-ethyl-3-(3-dimethylaminopropyl)carbodiimidem přes volné karboxylové skupiny na povrchu elektrody. Vybraným analytem pro elektrochemickou detekci byl phenylpropanolamin (PPA), což je psychotropní látka (PTL), která vykazuje například zvýšení srdeční frekvence a krevního tlaku, dilatace cév a halucinace. Metoda elektroimpedanční spektroskopie, na základě porovnání změn odporů nemodifikované (Pt/3ABA) a modifikované (Pt/3ABA/DB18C6) elektrody v roztocích obsahujících PPA, amonné ionty a sorbitol, potvrdila přítomnost imobilizovaného receptoru DB18C6 na povrchu polymerního filmu. Při interakci vybraných analytů s polymerními filmy dochází ke specifickým a nespecifickým interakcím.

Enantioseparace a stanovení mefedronu a jeho metabolitů kapilární elektroforézou

Bc. Denisa Macková (M2)

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

Tato práce se zabývá optimalizací podmínek pro chirální separaci mefedronu a jeho osmi metabolitů kapilární elektroforézou. Jako chirální selektory byly testovány deriváty cyklodextrinu (CD). Z testovaných derivátů (β -CD, γ -CD, sulfonovaný β -CD, karboxymethylovaný β -CD, heptakis(2,3,6-O-methyl)- β -CD, karboxymethylovaný γ -CD a 2-hydroxypropylovaný β -CD) byl nejefektivnější karboxymethylovaný β -cyklodextrin (CM- β -CD). Dále bylo pomocí simplexové metody hledáno optimální pH základního elektrolytu a koncentrace CM- β -CD. Nejvyššího chirálního rozlišení bylo dosaženo při pH 2,75 a koncentraci 7,5 mmol/l. Pouze v případě metabolitu normefedronu bylo rozlišení mezi jednotlivými enantiomery menší než 0,5. Dále byly pro mefedron a jeho šest metabolitů proměřeny kalibrační roztoky za výše zjištěných optimálních podmínek. Byly sestaveny kalibrační křivky v rozsahu 0,2-5 mmol/l, vypočteny regresní rovnice a meze detekce a stanovitelnosti.

Příprava vícevazebných stacionárních fází pro kapilární elektrochromatografii

Bc. Václav Rach (M2)

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

Tématem této práce je modifikace kapilár pro kapilární elektrochromatografii pomocí Ugiho reakce. Ugiho čtyřsložková reakce je vhodným organickým nástrojem, pomocí kterého lze snadno modifikovat vnitřní povrch kapilár. Touto reakcí vznikají na vnitřním povrchu kapilár různá interakční centra, která mohou být volena pomocí reagujících složek s $-NH_2$, $>CO$, $-NC$ a $-COOH$ funkčními skupinami. Reagující složky jsou voleny tak, aby bylo dosaženo požadovaných separačních vlastností připravené kapiláry. V této práci byla modifikace kapilár provedena čtyřmi odlišnými způsoby: navázáním na stěny, sol-gel technikou, leptáním a vytvořením monolitu uvnitř kapiláry. U všech metod bylo nezbytným krokem zavedení $-NH_2$ skupiny na vnitřní povrch kapiláry, k čemuž byl použit (3-aminopropyl)triethoxysilan. Na takto upraveném povrchu mohla být následně provedena Ugiho reakce. Separační schopnost kapilár byla ověřována na testovacím vzorku směsi aromatických sloučenin, naftalenu, fluorenu, fenanthrenu a anthracenu.

Forenzní elektrochemie nových psychoaktivních látek

Bc. Lenka Vatrsková (M2)

Školitel: doc. Mgr. Tatjana Šiškanova, CSc.

Táto práca je zameraná na potenciometrické štúdium interakcií medzi kalix[4]arénom a novými psychoaktívnymi látkami (NPL). Aminoindán (primárny amín) a deriváty syntetických katinónov (sekundárne a terciárny amín) boli zvolené ako testované analyty. Cieľom bolo pozorovať efekt zmeny percentuálneho zastúpenia receptora membrány, kalix[4]arénu (1wt%, 5wt% a 10wt%), na jej potenciometrické vlastnosti, najmä na citlivosť, lineárny koncentračný rozsah a selektivitu. Zvyšujúce sa množstvo kalix[4]arénu z 1wt% do 5-10wt% viedlo k *i)*zníženiu potenciometrickej citlivosti, *ii)*posunu lineárneho koncentračného rozsahu do oblasti vyššej koncentrácie, *iii)*zmenám potenciometrickej selektivity súvisiacej so štruktúrnymi vlastnosťami testovaných analytov. Využitelnosť PVC-membrán na báze kalix[4]arénu bola overená a dokázaná pri potenciometrickej analýze obsahu sekundárneho amínu (bufedrónu) v modelovej vzorke ($\rho = 2,1 \mu\text{g/ml}$) a reálnej vzorke slín ($\rho = 34,24 \mu\text{g/ml}$). Pri stanovení bufedrónu v modelovej vzorke sa ukázala ako úspešná membrána na báze 10wt% kalix[4]arénu ($2,27 \pm 0,08 \mu\text{g/ml}$, $s_r = 2\%$), zatiaľ čo v reálnej vzorke sa ukázala perspektívnejšia membrána s obsahom 1wt% kalix[4]arénu ($32,52 \pm 3,57 \mu\text{g/ml}$, $s_r = 7\%$).

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



Authorized Distributor



Petr Slaviček

Fyzikální chemie I

MÍSTO: B23

KOMISE

doc. Ing. Michal Fulem Ph.D. (předseda)

Ing. Marcela Dendisová Ph.D.

Dr. Ing. Pavel Vrbka

Ing. Martin Růžička (Unipetrol RPA)

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Dominik Bubák](#) (B3, doc. Ing. Karel Řehák, CSc.)

Studium rozpustnosti trichlorethylenu v roztocích elektrolytů

09:20 [Lucie Draslarová](#) (B2, Ing. Ctirad Červinka, Ph. D.)

Termodynamické vlastnosti bází nukleových kyselin ve stavu ideálního plynu

09:40 [Eliška Kantorová](#) (B3, Ing. Alena Randová, Ph.D.)

Výběr ochranných rukavic pro práci s alkoholy, ketony, ethery, alkany či aromáty

10:00 [Eliška Lieberzeitová](#) (B3, prof. Ing. Květoslav Růžička, CSc.)

Calorimetric study of selected amino acids

10:20 [Petr Touš](#) (B2, Ing. Ctirad Červinka, Ph. D.)

Termodynamické vlastnosti a sublimace kubanu studované metodami výpočetní chemie

10:40 [Martin Urban](#) (B3, doc. Ing. Karel Friess, Ph.D.)

Vliv par organických látek na propustnost protichemického oděvu AČR a HZS

vyhlášení výsledků

Studium rozpustnosti trichlorethylenu v roztocích elektrolytů

Dominik Bubák (B3)

Školitel: doc. Ing. Karel Řehák, CSc.

Trichlorethylen je zdraví škodlivá látka, jejíž emise z průmyslových podniků jsou přísně kontrolovány. V podniku Spolana, a. s., se trichlorethylen používá jako extrakční činidlo v procesu výroby kaprolaktamu. Pro účely snižování koncentrací trichlorethylenu v odpadních vodách by mohlo být užitečné znát jeho rozpustnost v čisté vodě a ve vodných roztocích elektrolytů, které souvisí s výrobním procesem. Jedná se především o síran amonný, kyselinu sírovou a amoniak. V rámci práce byla přímou analytickou metodou naměřena rozpustnost trichlorethylenu za teploty 25 °C ve vodě a v různě koncentrovaných vodných roztocích amoniaku. Metodou IGS (Inert Gas Stripping) byly také získány limitní aktivitní koeficienty trichlorethylenu v roztocích síranu amonného. Tato data byla využita pro popis rozpustnosti této látky v závislosti na koncentraci síranu amonného, a to ve formě Sečenovovy rovnice. Bylo zjištěno, že síran amonný rozpustnost trichlorethylenu znatelně snižuje. Jeho vliv na rozpustnost je vyšší než v případě chloridu sodného, pro který byla data nalezena v literatuře.

Termodynamické vlastnosti bází nukleových kyselin ve stavu ideálního plynu

Lucie Draslarová (B2)

Školitel: Ing. Ctirad Červinka, Ph. D.

Tato práce se zabývá teoretickým výpočtem vlastností adeninu, thyminu a uracilu, jež jsou základní kameny veškeré genetické informace. Termodynamická data pro tyto čisté látky jsou poměrně vzácná, protože DNA a RNA bývají spíše studovány jako celek. Výpočty byly pro nukleové báze prováděny nejprve ve stavu ideálního plynu, později budou vlastnosti vypočítány i pro krystalické uspořádání a bude studována sublimační rovnováha. Pro výpočty optimální molekulární geometrie a dalších molekulárních parametrů adeninu, guaninu, thyminu, cytosinu a uracilu byla použita teorie hustotního funkcionálu (DFT), konkrétně funkcionál B3LYP. Termodynamické veličiny byly počítány statisticko-termodynamickým modelem tuhý rotor-harmonický oscilátor (RRHO). Pro báze obsahující skupiny, které konají vnitřní rotační pohyby, byly tyto stupně volnosti modelovány jako jednorozměrný bráněný rotor (1DHR). Konkrétně se jedná o rotaci methylu v thyminu a rotace a inverze amino skupiny NH_2 v adeninu, guaninu a cytosinu. Pro větší přesnost a pro potlačení planarizace NH_2 skupiny, což se jeví jako artefakt všech DFT výpočtů, byly profily potenciální energie pro rotace a inverze NH_2 skupin počítány pomocí perturbační metody MP2. Vypočtené vibrační frekvence byly porovnány s literárními experimentálními daty.

Výběr ochranných rukavic pro práci s alkoholy, ketony, ethery, alkany či aromáty

Eliška Kantorová (B3)

Školitel: Ing. Alena Randová, Ph.D.

Obsahem této práce je popis sorpčního působení organických látek na různé typy ochranných rukavic z polymerních materiálů. Při interakci kapalin s polymery dochází často k tzv. sorpci rozpouštědla, tj. prostupu rozpouštědla mezi molekuly polymeru, což se projevuje zvětšením hmotnosti (případně objemu) polymeru, a může mít vliv na mechanické a další vlastnosti rukavic. Poškození ochranných rukavic při experimentální práci může fatálně ovlivnit experiment. Organické kapaliny mohou mít škodlivý vliv na lidskou kůži a sorpcí do ochranných rukavic dochází ke zvýšené expozici. Působení organických kapalin na vybrané typy ochranných nitrilových rukavic s odlišným obsahem barviv bylo kvantitativně hodnoceno pomocí porovnání stupně bobtnání v 5 různých organických kapalinách: benzen, butanon, 1,2 – dimethoxyethan, hexan a butan-1-ol, které jsou běžně používanými organickými rozpouštědly. Měření bylo prováděno gravimetricky po ustavení rovnováhy mezi polymerem a kapalinou, při konstantní teplotě 25 °C.

Calorimetric study of selected amino acids

Eliška Lieberzeitová (B3)

Školitel: prof. Ing. Květoslav Růžička, CSc.

Amino acids are very important biochemical compounds. However, not enough data of their thermodynamic properties has been collected. The subject of this work is to provide reliable thermodynamic data including heat capacity and phase behaviour for selected amino acids L-Arginine, L-Aspartic acid, L-Glutamic acid, L-Glutamine and L-Asparagine. Experimental part is based on new calorimetric heat capacities in condensed phase (calorimeter SETARAM μ DSC IIIa) complemented with differential scanning calorimetry (calorimeter TA Q1000) used to determine the presence of any phase transitions. Comparison with literature data is performed.

Termodynamické vlastnosti a sublimace kubanu studované metodami výpočetní chemie

Petr Touš (B2)

Školitel: Ing. Ctirad Červinka, Ph. D.

Kuban (C_8H_8) je chemická sloučenina, jejíž název byl odvozen z tvaru uhlíkového skeletu jeho molekuly, který připomíná krychli. Jeho zajímavé vlastnosti (velké sterické pnutí, kompaktnost molekuly) a možnosti pro praktické použití například ve farmacii nebo z hlediska ukládání energie dělají z kubanu, jeho derivátů a podobných trojrozměrných polycyklických sloučenin vhodné kandidáty pro další výzkum. Hlavním cílem této práce je teoretické studium termodynamických vlastností kubanu pro pevnou a ideální plynnou fázi. K tomu bylo potřeba spočítat optimální molekulovou geometrii nebo krystalovou strukturu, k čemuž bylo použito metody hustotního funkcionálu (DFT). Pro plynnou fázi byl použit funkcionál B3LYP a pro pevnou fázi funkcionál PBE s disperzní korekcí D3 a projektorem rozšířené vlny (PAW). Z těchto dat pak byly v rámci modelu tuhého rotoru – harmonického oscilátoru pro plynnou a v rámci kvaziharmonické aproximace pro pevnou fázi vypočítány termodynamické vlastnosti kubanu. Výsledky výpočtu byly porovnány s dostupnými literárními experimentálními daty – vibrační frekvence s hodnotami měřenými pomocí spektroskopických metod (IR a Raman), tepelné kapacity a sublimační entalpie s hodnotami získanými kalorimetricky. Vypočtené výsledky se rozumně shodují s experimentálními daty.

Vliv par organických látek na propustnost protichemického oděvu AČR a HZS

Martin Urban (B3)

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

Protichemické ochranné oděvy jsou využívány AČR a složkami IZS při pohybu a práci v prostoru s otravnými látkami v kapalně i plynné podobě či různými bojovými biologickými prostředky. Slouží k ochraně zdraví tím, že brání kontaktu těchto látek s kůží nebo jejich vniknutí do dýchacích cest. Jsou zhotoveny z polymerních materiálů, které musí splňovat řadu vlastností, například dobrou mechanickou odolnost proti oděru a prořezání, nízkou míru plastifikace a zbobtnání či musejí být stálé v chemicky agresivních prostředích. V práci se zabývám měřením transportních vlastností těchto materiálů, konkrétně permeance, která spočívá v přenosu hmoty membránou vlivem gradientu tlaku. Měření bylo provedeno pomocí integrálního (time-lag) permeamtru, a jakožto testované plyny byly použity vodík a vzduch (80% N₂, 20% O₂). Dále byla provedena předběžná měření vlivu rozpouštědel pomocí přímé expozice vzorku danému rozpouštědlu. Konkrétně se jedná o acetonitril, isooktan, ethylester kyseliny octové a cyklohexan. Dalším cílem práce bude zjistit míru změn bariérových vlastností za současné expozice organických rozpouštědel, neboť změnou bariérových vlastností, může dojít k průniku nebezpečných látek materiálem protichemického ochranného oděvu, které by průniku za normálních podmínek nebyly schopny.

Fyzikální chemie II

MÍSTO: A135

KOMISE

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

doc. Ing. Karel Řehák, CSc.

Ing. Alena Randová, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Bc. Tereza Bautkinová](#) (M1, Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D.)

Optimalizace přípravy nanokompozitu grafen/polyanilin pro aplikaci v superkapacitorech

09:20 [Bc. Tereza-Markéta Durdáková](#) (M2, doc. Ing. Ondřej Vopička, Ph.D.)

Studium objemového botnění kaučukovitých a sklovitých polymerů pro membránové separace

09:40 [Bc. Ondřej Kolín](#) (M1, doc. Ing. Vladimír Dohnal, CSc.)

Experimentální studium fázových rovnováh ve vodných roztocích G3 a G4

10:00 [Bc. Adam Kovalčík](#) (M2, Ing. Daniel Ondo, Ph.D.)

Thermodynamic insight into collapse of pNIPAM in presence of surfactant sodium dodecyl sulfate

10:20 [Bc. David Palounek](#) (M2, Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.)

SERS spektroskopie červených pigmentů na povrchu plasmonických kovů: vliv excitační vlnové délky

10:40 [Bc. Štěpán Tvrdý](#) (M1, Ing. Pavel Morávek, Ph.D.)

Rozpustnost CO_2 v [emim][DCA]

vyhlášení výsledků

Optimalizace přípravy nanokompozitu grafen/polyanilin pro aplikaci v superkapacitorech

Bc. Tereza Bautkinová (M1)

Školitel: Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D.

Polyaniline is one of the most widely studied conductive polymers. Its rich redox chemistry and simple synthesis make it a promising candidate as an electrode material for supercapacitors. Unfortunately, polyaniline displays several drawbacks such as poor electrochemical cycling stability or low surface area. To address some of these issues, compositing of polyaniline with hierarchical structured fillers has been studied, leading to improvement of the electrochemical performance of the resulting nanocomposite through suitable morphology or by inducing some synergetic effects. Various fillers have been investigated, i.e. conductive metals (e.g. CuO, Ni₃S₂ etc.) and/or nanocarbonaceous materials (e.g. graphene, CNTs etc.). Loading polyaniline with nanocarbonaceous materials such as graphene or carbon nanotubes can lead to higher surface area and higher electrical conductivity. On the other hand, metal oxides, eventually different electroactive substances, can bring new redox pairs to the system, thus enhancing the pseudocapacitive behaviour. The aim of this work is to develop novel material suitable for applications in supercapacitors by incorporating inorganic fillers such as graphene derivatives and iron oxide nanoparticles into polyaniline matrix.

Studium objemového botnání kaučukovitých a sklovitých polymerů pro membránové separace

Bc. Tereza-Markéta Durdáková (M2)

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

Tato práce prohlubuje vhléd do problematiky interakcí mezi polymery a látkami při membránových separačních procesech. Botnání polydimethylsiloxanu (PDMS), polytrimethylsilylpropynu (PTMSP) a polymeru s vnitřní mikroporozitou (PIM-1) bylo studováno v prostředí jednosložkových par. Uvedené polymery jsou běžně používány pro membránové separace směsí dimethylkarbonátu (DMC) a methanolu (MeOH) a současně jsou zástupci dvou fyzikálních stavů polymerů: zatímco zesíťovaný polydimethylsiloxan (PDMS) se za teploty experimentu 40 °C nachází ve stavu kaučukovitém, polytrimethylsilylpropyn (PTMSP) a polymer s vnitřní mikroporozitou (PIM-1) jsou polymery sklovité. Botnání všech zmíněných polymerů v jednosložkových parách vykazovalo odchylky od ideální směsi. Pro PDMS byly pozorovány mírně kladné odchylky od Amagatova zákona. Pro PTMSP, stejně tak pro PIM-1, byly naopak pozorovány výrazně záporné odchylky. Botnání polymerů bylo vyhodnocováno pomocí obrazové analýzy všech nezávislých rozměrů membrán. Tato metoda umožňuje stanovit míru zbotnání vzorku ve třech směrech bez jeho mechanického namáhání.

Experimentální studium fázových rovnováh ve vodných roztocích G3 a G4

Bc. Ondřej Kolín (M1)

Školitel: doc. Ing. Vladimír Dohnal, CSc.

V této práci byla provedena přesná měření aktivity vody ve vodných roztocích triglymu (G3) při 298.15 K a tetraglymu (G4) při 298.15 a 318.15 K. Získané závislosti aktivitních koeficientů nasložení byly korelovány různými modelovými vztahy; nejlepší výsledky pro oba systémy poskytl SSF rovnice, která vystihuje data prakticky v rámci experimentální nejistoty. S cílem předložit ucelený popis rovnováhy kapalina pára těchto systémů v širším oboru teplot, byla naměřená aktivní data korelována společně s některými dostupnými údaji o termodynamických veličinách (dodatková entalpie, rozpouštěcí entalpie v nekonečném zředění či dodatková tepelná kapacita) rozšířenou SSF rovnicí s teplotně závislými parametry. Tyto korelace poskytují nejen dobrý simultánní popis korelovaných dat, ale i dobrý popis dat o rovnováze kapalina-pevná fáze či termálních dat zahrnutých v korelační databázi.

Thermodynamic insight into collapse of pNIPAM in presence of surfactant sodium dodecyl sulfate

Bc. Adam Kovalčík (M2)

Školitel: Ing. Daniel Ondo, Ph.D.

Poly-N-isopropylacrylamide (pNIPAM) is well-known thermoresponsive polymer with its lower critical solubility temperature (LCST) in water around 33°C. This polymer has ability to interact differently in aqueous solutions, the first type of interaction is hydrophilic and creates linear swollen structure. The second is of hydrophobic type and collapsed globules, which are likely to form bigger aggregates, are created. Our aim of present work is to think about following question: "Is it even possible to separate the process of forming globular structures and the process of aggregation?" To verify or disprove our hypothesis, we used a well-known surfactant sodium dodecyl sulfate (SDS), which inhibits aggregation. Several standard experimental techniques such as differential scanning calorimetry (DSC), isothermal titration calorimetry (ITC), dynamic light scattering (DLS) and cloud point technique were used. The data from all techniques were found compatible with themselves and with literature sources, hence an attempt to develop a thermodynamic model representing distribution of polymer species and surfactant species in the solution was carried out. Since the two processes were found mutually indistinguishable from one another, the answer to the question above is "no".

SERS spektroskopie červených pigmentů na povrchu plasmonických kovů: vliv excitační vlnové délky

Bc. David Palounek (M2)

Školitel: Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.

Pigmenty se obvykle vyskytují v uměleckých i jiných dílech v nízkých koncentracích, proto je nutné zesílit jejich signál s využitím např. povrchem zesílených technik. Cílem této práce je zejména sledování vlivu excitační vlnové délky na povrchem zesílená Ramanova spektra pěti červených pigmentů, adsorbovaných na třech různých plasmonických kovech. Malířské, nebo spektroskopické standardy alizarinu, purpurinu, brazileinu, laky a karmínu byly adsorbovány na zdrsňený povrch mědi, zlata a stříbra. K měření byly použity lasery emitující záření o vlnové délce 532, 633, 785 a 1064 nm. Volba excitační vlnové délky ovlivňuje intenzitu neelasticky rozptýleného záření a intenzitu fluorescence. Na excitační vlnové délce závisí rovněž míra povrchového zesílení prostřednictvím elektromagnetického mechanismu, který je spojen s tzv. lokalizovanou povrchovou plasmonovou rezonancí. Mění se také relativní intenzita jednotlivých pásů při použití různých excitací v důsledku odlišné interference záření, popsané prostřednictvím povrchových výběrových pravidel. Zlato, stříbro a měď navíc vykazují různé hodnoty dielektrické funkce a signál získaný z molekul adsorbovaných na těchto kovech se může také lišit s ohledem na morfologii povrchu či na způsobu, jakým se na ně molekuly pigmentů adsorbují.

Rozpustnost CO₂ v [emim][DCA]

Bc. Štěpán Tvrdý (M1)

Školitel: Ing. Pavel Morávek, Ph.D.

Tato práce se zabývá experimentálním stanovením rozpustnosti oxidu uhličitého v iontové kapalině 1-ethyl-3-methylimidazolium dicyanamid (označované zkratkou [emim][DCA]). Iontové kapaliny mohou vzhledem ke svým vlastnostem sloužit jako vhodná absorpční média pro zachytávání CO₂ (např. ze spalin) a jeho následné využití nebo uskladnění. Kapalina [emim][DCA] byla vybrána pro svoji dobrou stabilitu i dostupnost, zároveň však pro ni nebylo v literatuře nalezeno mnoho dat rozpustnosti CO₂, je proto žádoucí tato data experimentálně stanovit. Z *pVT* dat získaných pomocí aparatury sestavené na Ústavu fyzikální chemie byla vyhodnocena tlaková a teplotní závislost Henryho konstanty pro systém CO₂+ [emim][DCA] v teplotním rozsahu 288,15--318,15 K a tlakovém rozsahu 0,1--1 MPa. Data rozpustnosti CO₂ v [emim][DCA] byla následně porovnána s literárními daty rozpustnosti CO₂ v podobných iontových kapalinách.

Fyzikální chemie III

MÍSTO: A125

KOMISE

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

RNDr. Michal Kolář Ph.D.

RNDr. Eva Muchová Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Bc. Michal Belina](#) (M1, prof. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.)

Elektronová spektroskopie s vibračním rozlišením: aplikace na polyaromatické kationty

09:20 [Monika Brožíková](#) (B3, prof. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.)

Ionizace a oxidace karboxylových kyselin: ab initio studium

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

Přenos náboje v molekule karboxypterinu: Atmosférické souvislosti

10:00 [Jiří Janoš](#) (B2, prof. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.)

Chemie řízená vlnovou délkou: fotoiniciátory

10:20 [Emil Pavelka](#) (B3, RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.)

Application of KB-theory in ternary LJ mixtures

10:40 [Bc. Jakub Smutek](#) (M1, RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.)

Modelling of hydrophobic interactions

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

Atomistic simulations of hydrophobic polymer collapse

vyhlášení výsledků

Elektronová spektroskopie s vibračním rozlišením: aplikace na polyaromatické kationty

Bc. Michal Belina (M1)

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

V roce 2015 byl experimentálně potvrzen radikálový kationt fullerenu jako zdroj dvou tzv. difúzních interstelárních pásů. Po téměř 100 letech od jejich objevení tak přišel významný impuls k dalšímu výzkumu molekul podílejících se na této absorpci ve viditelné oblasti. Difúzní interstelární pásy vznikají v mezihvězdném prostoru, který je tak trochu z ruky, a tak prakticky jediným prostředkem, jak můžeme získat informace z vesmíru, jsou spektroskopická pozorování. Konkrétně pro odhalení zdrojových molekul této absorpce je klíčová vibračně rozlišená elektronová spektroskopie. Pro její detailní studium je třeba jít nad rámec běžně užívaných aproximací. Ve své práci se proto věnuji detailnímu studiu elektronové absorpce radikálového kationtu antracenu: efektům v rozporu s Francovým–Condonovým principem, anharmonicitě hyperplochy potenciální energie a dalším možným výpočetním technikám pro získání vibračně rozlišeného elektronového spektra.

Ionizace a oxidace karboxylových kyselin: ab initio studium

Monika Brožíková (B3)

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

Redoxní vlastnosti biomolekul (tj. redoxní potenciál a případně ionizační energie) jsou důležité pro pochopení jejich funkce v organismech, například v souvislosti s fotosyntézou, metabolismy, nebo u oprav poškození DNA. Právě u oprav oxidativních poškození DNA je důležitým prvkem aminokyselina tryptofan, na který se zaměřuje moje práce. Elektrochemické měření redoxních potenciálů ve vodné fázi je ale problematické kvůli vysokým hodnotám této veličiny. Experimentální hodnoty se proto od sebe velmi často liší. Jeden z důvodů, proč získáme například různé redoxní potenciály, je existence rovnováh mezi více stavy – protonizovaných a deprotonizovaných – molekul. Tyto rovnováhy hrají roli jak v redukováných, tak v oxidovaných formách. To je patrné zvláště u podskupiny karboxylových kyselin – aminokyselin. Redoxní potenciál těchto látek se tak stává mimo jiné závislým na pH okolního prostředí. Jednou z cest pro získání redoxních potenciálů představuje fotoemisní spektroskopie, která se v posledních letech rozvíjí především díky zavedení techniky kapalných mikrottrysek. V práci se zaměřuji na ionizační energie a redoxní potenciály různých forem tryptofanu získaných na principu kvantových výpočtů. Cílem je porozumět vztahu mezi redoxním potenciálem a fotoemisním spektrem

Přenos náboje v molekule karboxypterinu: Atmosférické souvislosti

Bc. Stanislav Chvíla (M1)

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

Na poli chemie atmosférických procesů došlo v nedávné minulosti k výraznému rozvoji, a to především zkoumání dějů na fázových rozhraních přirozeně nebo uměle vznikajících aerosolů v atmosféře. Obtížnost laboratorní simulace těchto procesů je podnětem ke zkoumání těchto pochodů *in silico*. V této práci se pokouším nalézt obecný výpočetní protokol pro získávání elektrochemických dat pro molekuly v tripletním excitovaném stavu, jelikož chemii těchto částic byla dosud věnována pouze malá pozornost. Jako testovací subjekt byl zvolen 6-karboxypterin, přirozený produkt rozkladu biogenních složek organismů. Klíčovou roli v tomto zkoumání hraje především správné modelování solvatačního okolí molekuly, jehož vliv na získané výsledky se ukázal být velmi značný. Tato práce také přináší srovnání použití několika různých postupů výpočtu elektrochemických dat a diskuzi jejich vhodnosti.

Chemie řízená vlnovou délkou: fotoiniciátory

Jiří Janoš (B2)

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

Ve třetím tisíciletí došlo k velkému rozvoji molekulových simulací na ab initio úrovni a modelovány jsou dnes běžně i fotochemické reakce probíhající na více excitovaných stavech. Většina simulací předpokládá vertikální excitaci, čímž začíná fotochemická reakce. Tento model odpovídá reakcím spuštěným ultrakrátkými světelnými pulzy, ačkoliv většinou se využívají pulzy delší s dobře definovanou vlnovou délkou. Ve své práci směřuji k hledání simulačních technik, kterými je možné popsat tento scénář, což umožní mimo jiné i řízení fotochemických reakcí vlnovou délkou. Chemie řízená vlnovou délkou má různé využití v praxi. Příkladem může být relativně složitá molekula O-acetyloximu, který se využívá jako fotoiniciátor polymerizačních reakcí, jejichž výtěžek závisí na vlnové délce použitého světla. V této práci se zabývám fotochemií zmíněné molekuly od jednoduchého prvního pohledu až po analýzu náročných dynamických simulací. Diskutovány jsou možnosti zjednodušení výchozí struktury a tím i snížení výpočetní náročnosti, vzorkování základního stavu, dynamické simulace v excitovaném stavu a analýza kvantového výtěžku v závislosti na vlnové délce pro různé výchozí podmínky. Závěrem jsou rozebrány nedostatky současného modelu a možnosti jeho vylepšení spolu s nástinem budoucího postupu.

Application of KB-theory in ternary LJ mixtures

Emil Pavelka (B3)

Školitel: RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.

Setchenow equation is well established relation for description of change in solubility upon the addition of salts or cosolvents into solution. This linear relationship is general, applicable on organic solutes as well as on biomolecules. In this work we employ MD simulations on minimalistic (qualitative) model of ternary Lennard-Jones mixtures, in which the repulsive, neutral and attractive solute-cosolvent interaction regimes can be described. Applying exact Kirkwood-Buff theory we quantitatively connect the changes in local solutions structure with the changes in solute chemical potential and thus its solubility.

Modelling of hydrophobic interactions

Bc. Jakub Smutek (M1)

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. In this work, we use tools of an information theory (IT) to estimate thermodynamic properties of methane in water and methanol. IT connects the thermodynamic properties of hydrophobic solutes to the probability of finding a molecular-sized cavity volume in a given solvent. We approximate the probability distribution of the number of solvent centers in a cavity volume using two moments calculated from the density and radial distribution functions of pure solvents. The radial distribution functions at different temperatures of pure solvents were extracted directly from molecular simulations. Furthermore, test particle insertions of methane were performed to evaluate excess chemical potential directly from simulations in aforementioned solvents. We find good correspondence between the results of information theory and direct molecular simulations. Lastly, we calculate a PMF of a methane dimer at 298 K by means of IT. Upon extension to mixtures, IT may be a promising tool for investigation of an ion-specific contribution to hydration free energy and association of small hydrophobes.

Atomistic simulations of hydrophobic polymer collapse

Bc. Denis Zadražil (M1)

Školitel: RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.

Reversible collapse transitions are fundamental properties of vast majority of biomacromolecules, with the prominent example of protein folding. Determination of reactive pathways, transition states, and reaction rates is of a fundamental importance and well suited for computer simulations. These reaction kinetic properties are in principle accessible from long direct MD simulation, however, such approach is highly inefficient, due to rare occurrence of transition events. Special techniques were derived to efficiently sample reactive events and reaction kinetics. Transition Interface Sampling (TIS) belongs among methods which allow the calculation of the rate constant without proper definition of reaction coordinate, which is highly challenging task *per se*. In this work, we have examined the coil-to-globule transition of a model hydrophobic polymer in a neat water. Equilibrium REMD simulations were used to construct free energy landscape. Finally, TIS simulations were performed to evaluate the reactive fluxes and estimate the rate constant. Results were compared to the rate constant obtained from direct MD simulation. In the future, we aim to employ TIS to study the collapse and the aggregation of the thermoresponsive polymer pNIPAM.

Fyzikální chemie IV

MÍSTO: A402

KOMISE

prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka (předseda)

RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.

Ing. Červinka Ctirad, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Bc. Kryštof Březina](#) (M2, prof. Mgr. Pavel Jungwirth, CSc., DSc.)

Ab Initio Molecular Dynamics Study of Benzene Radical Anion in Liquid Ammonia

09:20 [Bc. et Bc. Jiří Janek](#) (M2, prof. RNDr. Jiří Kolafa, CSc.)

Modifikované Gearovy integrátory s lepší časovou reverzibilitou

09:40 [Bc. Bc. Martin Klíma](#) (M2, prof. RNDr. Jiří Kolafa, CSc.)

Nukleace vody a argonu v molekulových paprscích

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

Fotodisociace a rekombinace peroxidu vodíku

10:20 [Bc. Jaroslav Sita](#) (M2, prof. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.)

Akcelpace ab initio molekulové dynamiky pomocí duálního potenciálu

10:40 [Alexandr Zaykov](#) (M2, RNDr. Zdeněk Havlas, DrSc.)

Singlet Fission - Recent Advances in the Simple Theory

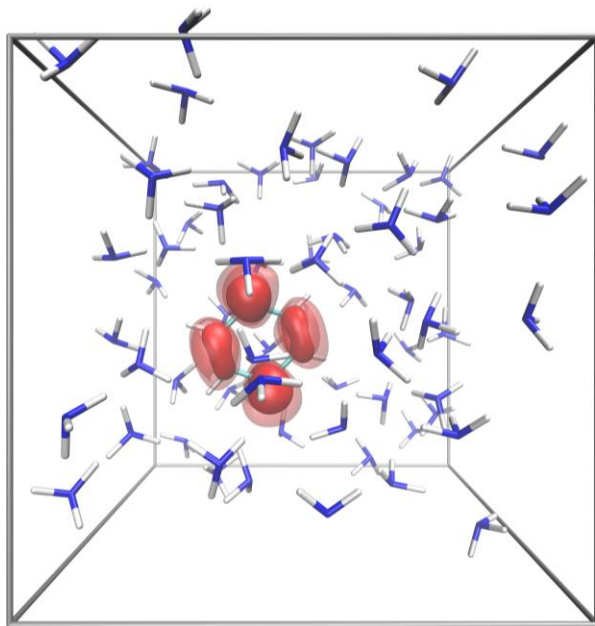
vyhlášení výsledků

Ab Initio Molecular Dynamics Study of Benzene Radical Anion in Liquid Ammonia

Bc. Kryštof Březina (M2)

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

The benzene radical anion is a key intermediate in the Birch reduction: an organic reaction, where benzene-like aromatics are reduced to 1,4-cyclohexadienes by a solution of an alkali metal in liquid ammonia. This work addresses the properties and behavior of the benzene radical anion in the presence of liquid ammonia by the means of *ab initio* molecular dynamics: a costly but necessary method to correctly describe the non-trivial, open shell electronic structure of the species in question. Notably, the presence of dynamic Jahn-Teller phenomena in the liquid phase and the structure of solvent surrounding the anion are studied computationally for the first time. (Picture: benzene radical anion in a box of liquid ammonia; spin density distribution is depicted in red.)



Modifikované Gearovy integrátory s lepší časovou reverzibilitou

Bc. et Bc. Jiří Janek (M2)

Školitel: prof. RNDr. Jiří Kolafa, CSc.

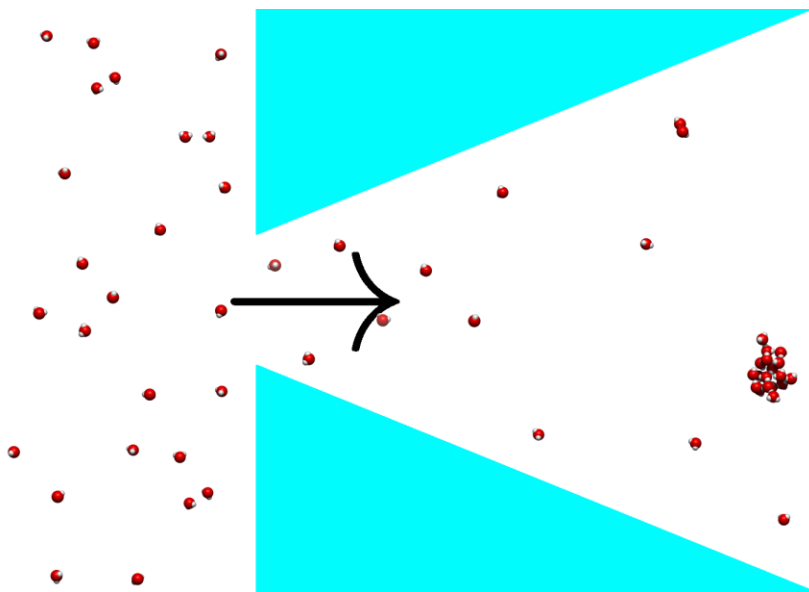
Numerická integrace hraje klíčovou roli v simulacích metodami molekulární dynamiky (MD). Nejčastěji používaná Verletova integrační metoda je pouze 2. řádu. Nadto existují problémy a algoritmy, pro které je její aplikace komplikovaná. Užití metod vyšších řádů je však limitováno požadavkem na zachování energie v průběhu integrace. Cílem této práce je najít metody vyšších řádů odvozené z Gearových integrátorů typu prediktor-korektor, které by měly lepší časovou reverzibilitu, tzn. i zachování energie, než originální metody. Předchozí úpravy korektoru byly vedeny myšlenkou ustoupit z požadavku na stabilitu. Tento postup však k cíli nevedl. V této práci ukážu, jak odvodit metody s lepší časovou reverzibilitou na základě analogie s Verletovou metodou, která je přísně časově reverzibilní. Nové metody lze získat minimalizací prvních členů korektoru v tzv. historické notaci. Tato úprava vede ke snížení řádu metody, řád zachování energie se však zvýší. Navíc je zachována nejvyšší možná stabilita. Nové integrátory byly testovány na harmonickém oscilátoru a dvou jednoduchých MD systémech. Testy ukazují, že při vhodné volbě integračního kroku lze dosáhnout významně lepšího zachování energie než při použití originálních integrátorů stejného řádu.

Nukleace vody a argonu v molekulových paprscích

Bc. Bc. Martin Klíma (M2)

Školitel: prof. RNDr. Jiří Kolafa, CSc.

Práce se zabývá studiem nukleace při supersonické expanzi vodní páry a argonu. Plyn během expanze prochází tryskou do evakuované části aparatury, dochází k jeho ochlazení a následné nukleaci. Vznikají tak klastry různých velikostí a tvarů. Některé experimenty naznačují, že vzniklé klastry nemají termodynamicky optimální kulový tvar. Pro potvrzení této domněnky mohou být použity MD simulace celého procesu. Cílem práce je vývoj algoritmu, který by takovou simulaci umožnil. Celá simulace probíhá v periodickém simulačním boxu s konstantním počtem molekul. V důsledku expanze plynu je měněn objem boxu. Průběh hustoty expandujícího plynu v čase je nejprve vypočten za předpokladu jeho ideálního chování. Takto získaný průběh hustoty však není v souladu s reálným chováním plynu. To se projevuje nekonstantním hmotnostním tokem. Simulace je tedy prováděna po částech, vždy nejprve podle původního průběhu hustoty. Po zpětném výpočtu hmotnostního toku a jeho derivace je na jejím základě modifikován původní průběh hustoty a daný úsek je simulován znovu. Po dosažení určité přesnosti, dojde k posunu k dalšímu úseku a vše se opakuje. Výsledná data jsou porovnávána s experimentálními, poskytnutými skupinou M. Fárníka z Ústavu fyzikální chemie Jana Heyrovského Akademie věd České republiky.



Fotodisociace a rekombinace peroxidu vodíku

Bc. Jan Poštulka (M1)

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

Peroxid vodíku při ozáření UV zářením podléhá fotodisociaci. Vznikají primárně hydroxylové radikály OH a sekundárně radikály HO₂ spolu s radikálem vodíku. Produkce reaktivních hydroxylových radikálů je významná pro čištění vody nebo sterilizaci v medicíně, disociace peroxidu vodíku může být také zdrojem radikálů v zemské atmosféře. Výskyt peroxidu vodíku byl rovněž potvrzen na několika tělesech sluneční soustavy, jako je například Jupiterův měsíc Europa. V této práci je peroxid vodíku modelovým chromoforem pro vývoj techniky neadiabatických molekulových simulací při konstantní vlnové délce či pro popis difúze a rekombinace nascentních radikálů. Práce je zaměřena na popis disociace peroxidu vodíku v plynné fázi i ve vodném roztoku. Pro simulaci roztoku využívám metod typu QM/MM. Tento přístup rozdělí studovaný systém na dva podsystémy, z nichž jeden je popsán výpočetně nenáročnou molekulovou mechanikou, zatímco druhý je popsán pomocí kvantového funkcionálu. To dovoluje popsat solvatované systémy se zahrnutím dostatečného množství molekul rozpouštědla. V práci studuji vliv solvatace a kvantových efektů na strukturu roztoků peroxidu vodíku. Práce je přípravnou studií k dalšímu vývoji technik simulací s konstantní vlnovou délkou, studiu difúze a rekombinace radikálů.

Akcelerace ab initio molekulové dynamiky pomocí duálního potenciálu

Bc. Jaroslav Sita (M2)

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

Ve své práci se zabývám testováním simulací molekulové dynamiky s použitím konceptu duálního potenciálu. Metodu molekulové dynamiky jsem ve své předchozí práci používal na vzorkování počátečních podmínek pro další výpočty, jako například pro výpočty absorpčních spekter. V kontextu *ab initio* dynamiky je časově nejnáročnější výpočet gradientů energie, tedy sil působících na molekulu v každém kroku molekulové dynamiky. Koncept duálního potenciálu využívá dva potenciály, jejichž kombinací vznikne potenciál, na němž probíhá simulace molekulové dynamiky. Jeden potenciál je výpočetně méně náročný, ale také méně přesný. Druhý je naopak výpočetně náročnější, ale měli bychom s jeho použitím dostat reálnější distribuci geometrií. Cílem molekulové dynamiky s duálním potenciálem je získat distribuci geometrií, jako kdyby byla simulace provedena na výpočetně náročnějším potenciálu, ale za zlomek času. Koncept duálního potenciálu jsem testoval nejdříve na systému dimeru vody, u kterého jsem sledoval distribuci vzdáleností atomů kyslíku v závislosti na parametrech simulace s duálním potenciálem. S těmito poznatky jsem přistoupil ke studiu molekuly azobenzenu, která byla mým ústředním zájmem v dřívější práci a mám o této molekule tedy dostatek dat k porovnání.

Singlet Fission - Recent Advances in the Simple Theory

Alexandr Zaykov (M2)

Školitel: RNDr. Zdeněk Havlas, DrSc.

The main topic of this short contribution to Student scientific conference 2018 is recent advances in the field of "Simple" theory of exciton multiplication phenomenon bearing the name singlet fission (SF). SF could prove to be a potent helper for the extraction of solar energy from photons in the above-green light region. For these photons more than half the energy is usually wasted during the conversion process. The theory revolves around Fermi-Dirac golden rule. In the previous iterations the suitability of a structure potentially undergoing isoergic SF was assessed purely on two factors. One of them being matrix element between initial (mono)exciton state and final biexciton state, and roughly on the magnitude of Davydov splitting (DS). As it is known, thermodynamics do influence kinetics of electron transfer reactions, where SF certainly belongs. Therefore, Marcus theory is employed in the approximation of density of states in the above-stated golden rule. Interesting conclusions arising from the use of this approach, such as possibly correct prediction of faster SF structure based on provided crystallographic data, are also discussed. Results in the form of absolute and more importantly relative rates are shown.

Ústav chemického inženýrství (409)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Dr. Ing. Pavlína Basařová

SEZNAM SEKČÍ

1. [Chemical Engineering I](#)
2. [Chemical Engineering II](#)
3. [Chemické inženýrství 1](#)
4. [Chemické inženýrství 2](#)
5. [Chemické inženýrství 3](#)
6. [Chemické inženýrství 4](#)
7. [Chemické inženýrství 5](#)

SPONZOŘI ÚSTAVU CHEMICKÉHO INŽENÝRSTVÍ

ZeNTIVA
ŠKODA



Chemical Engineering I

MÍSTO: B 139

KOMISE

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

Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D.

Ing. Denisa Lizoňová

Ing. Jiří Kolář

Ing. Eliška Skořepová, Ph.D.

Ing. Jan Dundálek

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:40 [Bc. Martin Balouch](#) (M2, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

Protocells: Promising nanocarriers for on-demand drug delivery

09:00 [Filip Hládek](#) (B3, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

Preparation of protocells: encapsulation efficiency and on-demand payload release

09:20 [Bc. Anna Hubatová-Vacková](#) (M2, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

Preparation of multi-compartment microparticles for controlled drug release

09:40 [Kristýna Idžakovičová](#) (B3, RNDr. Ivan Řehoř, Ph.D.)

Light-shaped chitosan hydrogels

10:00 [Bc. Emel Ilgin Karakoc](#) (M2, Ing. František Muzika, Ph.D.)

The effect of pH of supply solutions on pH dynamic behaviour of Urea-Urease system in CSTR

10:40 [BSc Aliye Hazal Koyuncu](#) (M2, Ing. Viola Tokárová, Ph.D.)

Synthesis and Characterization of Nanoparticles by Using Microfluidic Device

11:00 [Bc. Erik Sonntag](#) (M1, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

Design of Dissolution Method for Poorly Soluble Drug Formulation

11:20 [Bc. Adam Waněk](#) (M1, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.)

Development and characterisation of tablets with controlled dissolution kinetics by FDM 3D printing

11:40 [Bc. David Zůza](#) (M1, Ing. Ondřej Kašpar, Ph.D.)

Design of Taylor reactor for continuous preparation of silica microparticles

12:00 [Bc. Martin Šourek](#) (M1, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Linking micro-scale and meso-scale models for catalytic filter

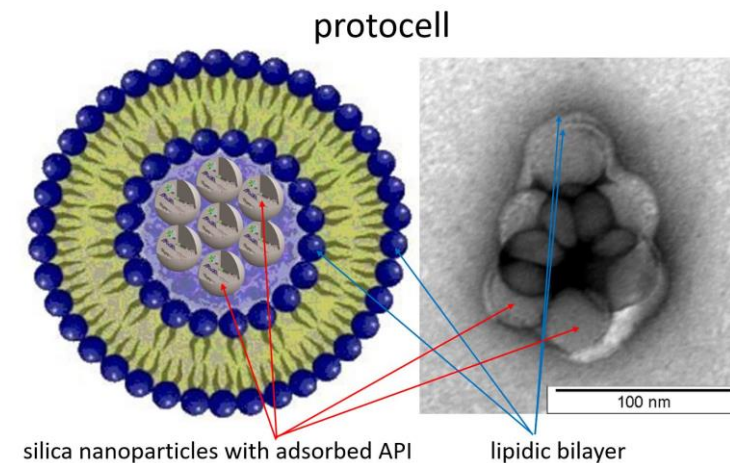
vyhlášení výsledků

Protocells: Promising nanocarriers for on-demand drug delivery

Bc. Martin Balouch (M2)

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

The targeted delivery of specific Active pharmaceutical ingredients (APIs) to the required site of effect inside human body is complicated and recently often studied problem, because when API is not specifically targeted various adversary effects can occur, such as reaction of API with surrounding environment, poor solubility in body fluids, immune response, etc. Liposomes can be used as vessels for such targeted delivery for some APIs like doxorubicin, daunorubicin or cytarabine. However, they are not suitable for all APIs due to complications with encapsulation of the APIs into the liposomes. One of the possible solutions for this problem is to first adsorb the API into a porous particle and then encapsulate the particle itself into the liposome. The formed nanocomposites are called protocells. The aim of this work is to prepare silica nanoparticles, adsorb a model set of APIs into them and encapsulate the particles into liposomes to form protocells. Further aim of this work is to prove that using this way it is possible to encapsulate APIs which are not possible to be encapsulated into simple liposomes.



Preparation of protocells: encapsulation efficiency and on-demand payload release

Filip Hládek (B3)

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

Majority of newly synthesized drugs is characterized by poor water solubility, which can be improved either by amorphization or by loading into a carrier, for example mesoporous silica particle. This work focuses on preparation of so-called protocells – mesoporous silica nanoparticles encapsulated in liposomes, where liposomes act as gatekeepers and prevent undesired drug leakage. Such formulations allow us to deliver the drug into specific sites, for example tumours (passive targeting via EPR effect, or antibody-mediated active targeting). This work contains synthesis of the silica nanoparticles (180 nm) and its optimization, subsequent loading of the model substance, preparation of the protocells and evaluation of the loading capacity and release kinetics.

Preparation of multi-compartment microparticles for controlled drug release

Bc. Anna Hubatová-Vacková (M2)

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

Hydrogel microparticles are hydrophilic microparticles with the ability to incorporate various functional components such as liposomes, nanoparticles or enzymes. Microfluidics allows us to prepare monodisperse microparticles in sizes comparable to those of blood cells, i.e. 5 to 10 μm , which makes them suitable for targeted drug delivery. These microparticles can be used as miniature chemical or biochemical reactors in order to store, deliver, chemically process and locally release pharmaceutically active substances that are highly reactive or unstable, and therefore cannot be delivered in standard dosage forms. Targeted drug delivery improves efficiency and decreases side-effects of a drug by avoiding interactions with healthy tissue. The goal of this project is to synthesize hydrogel microparticles which are able to deliver and in response to an external radiofrequency signal release active matter, e.g. allicin, a highly potent natural antibiotic compound found in garlic. In the current stage, alginate microparticles containing iron oxide nanoparticles and liposomes with encapsulated carboxyfluorescein dye were successfully prepared in a microfluidic chip and analysed by confocal microscopy.

Light-shaped chitosan hydrogels

Kristýna Idžakovičová (B3)

Školitel: RNDr. Ivan Řehoř, Ph.D.

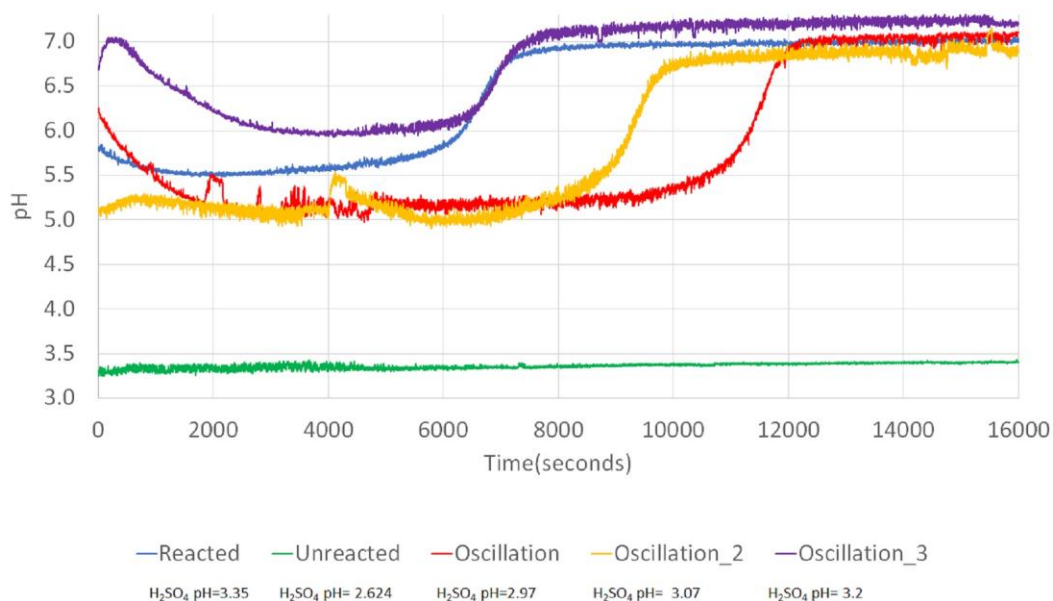
Hydrogels are cross-linked materials capable of absorbing large amounts of water without dissolving. They are used in broad spectrum of bioapplications such as drug delivery and tissue engineering. For these uses specific shapes of particles are required. Thus, the focus of the scientists has shifted to lithographic synthesis of such hydrogels. Most of lithographic methods use light to determine the shape of synthesized objects, therefore, synthetic photocrosslinkable polymers are used as substrates. However, biopolymers offer much better biocompatibility over synthetic polymers, which is crucial in bioapplications. Biopolymers can be crosslinked using various methods, but light is not one of them, which prevents their lithographic processing. In this work, we utilized synthetic polymer as sacrificial template to generate biopolymer particles of desired shape. We successfully prepared mixture of biopolymer (chitosan) and template polymer (methacrylated dextran). Synthetic polymer was crosslinked via stop-flow lithography to gain desired shape and then we used genipin to crosslink entrapped biopolymer. Synthetic polymer was then hydrolysed under basic conditions yielding solely biopolymer particles.

The effect of pH of supply solutions on pH dynamic behaviour of Urea-Urease system in CSTR

Bc. Emel Ilgin Karakoc (M2)

Školitel: Ing. František Muzika, Ph.D.

Urea-Urease system is promising system for the bio regeneration of concrete material. The cracks in concrete can be filled with solution of powdered chalk (CaCO_3) dissolved in lactic acid creating a Ca^{2+} solution and then other solution of urea and urease should be added. The urease solution hydrolyse urea producing ammonia and bicarbonate ions that can precipitate and produce calcium carbonate [1]. Urea-urease system has bell shaped activity curve from pH 3 to 11 showing maximum at pH 7. If the higher pH is caused by ammonia, it creates negative feedback [2], which may lead into pH dynamic regimes. That can be used in breathing microgel reactors [3]. In this study we used CSTR (2.86ml) with three inflows, specifically: urea (0.0015M, $F_0 \sim 0.08\text{ml/min}$), urease (5U/ml, $F_0 \sim 0.33\text{ml/min}$) and sulphuric acid solutions ($\text{pH} = <2.624; 4.81>$, $F_0 \sim 0.08\text{ml/min}$) under 25°C . Different concentrations of acid were used to find dynamic behaviour. pH was measured using pH probe theta 113vfr and pH meter HI 5222-02. [1] Phua, Y.J. and A. Røyne, Construction and Building Materials, 2018, 167, 657-668. [2] Hoare, J. P. and Laidler K. J., J. Am. Chem. Soc., 1950, 72 (6), 2487–2489 . [3] Che, H., S. Cao, and J.C.M. van Hest, J. Am. Chem. Soc., 2018, 140(16),5356-5359.



Synthesis and Characterization of Nanoparticles by Using Microfluidic Device

BSc Aliye Hazal Koyuncu (M2)

Školitel: Ing. Viola Tokárová, Ph.D.

In recent years, nanoparticles have essential role in various areas such as biomedical, environmental or pharmaceutical applications due to their chemical and physical properties. In all these applications, ensuring control over the particle size and shape has high importance due to their size and shape dependent attributes. The most traditional nanoparticle synthesis method is the batch process due to its fast and easy reaction setup. However, abundant types of nanoparticles are very sensitive to the reaction parameters which directly affect the final particle size and shape. Thus, the process is hardly reproducible. In this work, we present silver nanoparticle synthesis using a droplet generation in microfluidic device. Microfluidic setup offers higher control over the reaction process by easy control and flexible settings of the system parameters (e.g. mixing and flow rates of the reagents) than batch process. The size and morphology of the final nanoparticles are analyzed and compared to batch process.

Design of Dissolution Method for Poorly Soluble Drug Formulation

Bc. Erik Sonntag (M1)

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

One of the ways how to administer a poorly water soluble drug into human body is a long-acting intramuscular suspension. Such formulation offers many advantages when compared with conventional formulations of the same compounds. These advantages include: predictable drug-release profile over a defined time period, decreased side effects, improved systemic availability by avoidance of first-pass effect, etc. The goal of this work is to design an *in vitro* dissolution method for a particular depot suspension of an inactive medication. After the administration the suspension remains inside the muscle in a form of depot. Solid particles slowly dissolve into tissue fluid and the prodrug is enzymatically metabolized to the active drug. Particle size and surface area are limiting step for dissolution kinetic of this formulation. By mimicking of *in vivo* conditions in *in vitro* environment we are enabled to investigate dissolution profile of a depot formulation before *in vivo* studies. This method would be beneficial in a generic drug development or the enhancement of the formulation in a personalized medicine. For this purpose the development of HPLC method, parametric study of the suspension nano-milling and the sample preparation methodology were carried out.

Development and characterisation of tablets with controlled dissolution kinetics by FDM 3D printing

Bc. Adam Waněk (M1)

Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

FDM (fused deposition modeling) 3D printing is an innovative, fast-growing method of rapid prototyping where a solid object is formed by the printer according to a supplied 3D drawing. Its application can be found throughout many areas of industry, science or even medicine and pharmacy. Since recently, it is considered to be a possible alternative method for drug dosage form manufacturing. Current manufacturing methods operate with very large batches and usually the API (active pharmaceutical ingredient) dosage and shape of the tablets are set for the whole process. A popular new approach to medication and care (personalized medicine), where the whole treatment is tailored to a specific patient needs, requires new methods of drug dosage form manufacturing where only small batches will be produced, dosage of the API can easily be adjusted and dissolution kinetics of the API can be controlled. Goal of this work is to produce two types of biodegradable filaments (feed for 3D printer) with each of them containing one model API. Models of tablets will be designed to yield various dissolution profiles of each API. This will be achieved by changing inner porosity and outer surface area of tablets. Dissolution kinetics will be then measured by dissolution tests.

Design of Taylor reactor for continuous preparation of silica microparticles

Bc. David Zůza (M1)

Školitel: Ing. Ondřej Kašpar, Ph.D.

Taylor reactor (TR) is a batch reactor made from two concentric rotating cylinders separated by fluid (Fig. 1a). In real applications modification with steady external cylinder called Taylor-Couette reactor (TCR) is used. TCRs are in general employed for homogenous mixing of highly viscous mixtures such as substrates for enzymatic catalyzes, also for preparation of submicron particles (lower viscosity) or reactions, but their feasibility for microparticle synthesis still needs to be investigated. This work is based on findings previously reported in my bachelor thesis, where TCR for the preparation of silica particles was used (Fig. 1b). The goal of this work is an improvement of batch preparation of microparticles by means of continuous TCR and use of narrower shear rate distribution provided by TCR to decrease a polydispersity of produced particles. In pursuit of achieving this goal TCR was redesigned with the lower ratio between the height of reactor and gap between cylinders. Results of this work may contribute to continuous production particles with lower polydispersity compared to common batch-wise synthesis. Additionally, the mathematic model will be prepared to bring insight into nontrivial flow regimes typical for TCR and particle synthesis.

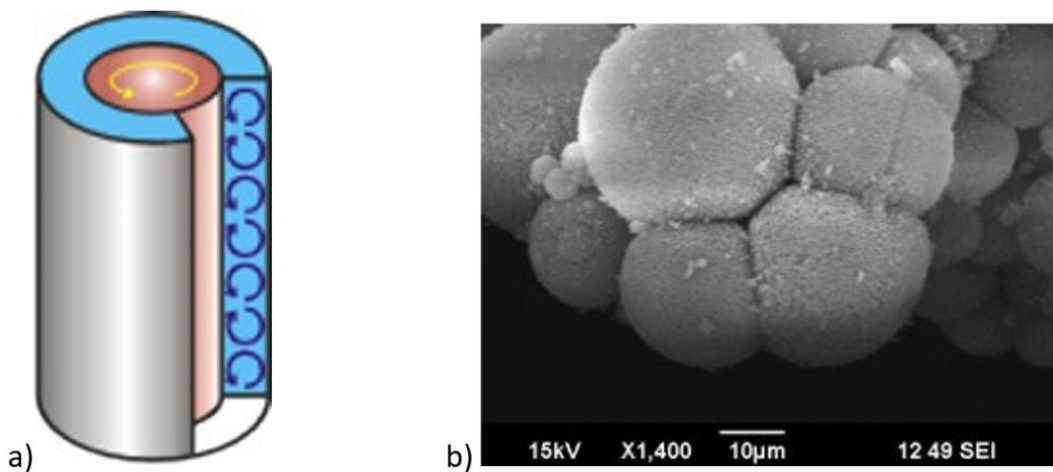


Fig. 1: a) Scheme of TR, b) SEM image of prepared silica particles.

Linking micro-scale and meso-scale models for catalytic filter

Bc. Martin Šourek (M1)

Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, 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. In order to accelerate the design process of catalytic filters, it is necessary to understand the relation between the device microstructure, e.g. the pore structure and coating distribution, and the full device performance (pressure drop, conversion and filtration efficiency). This study represents one part of a reliable multi-scale CFD model development for catalytic filters. A new boundary condition mapping was developed to transfer the flow data from a macro-scale model of the entire filter channel to a micro-scale simulation of the porous wall. In this way, a more realistic prediction of flow field in the wall microstructure was achieved, which provided improved estimates of the device filtration efficiency depending on the substrate and catalytic coating properties.

Chemical Engineering II

MÍSTO: B 141B

KOMISE

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

Ing. Mária Zedníková, Ph.D.

Ing. Matěj Novák

Ing. Jakub Mužík

Ing. Josef Beránek, Ph.D.

PROGRAM

08:00 **zahájení**

08:20 [Bc. Nasrin Bakhshiyeve](#) (M2, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

Incorporation of API in tablet coating using airbrush technique

08:40 [Samuel Frei](#) (B3, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

Design and development of stimuli-responsive magnetoliposomes

09:00 [David Gráf](#) (B3, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)

Optimalizace depozice nanočástic pomocí elektrostatických čoček

09:20 [Vojtěch Konderla](#) (B3, Ing. Petr Mazúr, Ph.D.)

Enhancement of graphite felt electrode for vanadium redox flow battery by in-cell graphene oxide electrodeposition

09:40 [Bc. Lucie Kopačková](#) (M1, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

Immunoliposomes: development and antibody coupling strategies

10:00 [Jakub Regner](#) (B3, Ing. Petr Mazúr, Ph.D.)

Effect of chemical structure of selected organic redox compounds on their electrochemical properties using rotation disk electrode

10:40 [Martin Krov](#) (B3, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.)

Dripping characterization from single needle

11:00 [Pavčina Michaláková](#) (B3, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

Interaction of surface-modified nanoparticles with tumor and immune cells

11:20 [Bc. Bager Baris Solgun](#) (M2, Ing. František Muzika, Ph.D.)

Influence of temperature and initial concentration of NaOH on pH dynamic behaviour of GOx-Ferricyanide-Glucose system in CSTR

11:40 [Barbora Tučková](#) (B3, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)

Co-swelling of PE in gas and liquid and its impact on morphology

12:00 [Pavel Zelenka](#) (B3, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

Construction and optimization of flow cell for particle separation and analysis

vyhlášení výsledků

Incorporation of API in tablet coating using airbrush technique

Bc. Nasrin Bakhshiyeva (M2)

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

Spray coating of tablets is an important operation in the pharmaceutical industry, since it is mainly used to product protection, better appearance or brand recognition. In some cases it can be used for modification of dissolution kinetics. Film coating of tablets is the application of a thin layer of coating material to modify the tablet properties. Materials for coating may include various substances, such as natural or synthetic resins, gums, sugar, plasticizer and colorant and sometimes flavoring material. Addition of Active Pharmaceutical Ingredient (API) to film coating process is presented in this work. This method can enhance solubility of hydrophobic API, or it can create complex multilayer tablet with more than one API. For this purposes, the airbrush technique was utilized to spray solution of the coating agent together with API onto glass samples. The objective of this study is an investigation of incorporation of API into the tablet coating by utilization of airbrush technique. Polyvinylpyrrolidone along with fluorescein as model API was applied as model coating agent. Layer distribution was examined on confocal laser scanning microscope, where pictures were taken. Determination of the average layer thickness was analysed by ImageJ software program.

Design and development of stimuli-responsive magnetoliposomes

Samuel Frei (B3)

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

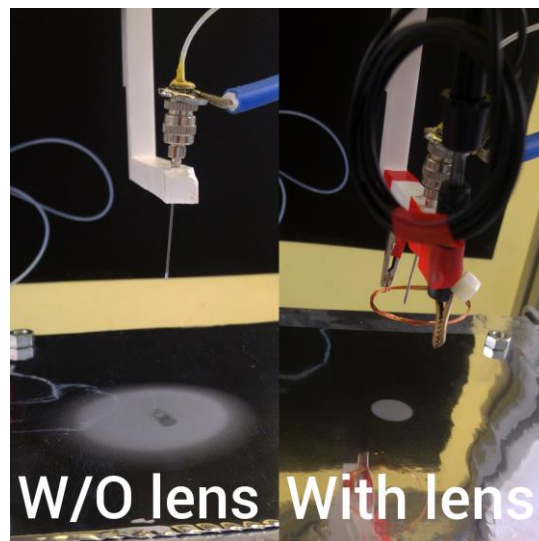
Over the last years, significant effort has been invested in research of so-called magnetoliposomes, which are a combination of liposomes and magnetic nanoparticles (NPs). While liposomes can be used as vesicles for drug delivery, incorporating magnetic NPs such as Fe_3O_4 can be used for targeted delivery as well as on-demand drug release using an alternating magnetic field. Based on a surface modification/stabilization of NPs, they can show hydrophilic or hydrophobic behavior. Also, different types of behavior between them and liposomes can be observed (e.g. aggregation). This work focuses on the usage of several types of Fe_3O_4 NPs (Dextran 40, sodium citrate and dipalmitoylphosphatidylcholine (DPPC) stabilizers) and multiple ways of magnetoliposomes preparation. Tests for the movement in the magnetic field and for the radiofrequency-triggered release of cargo were carried out with magnetoliposomes (400-500 nm) prepared with DPPC-stabilized Fe_3O_4 NPs loaded by 6-carboxyfluorescein.

Optimalizace depozice nanočástic pomocí elektrostatických čoček

David Gráf (B3)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Urged need of new, more effective technique of nano-sized particle production is growing in the scientific and industrial fields. One of the promising methods which can fulfill these requirements is electrospraying. Using this technique, we are able to control the droplet size, charge and frequency of their generation. Moreover, the produced particles are of a narrow particle size distribution, because the mechanism of deposition prevents the aggregation of particles. The deposition efficiency of charged spray on an object is much higher than for uncharged droplets, but the shape of the deposition cone is impractical for spraying on larger surfaces. The goal of this work is to investigate the influence of the electrostatic field on deposited particulate layers. To improve the deposition of particles and specifically, to control the geometry of deposition cone, we utilize electrostatic lenses attached to the electrospraying system. By comparing behaviours of systems with and without the lenses, respectively, we showed that the presence of electrostatic lenses significantly improves the resulting layer quality. We further present a broad parametric study of the layer quality dependence on the electrostatic lenses that may be useful both for the scientific community and industry.



Enhancement of graphite felt electrode for vanadium redox flow battery by in-cell graphene oxide electrodeposition

Vojtěch Konderla (B3)

Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Energy efficiency of vanadium redox flow batteries can be significantly improved by enhancement of catalytic properties of graphite felt electrode, e.g., by its heating, etching or by deposition of electrocatalytic nanoparticles. In this study, graphene oxide (GO) is electrodeposited on the positive battery electrode in order to create more active sites in the felt where the reaction between VO^{2+} and VO_2^+ can occur. We investigated the effect of various deposition conditions on the performance of the electrode in the battery single-cell. The electrochemical impedance spectroscopy, load curve measurements and charge-discharge cycling of the battery revealed significant improvement of felt conductivity and catalytic activity due to GO deposition. Subsequently, the homogeneity of the deposited GO was observed by scanning electron microscopy and the changes in the specific surface area were evaluated from nitrogen physisorption based on Brunauer–Emmett–Teller theory.

Immunoliposomes: development and antibody coupling strategies

Bc. Lucie Kopačková (M1)

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

Immunoliposomes are promising in field of drug delivery systems, offering targeting and increased therapeutic index of anti-cancer drugs. They consist of two main parts: 1) antibody or antibody fragments, that provide active targeting to the tumor site; 2) liposomes, accumulating, stabilizing and protecting the drug against the degradation. Many liposomal products are on the market (e.g. liposomal doxorubicin). Nevertheless, only few immunoliposomal formulations reached clinical trials. The Fab' fragments of IgG M75 antibody (specific for Carbonic Anhydrase IX, overexpressed on colorectal carcinoma, e.g. HT-29 cell line) were prepared, reduced and conjugated to PEGylated liposomes via maleimide group. ELISA- like test, polyacrylamide gel electrophoresis (PAGE) and size-exclusion chromatography (SEC) have been carried out to optimize the fragment generation protocol. Immunoliposomes with prepared antibody fragments were characterized by dynamic light scattering and ELISA-like test. Immunoliposomes' ability of binding the target cells will be studied in vitro using HT-29 cell line.

Effect of chemical structure of selected organic redox compounds on their electrochemical properties using rotation disk electrode

Jakub Regner (B3)

Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

The intermittency of photovoltaics and wind electricity source is the main technical obstacle for the distribution grid. Redox flow battery (RFB) is a technology for the compensation of fluctuations between the generation and consumption of the electricity. In this system the energy is stored in liquid electrolytes which are circulated through the battery stack. Vanadium RFB is currently the most technologically mature system, but high cost and low abundance of vanadium motivate for research of alternative redox compounds. Organic redox compounds can provide more-electron redox reaction and appropriate properties as an active material. In this work we study the electrochemical reversibility and transport properties of selected quinone derivatives on glassy carbon rotating disk electrode. The diffusion coefficient and reaction rate constant was evaluated from polarization curves under different electrode rotation rates using Koutecky-Levich equation. The effect of number of substituents and its position on quinone molecule in acidic electrolyte is systematically investigated.

Dripping characterization from single needle

Martin Krov (B3)

Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Dripping and jetting provides a simple way of creating spherical drops that could be used for fabrication of liquid marbles, however a uniform diameter the drops is required. The goal of this study was to investigate the effect of process parameters (temperature, the speed of the linear pump, diameter and length of the needle) on droplet size. The most desired size were 1.5 mm monodisperse ones. Needles of different length and diameter connected to a linear pump were used for creating a droplet. Two hollow aluminum blocks were used as liquid reservoirs. The first one was equipped with a standard plastic syringe, while in the second one the liquid was squeezed out directly from the block by using a piston. Images of the drops were captured with a high-speed camera and consequently, software FIJI was used for image analysis to determine the size of the droplets. It was found that jetting regime is either unstable or far too sensitive to slight fluctuations in the parameters of the liquid, which results in large variation in droplet sizes. Drops produced by dripping regime were larger than intended (1.8 mm). However, dripping showed a remarkable consistency of drop size, making it a useful method for creating liquid marbles with precise control of diameter.

Interaction of surface-modified nanoparticles with tumor and immune cells

Pavlína Michaláková (B3)

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

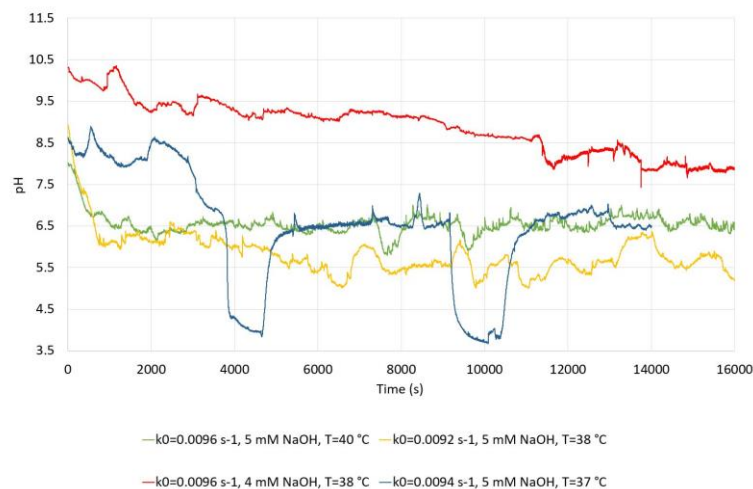
Cancer is one of the world's biggest health problems and one of the leading causes of death. The methods commonly used for the cancer treatment have many side effects and are non-effective for many patients. These problems could be solved by using chemical robots –nanoparticle based carrier systems able to specifically deliver the encapsulated drug to the tumor, which would minimize the side effects and maximize the treatment efficiency. However, most of the intravenously administered nanoparticles are recognized by the immune system and are removed from the bloodstream by macrophage phagocytosis. The presented work is based on the results of *in vivo* study (Lizoňová et al., 2018) and explores the interaction of antibody-modified “stealth” nanoparticles with the target tumor cells (HT-29 cell line) and with macrophages (J774.A1 cell line). The main aim of the work is to optimize the nanoparticle dosage leading to preferential adhesion to the tumor cells, while avoiding the macrophages. Prepared nanoparticles were characterized by Dynamic Light Scattering (160 nm), ELISA-like test and the experiments with the cell lines were evaluated via fluorescent microscopy.

Influence of temperature and initial concentration of NaOH on pH dynamic behaviour of GOx-Ferricyanide-Glucose system in CSTR

Bc. Bager Baris Solgun (M2)

Školitel: Ing. František Muzika, Ph.D.

Glucose oxidase (EC 1.1.3.4, from *Aspergillus Niger*) catalyzes the oxidation of β -D-glucose δ -lactone in the presence of a variety of oxidizing substrates, including molecular oxygen (O_2) and many one and two electron acceptors [1]. $K_3[Fe(CN)_6]$ is used as electron acceptor in this work. Glucose oxidase (GOx) is widely used for the determination of dissolved glucose in body fluids (diagnostics) or in nanotube biofuel cells [2]. In the experiment there were 4 stock solutions, namely NaOH, $K_3[Fe(CN)_6]$ (936mM), GOx (58.972U/ml) and glucose (48mM). The initial concentration of NaOH is adjusted in each experiment to see the effect on the reaction. The pH is measured using pH meter HI 5222-2. The temperature of stock solutions is maintained using dry thermostat WiseTherm HB-R and to the heater/stirrer Wids MSH-20D beneath the CSTR. The experiments with pH oscillatory behaviour is shown in the graph. The largest pH oscillation measured in my experiment with more than 2 pH units is show as blue curve. [1] Vladimir K. Vanag, David G. Míguez, and Irving R. Epstein, The Journal of Chemical Physics 125, 194515 (2006)[2] Ágnes Ch., Reuillard B., Le Goff A., Holzinger M. and Cosnier S., Electrochemistry Communications 34, 105-108, (2013).



Co-swelling of PE in gas and liquid and its impact on morphology

Barbora Tučková (B3)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Polyolefins, namely polyethylene (PE) and polypropylene (PP), are the largest class of commodity thermoplastics. Their easy processability and low price make them the most widely produced and used synthetic polymers. Polyolefins are semi-crystalline materials, i.e., they consist of amorphous and crystalline phase. Only amorphous phase changes its volume during the swelling, whereas the crystalline part remains the same. In this work, we investigate the swelling of PE in a mixture of liquid and gaseous hydrocarbons (e.g., liquid n-hexane and gaseous ethylene), particularly we measure the effect of gas (ethylene) pressure on the swelling. These thermodynamic data are not only scientifically interesting, but are applicable as input data for the process optimization. The second part of this work focuses on morphology changes of PE before and after swelling by liquid penetrant. For this purpose, we use Atomic force microscope (AFM) of samples prepared for scanning by cryo-ultramicrotomy. Extensive swelling causes irreversible changes in semi-crystalline morphology due to deformations of both crystalline and amorphous domains. Our swelling and morphology measurements are compared to available theories.

Construction and optimization of flow cell for particle separation and analysis

Pavel Zelenka (B3)

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

The behaviour of pharmaceutical tablets in aqueous media is an important part of the drug design. The dissolution of an active ingredient is greatly influenced by the process of tablet disintegration and can affect crucial parameters of the treatment. Therefore, it is necessary to understand the dynamics of both processes. In previous work, many widely used methods were examined to characterize these processes but none of them could provide results comprehensive enough. The presented work deals with the design of the new method for disintegration residua size distribution measurement and separation based on the combination of hydrodynamic fractionation and image processing in public domain program ImageJ. The method utilizes differences of the sedimentation rates between particles of different sizes. A flow cell was designed, in which the flow rate of a fluid medium is linearly dependant on the z-axis coordinate. In this environment, the point of equilibrium exists for each particle between the flow rate of the medium and the sedimentation rate of said particle. This work focuses on proving the concept viable using model spherical glass particles and comparing the particle size distribution measured by this method with particle characteristics from other conventional methods.

Chemické inženýrství 1

MÍSTO: BS 9

KOMISE

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

Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Ing. Lenka Krajáková

Ing. Vojtěch Šálek

Ing. Oldřich Pešek, Ph.D.

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:40 [Bc. Jakub Klimošek](#) (M1, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)

Experimental diffusion study in polyolefins and comparison to free volume theory

09:00 [Tomáš David](#) (B3, Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.)

Predikce reologických vlastností stéricky stabilizovaných koloidních systémů

09:20 [Tomáš Hlavatý](#) (B2, Ing. Martin Isoz)

Vylepšení meso-scale modelů katalytických filtrů zohledněním zakřivení kanálku monolitu

09:40 [Bc. Jakub Kovačovič](#) (M2, doc. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.)

Preparation of PANI-based adsorbents for CO₂ capture

10:20 [Bc. Vladimír Němec](#) (M1, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

Vliv procesních a formulačních parametrů na mechanické vlastnosti granulí připravených vysokosmykou granulací

10:40 [Bc. et Bc. Jan Němec](#) (M2, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Analýza tlakových ztrát v automobilových filtrech pevných částic

11:00 [Bc. Matěj Černý](#) (M2, Ing. Viola Tokárová, Ph.D.)

Replikace nanostruktury povrchu křídla vážky do polymerní matrice

vyhlášení výsledků

Experimental diffusion study in polyolefins and comparison to free volume theory

Bc. Jakub Klimošek (M1)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

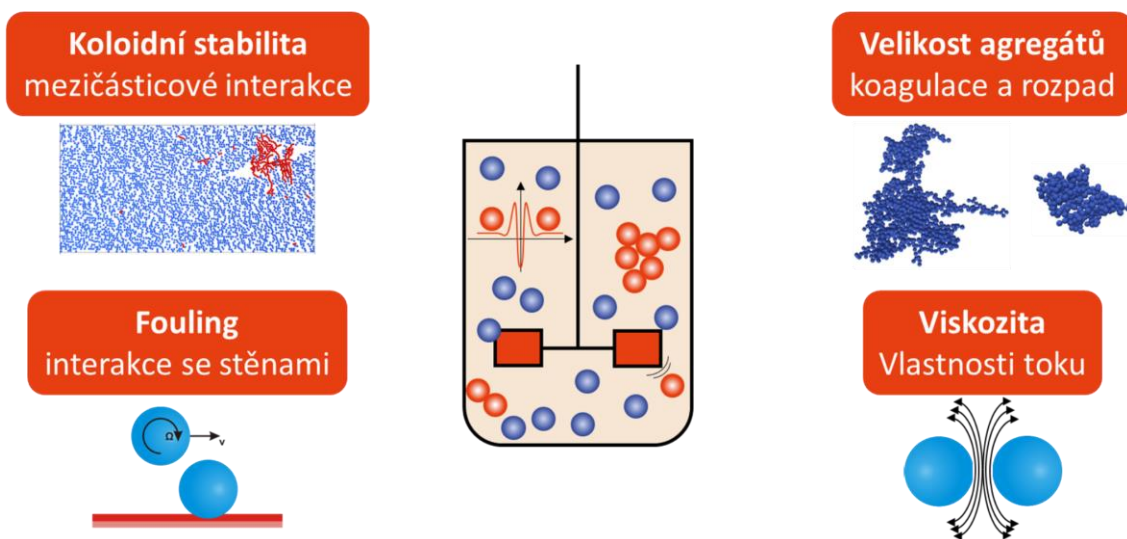
The information about monomer(s) and/or penetrant(s) transfer in polyolefins is essential for the optimization of polymerization and down-stream processes on the industrial scale. Diffusion measurements provide us with degassing characteristic of produced raw polymer or with the information about monomer transfer to catalyst sites in growing particles. The aim of this study is the systematic measurement of diffusion in polyethylene in dependence on sample crystallinity, temperature and penetrant type. For this purpose we improved the pressure decay apparatus capable to obtain diffusivity of gaseous penetrants in polyolefins. In this apparatus, pressure evolves due to the dynamics of sorption/desorption of penetrant(s) in the sample. During last year, the automated pressure decay apparatus was developed in line with industry 4.0 efforts. Thanks to the automated measuring process we were able to extend our database of diffusion data, which nowadays includes large range of polyolefin samples, penetrants and pressures. The theoretical part discusses the usage of a free volume theory to diffusion processes. This theory provides a useful comparison to the experimental diffusion data and allows to predict the diffusion of different penetrants in polyolefin samples.

Predikce reologických vlastností stéricky stabilizovaných koloidních systémů

Tomáš David (B3)

Školitel: Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.

Koloidní disperze jsou velmi důležitou součástí mnoha průmyslových odvětví. Jejich uplatnění nalezneme například v oblasti nátěrových hmot a barviv, kde umožňují snížit množství ekologicky problematických organických rozpouštědel. Při jejich výrobě a zpracování se však často setkáváme s problémem koagulace dispergovaných částic. Vzniklé agregáty výrazně ovlivňují vlastnosti disperze, v krajních případech může dojít až k nežádoucí koagulaci celého systému. Abychom porozuměli příčinám koagulace disperzí, je třeba studovat podmínky jejich stability. Pro stabilizaci disperzí se využívají surfaktanty buď ionogenní (elektrostatická stabilizace) nebo neionogenní (stérická stabilizace). Uspokojivá predikce rheologického chování stéricky stabilizovaných disperzí zůstává otevřeným problémem, který jsme se rozhodli řešit tzv. metodou diskrétních elementů, v níž je chování koloidních částic určeno silami na ně působícími. V modelu jsou zahrnuty mezičásticové interakce: nekontaktní Van der Waalsovy síly a nově implementované síly stérické repulze v kombinaci s kontaktní JKR teorií. Důležitou součástí modelu pak představuje také vzájemná interakce částic a tokového pole. Predikované rheologické charakteristiky polymerních disperzí jsou srovnány s experimentálními daty převzatými z literatury.



Vylepšení meso-scale modelů katalytických filtrů zohledněním zakřivení kanálku monolitu

Tomáš Hlavatý (B2)

Školitel: Ing. Martin Isoz

Zpracování výfukových plynů v automobilech je v současnosti zajišťováno filtry pevných částic a katalyzátory pro snížení obsahu plynných znečišťujících látek. Donedávna musely obsahovat filtry pevných částic pouze automobily se vznětovými motory, ale normou EURO 6c platnou od roku 2017 byla tato povinnost rozšířena i na zážehové motory. Vzhledem k technologické podobnosti obou zařízení se zdá být přirozené zkombinovat je do jedné součástky, katalytického filtru. Pro dosažení vhodné provozní charakteristiky katalytického filtru je nutné optimalizovat distribuci katalyzátoru na filtru za účelem minimalizace tlakové ztráty a maximalizace účinnosti zařízení. Tato práce je součástí více-škálového modelování katalytických filtrů. Vstupním parametrem výpočtů je permeabilita stěny kanálku katalytického filtru získaná z CFD modelu proudění mikrostrukturou stěny. Permeabilita stěny je použita pro výpočet proudění v reprezentativní jednotce katalytického filtru, z čehož je možné odhadnout tlakovou ztrátu celého zařízení. Cílem práce bylo zpřesnit geometrii existujícího modelu. Uvažováním zahnutí stěn kanálku způsobeného přítomností katalytické vrstvy je dosaženo přesnějšího popisu proudění v zařízení a zjednodušení sdílení dat mezi makro- a mikroměřítkem vyvíjeného více-škálového modelu.

Preparation of PANI-based adsorbents for CO₂ capture

Bc. Jakub Kovačovič (M2)

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

Carbon dioxide emissions are believed to be a major contributor to global warming. As a result of that, large anthropogenic CO₂ sources such as burning fossil fuels or industrial production will be required to implement carbon capture and storage technologies to control CO₂ emissions. Very important part of this technology is to efficiently capture the CO₂. In this work, we report about preparation of monolithic form of porous sorbents for CO₂ capture. To form porous material with suitable porosity, pore size distribution and appropriate surface groups to maximize the sorption of CO₂, we used polymerization of aniline in the presence of two fillers, polystyrene nanoparticles and expanded graphite. Prepared material was consequently carbonized and KOH activated to convert polyaniline into highly porous active carbon. Presented study will be focused on the impact of polymerization conditions, ratio of filler to polyaniline and KOH activation conditions on the basic properties of porous material, i.e. porosity, specific surface area and pore size distribution. Obtained results will be latter on used to optimize the production process of PANI-based adsorbents.

Vliv procesních a formulačních parametrů na mechanické vlastnosti granulí připravených vysokosmykou granulací

Bc. Vladimír Němec (M1)

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

Vysoko-smyká granulace představuje významnou jednotkovou operaci ve farmaceutickém průmyslu. Účinné látky (API) jsou velmi často hydrofobního charakteru, zatímco ostatní excipienty jsou spíše hydrofilní, navržení optimálního granulačního procesu spolu s vytvořením ideální formulace je kritickým faktorem pro úspěšnou vysoko smykou granulaci. Tato práce se zabývá optimalizací granulačního procesu pro ternární směs ibuprofen (aktivní látka) - laktóza (plnivo) - předželovaný škrob (pojivo) byla použita jako modelová formulace. Byly sledovány základní vlastnosti granulí jako sypná hustota a distribuci velikosti granulí s fokusem na množství přegranulovaného produktu v závislosti na množství pojiva ve vsádce (vyjádřeno pomocí poměru přidané vody k pevné látce L/S). Vliv granulačních parametrů (L/S; množství pojiva) byl dále vyhodnocován pomocí měření mechanických vlastností a disolučního chování, tedy vlastností, které hrají významnou roli pro další zpracování a uvolňování účinné látky z konečného produktu – tablet.

Analýza tlakových ztrát v automobilových filtrech pevných částic

Bc. et Bc. Jan Němec (M2)

Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Výfukové plyny obsahují mikroskopické částice sazí, na jejichž povrchu mohou být adsorbovány další škodlivé látky. Množství pevných částic ve výfukových plynech je proto regulováno emisními normami. Filtry pevných částic jsou dnes nepostradatelnou součástí všech automobilů s dieselovými motory a nově jsou řazeny také za benzinové motory. Toto zařízení však představuje překážku ve výfukovém potrubí, která způsobuje tlakovou ztrátu a snižuje účinnost motoru. V případě moderních katalytických filtrů pevných částic, které mají uvnitř porézní struktury nanesen katalyzátor, je nutné nalézt kompromis mezi nízkou tlakovou ztrátou, vysokou filtrační účinností a katalytickou aktivitou. Celková tlaková ztráta se skládá z několika příspěvků: Jedná se především o kontrakci/expanzi plynu na začátku/konci filtru, jeho proudění kanálkem a průchod skrz porézní stěnu. V této práci je diskutován vliv umístění katalyzátorů na stěnu filtru. V nově vyvinutém reaktoru byla naměřena tlaková ztráta pro několik filtrů s různě nanesenou katalytickou vrstvou. Velikost tlakové ztráty byla také určena pomocí matematického modelu, jehož výsledky byly porovnány s naměřenými hodnotami.

Replikace nanostruktury povrchu křídla vážky do polymerní matrice

Bc. Matěj Černý (M2)

Školitel: Ing. Viola Tokárová, Ph.D.

Dragonfly wings show spectacular antibacterial property thanks to a hierarchical topography. The surface of the wings consists of the high aspect ratio nanopillars as tall as 200 nanometers. When a bacterial cell comes into contact with the wing structure the mechanical stress between pillars and the cell wall causes its rupture and cell lysis. This theory implies the antibacterial effect is solely a result of the topography with no or negligible effect of the chemical nature of the structure. This work is focused on creating an artificial surface with the same topography as it is found in domestic dragonflies and damselflies (Fig. 1). In the first step, the topography of various wings was observed and analysed using a scanning electron microscope (SEM) and compared with the antibacterial structures described in the literature. Next, a negative stamp from the biological templates was made by a soft lithography method using polydimethylsiloxane (PDMS). The surface of the PDMS with replicated structures was again analysed using SEM microscope and will be used in further experiments for the preparation of positive replica. Finally, surface properties as wettability, contact angle and antibacterial effect along with resistance to bio-fouling will be examined.

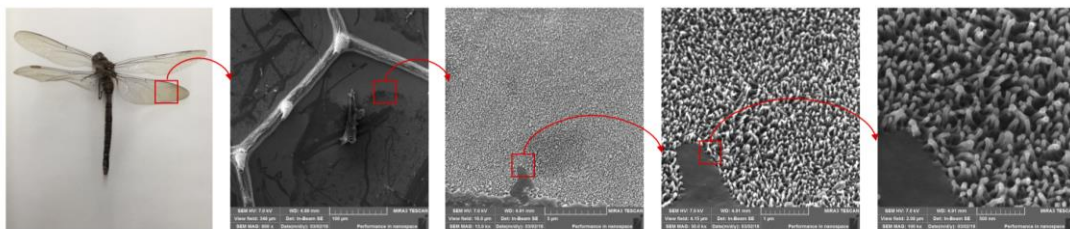


Fig. 1: Migrant hawkler – wing structure

Chemické inženýrství 2

MÍSTO: BS 4

KOMISE

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

Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.

Ing. Vít Zvoníček

Ing. Jindřich Mrlík

Ing. Václav Babuka

Ing. Jakub Šiška, Ph.D.

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:40 [Bc. Patrik Bouřa](#) (M1, Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.)

Příprava a charakterizace biopolymerních mikrocelulárních pěn

09:00 [Radek Chmelař](#) (B3, Ing. Jitka Čejková, Ph.D.)

Využití neuronových sítí pro popis chování kapek dekanolu v roztoku dekanoátu

09:20 [Bc. Wilhelm Feigl](#) (M2, Ing. Jan Haidl, Ph.D.)

Možnosti optimalizace ejektoru pro použití při zpracování odplynů

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

Polymorphism of active pharmaceutical ingredients

10:20 [Bc. Lenka Kolářová](#) (M1, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)

Plastic waste treatment by the means of electrification

10:40 [Bc. Martina Kukrálová](#) (M2, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)

Experimentální studie PE pomocí DSC

11:00 [Bc. Ondřej Libánský](#) (M2, Ing. Jaromír Pociď, Ph.D.)

Studium dějů probíhajících v zinko-vzduchovém palivovém článku

11:20 [Bc. Karel Mařík](#) (M2, prof. Ing. Michal Přibyl, Ph.D.)

Matematický model syntézy cefalexinu

11:40 [Bc. Michaela Mikešová](#) (M1, Ing. Petr Mazúr, Ph.D.)

*Stanovení koncentrace a oxidačního stavu vanadových iontů v elektrolytu
používaném ve VRPB*

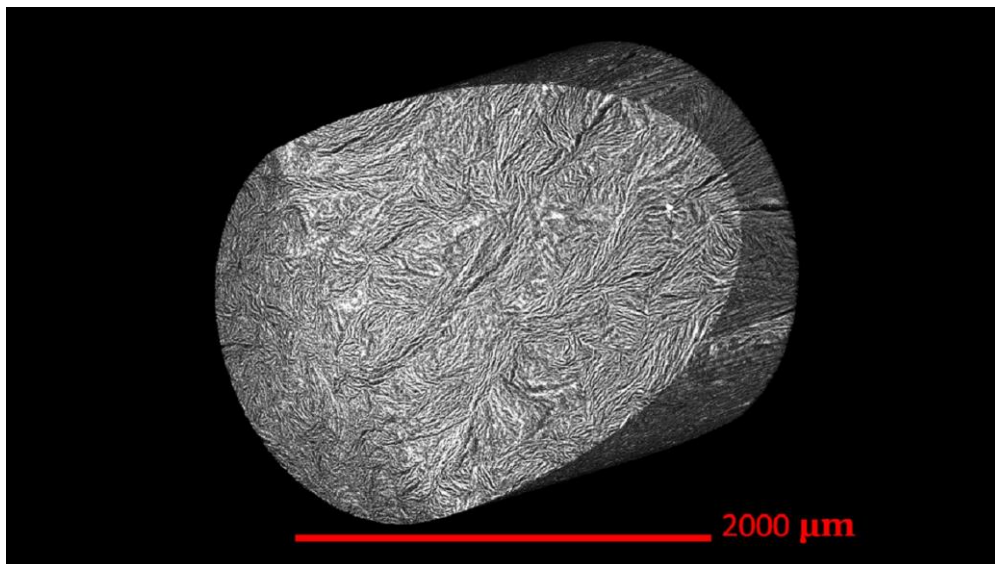
vyhlášení výsledků

Příprava a charakterizace biopolymerních mikrocelulárních pěn

Bc. Patrik Bouřa (M1)

Školitel: Ing. Alexandr Zubov, Ph.D.

V posledních letech je vzhledem ke zvyšujícímu se znečištění životního prostředí plasty vyvíjen čím dál větší tlak na řešení situace. V tomto ohledu mají potenciál biodegradabilní plasty nahradit stávající. Příkladem může být polymléčná kyselina (PLA), která je nejen biologicky odbouratelná, ale navíc je vyráběna z obnovitelných zdrojů. Mimoto je PLA jako jeden z mála biopolymerů schválena k aplikaci v medicíně. Současným trendem výroby materiálů je také snaha o snížení spotřeby výchozích surovin a úsporu energie. Tyto možnosti nabízí vypěněné polymery, které jsou využívány např. jako izolanty, separační membrány, ke kultivaci tkání nebo kvůli svým výborným mechanickým vlastnostem (vzhledem k jejich hustotě). V této práci jsem se zabýval přípravou a charakterizací mikrocelulárních polymerních pěn, které mohou vykazovat mnohem lepší vlastnosti než běžné polymerní pěny. PLA rozpouštěná v kyselině octové byla vypěněna netradiční metodou spinodální dekompozice. Je to poprvé, kdy byla PLA vypěněna za použití kyseliny octové, která je díky své velmi nízké toxicitě zajímavou, ekonomicky přívětivou alternativou k toxickým rozpouštědlům. Nedílnou součástí této práce byl také návrh a úspěšná implementace kontinuálního chlazení u vypěňovací aparatury, a to za použití 3D tiskárny.



Využití neuronových sítí pro popis chování kapek dekanolu v roztoku dekanoátu

Radek Chmelař (B3)

Školitel: Ing. Jitka Čejková, Ph.D.

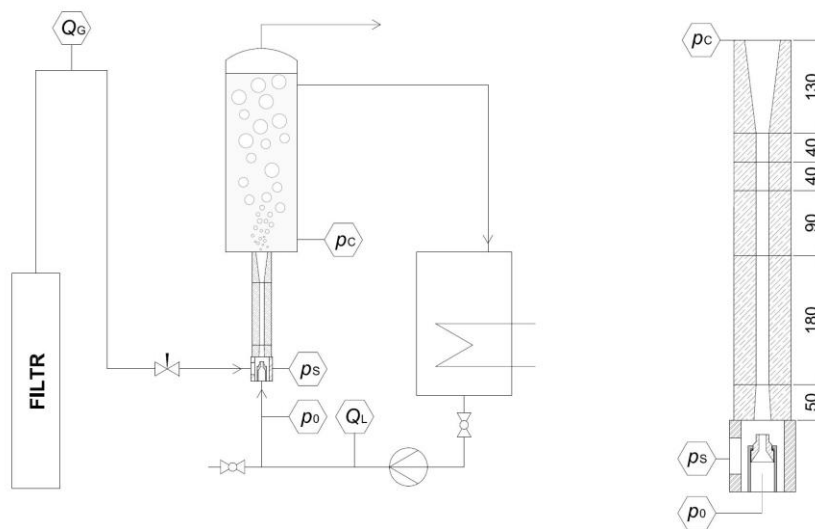
Tato práce se zabývá možností využití strojového učení, konkrétně neuronových sítí, pro popis chování systému tvořeného z kapek dekanolu v roztoku dekanoátu sodného. Cílem je zjistit, jestli je možné využít neuronovou síť pro popis takového systému. Z pokusů, kde budou kapky dekanolu umístěny na roztok dekanoátu sodného, získáme snímáním kamerou obrázky, ze kterých obrazovou analýzou získáme souřadnice kapek. Teplotu, koncentraci roztoku, čas od začátku pokusu a objem kapek známe. Tato data předáme jako vstup neuronové síti. Neuronová síť bude mít za úkol naučit se odhadovat, kde budou kapky v následujícím snímku. Cílem učení je minimalizovat rozdíl hodnot navržených neuronovou sítí od hodnot skutečných. Naučená síť může být použita pro odhad chování kapek pro ještě nevyzkoušené podmínky a bude možné získat závislost rychlosti, celkové uražené vzdálenosti, nejčastější relativní uspořádání případně nějaké další specifické chování, na teplotě, koncentraci, velikosti kapek, času od začátku pokusu a podobně.

Možnosti optimalizace ejektoru pro použití při zpracování odplynů

Bc. Wilhelm Feigl (M2)

Školitel: Ing. Jan Haidl, Ph.D.

Velké množství chemických procesů je založeno na interakci fází v soustavě kapalina-plyn. Konkrétní požadavky kladené na danou interakci rozhodují o vhodné podobě průmyslové aparatury. Pro aplikace, kde je žádána velká mezifázová plocha kapalina-plyn, či intenzivní mezifázové sdílení hmoty (mechanické i chemické čištění plynů, sycení kapalin, rychlé heterogenní chemické reakce) se vedle konvenčních aparátů stává rentabilní užívání ejektorového čerpadla, jehož hlavní přednosti spočívají v nízkých pořizovacích nákladech, jednoduchém a elegantním designu a absenci pohyblivých součástí ve styku s plynem, znamenající vyšší spolehlivost a menší náročnost na údržbu. Limitujícím faktorem v používání ejektoru jsou vysoké energetické nároky pro většinu aplikací. V této práci budou představeny některé modifikace ejektoru, umožňující vyšší efektivitu při užití ejektoru při aplikacích jako je čištění odplynů, kde hlavním kritériem optimality je celkové zpracované množství plynu vztažené na jednotku dodané energie. Kromě v současné době již známých modifikací, spočívajících v zařazení rotačního elementu před trysku, byl experimentálně studován také vliv dosud nezkoumaných variant, jako je destabilizace paprsku vody prostřednictvím expanze inertního plynu či smykovým třením o povrch trysky.



Polymorphism of active pharmaceutical ingredients

Jan Kejzlar (B3)

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

Liquid assisted grinding is becoming very popular nowadays, due to many advantages such as little amount of solvent and we can obtain new forms, not accessible with other solvent related methods. Purpose of this work is to obtain different polymorphs of API (active pharmaceutical ingredient) and observe factors that may have influence of polymorph forming, such as frequency and time of milling and amount of used solvent.

Plastic waste treatment by the means of electrification

Bc. Lenka Kolářová (M1)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Plastic products are vastly present for example in packaging, electronics, automotive industry and constructions. Consequent plastic waste is treated by incineration or recycling. However, both of the treatments require pre-separation of plastics, which is still a challenging problem. Current methods like manual separation, flotation or methods based on density differences aren't sufficiently effective. The new promising method, triboelectric separation, originates in the idea that every plastic reaches different electrostatic charge and therefore plastic mixtures can be separated in electric field. In this work, we determined the key parameters affecting tribocharging (charging by friction) of common plastics (PP, PS, PET, PVC), and then examined the electrostatic separation. Charging the plastics using self-designed rotational tribocharger showed that the charging dynamics fastens with increasing rotational frequency and the saturation charge is proportional to applied mechanical pressure. We also observed that corona surface treatment significantly fastened following tribocharging. We further compared rotational tribocharging with vibrational one, as rotational tribocharging is well defined; however, vibrational one simulates better the desired industrial application.

Experimentální studie PE pomocí DSC

Bc. Martina Kukrálová (M2)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

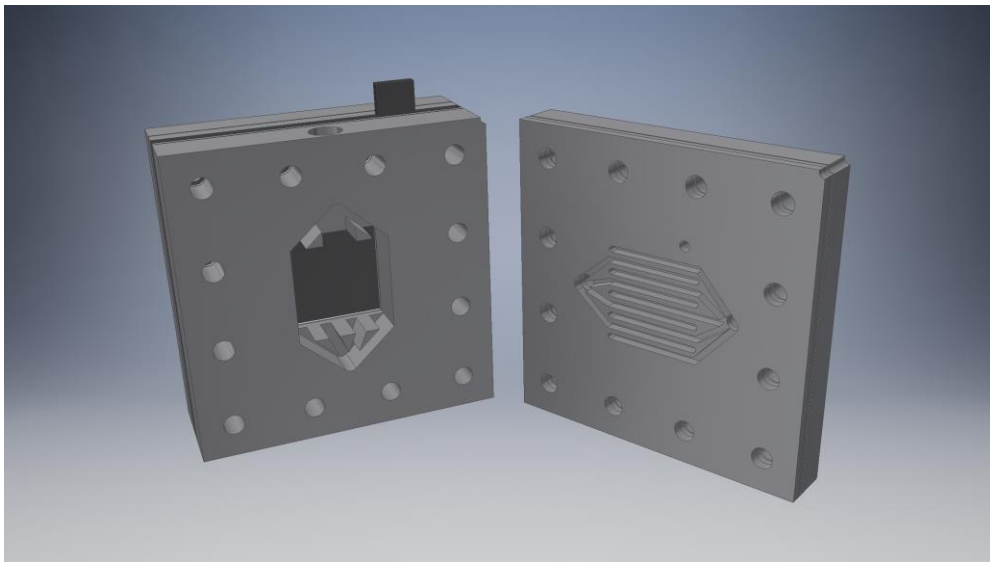
Polyethylen (PE) patří mezi plasty se širokou škálou použití. Jeho vlastnosti se pro průmyslové využití neustále vylepšují. Mechanické vlastnosti a chemickou odolnost polymeru ovlivňuje podíl krystalické fáze. Právě podíl krystalické fáze, tzv. krystalinita, a dynamický vývoj krystalinity během srovnání byly pomocí diferenční skenovací kalorimetrie (DSC) studovány. Jedná se o experimentální metodu, při níž se zkoumají tepelné vlastnosti materiálu. Zahříváním materiálu dochází k fázovým přeměnám, které je možno mimo jiné detekovat a určovat teplotu a entalpii fázových přechodů. V této práci byla určena teplota a entalpie tání PE a z těchto hodnot byla následně vypočítána krystalinita jednotlivých vzorků. DSC se obecně považuje za jednoduchou a univerzální metodu s lehce interpretovatelnými výsledky. Tento předpoklad platí pouze u nízkomolekulárních látek a kovů. Při měření vysokomolekulárních látek jako je PE je nutné řešit řadu výzev (určení začátku fázových přechodů, šířka fázového přechodu, nehomogenita polymerních vzorků). Úpravou měřících postupů na DSC aparatuře jsme dokázali úspěšně pozorovat vliv sorpčních procesů ve vzorcích PE. Tyto výsledky rozšiřují poznatky v oblasti difúzních procesů v polymerních systémech.

Studium dějů probíhajících v zinko-vzduchovém palivovém článku

Bc. Ondřej Libánský (M2)

Školitel: Ing. Jaromír Pocedič, Ph.D.

Integrace obnovitelných zdrojů energie do elektrické sítě je celosvětově na vzestupu a nejenak tomu bude i v blízké budoucnosti. Chceme-li však plně přejít na tyto zdroje, nevyhneme se potřebě sezónního ukládání elektrické energie. V současnosti hojně propagované lithiové baterie nejsou ekonomicky vhodnou technologií pro dlouhodobou akumulaci elektrické energie a vodíkové hospodářství čelí technologické překážce v podobě skladování vodíku. Jedním z perspektivních kandidátů může být „zinková energetika“ na bázi chemie zinek-vzduch, jež jako elektroaktivní látky využívá kovový zinek a vzdušný kyslík. Toto řešení vyniká vysokou hustotou energie, nízkou cenou a využitím materiálů, které jsou málo toxické a dobře recyklovatelné. Před masivním rozšířením tohoto konceptu je ovšem nutné ověřit jeho technologickou způsobilost. V rámci prezentované práce jsou studovány děje probíhající při provozu zinko-vzduchového palivového článku sloužícího k uvolnění uložené energie ze zinkového paliva. K tomuto účelu byl zkonstruován laboratorní palivový článek, jehož funkčnost byla testována za různých experimentálních podmínek. Získané výsledky umožňují porozumět principu fungování palivového článku, díky čemuž může být navrženo řešení s vyšší účinností konverze chemické energie na elektrickou.

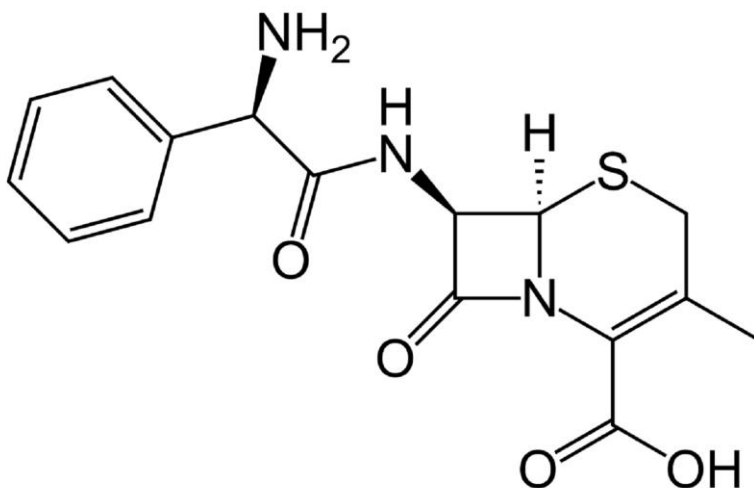


Matematický model syntézy cefalexinu

Bc. Karel Mařík (M2)

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

Cefalexin, beta-laktamové antibiotikum první generace cefalosporinů, patří k světově nejvíce předepisovaným léčivům. Specifické při jeho výrobě je, že enzymová syntéza cefalexinu je provázena následnou nežádoucí hydrolýzou produktu. Ta může být potlačena *in situ* odebíráním produktu, čímž se významně zvyšuje výtěžek reakce. Byly popsány různé způsoby zvýšení výtěžku cefalexinu, např. jeho *in situ* komplexací nebo snížením obsahu vody v reakčním médiu. Další možností je uskutečnění této syntézy v integrovaném mikrofluidním zařízení, kde zároveň probíhá separace produktu extrakcí s transportem zesíleným vloženým elektrickým polem. Aplikace mikrofluidních zařízení při syntéze látek s vysokou přidanou hodnotou představují slibnou alternativu v porovnání s klasickými vsádkovými reaktory, a to zvl. kvůli snížení transportních odporů, zajištění reprodukovatelných reakčních podmínek a možnosti vložení vnějších silových polí. Předmětem této práce je vytvoření matematického modelu vsádkové enzymové syntézy cefalexinu a identifikace hodnot kinetických parametrů pomocí experimentálně naměřených dat. Optimalizační procedurou byly nalezeny hodnoty rychlostních konstant. Sestavený model bude použit v další práci, která bude zaměřena na syntézu cefalexinu v průtočném mikroseparátoru-mikroreaktoru.



Stanovení koncentrace a oxidačního stavu vanadových iontů v elektrolytu používaném ve VRPB

Bc. Michaela Mikešová (M1)

Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Alternativní zdroje energie v podobě větrných elektráren a solárních panelů si v dnešní době upevňují svou pozici mezi klasickými zdroji energie, kterými jsou fosilní či jaderná paliva. Problémem alternativních zdrojů je však jejich oscilující výkon, který lze stabilizovat instalací stacionárních úložišť elektrické energie. Tím může být například vanadová redoxní průtočná baterie (VRPB), jejíž nespornou výhodou je obrovská variabilita, zejména nezávislá škálovatelnost výkonu a kapacity. Jednou z důležitých součástí této baterie je elektrolyt, který je tvořen vanadovými ionty rozpuštěnými v roztoku kyseliny sírové. Složení elektrolytu ovlivňuje důležité vlastnosti baterie jako je kapacita či energetické ztráty systému, tudíž přesná znalost koncentrace vanadových a síranových iontů v elektrolytu je nedílnou součástí vývoje technologie vanadových redoxních průtočných baterií. Tato práce se věnuje možnosti využití manganometrické titrace pro stanovení koncentrace a oxidačního stavu vanadových iontů v elektrolytu vanadové redoxní průtočné baterie a určení vlivů zkreslujících získané výsledky. Důvodem volby této kvantitativní analýzy je její nízká cena a snadná implementovatelnost pro vědecké i průmyslové použití.

Chemické inženýrství 3

MÍSTO: B 03

KOMISE

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

RNDr. Ivan Řehoř, Ph.D.

Ing. Anna Zítková

Ing. Simon Jantač

doc. Ing. Tomáš Weidlich, Ph.D.

Ing. Marek Doležel

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:40 [Bc. Miroslav Blažek](#) (M2, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Nanášení porézní katalytické vrstvy do automobilových katalyzátorů a filtrů pevných částic

09:00 [Lukáš Joukl](#) (B3, Ing. Petr Mazúr, Ph.D.)

Durability of homogenous and heterogenous ion-exchange membranes for vanadium redox flow batteries

09:20 [Bc. Martin Kalný](#) (M2, Ing. Zdeněk Grof, Ph.D.)

Microstructure based simulation of the disintegration and dissolution of pharmaceutical tablets

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

3D printing of orodispersible films

10:20 [Bc. Dominik Čapkovič](#) (M2, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Vliv velikosti částic $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ na vlastnosti katalytické vrstvy v automobilovém filtru

10:40 [Bc. Jan Mokrý](#) (M2, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

Využití exosomů jako nosičů pro cílené doručování léčiv

11:00 [Bc. Jana Sklenářová](#) (M2, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)

Nanášení antistatických nanovrstev metodou elektrosprejování

11:20 [Bc. Jakub Strnad](#) (M1, doc. Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.)

Chování homogenních iontově-výměnných membrán v elektrickém poli

11:40 [Adam Tylich](#) (B3, doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha)

Experimentální vývoj vodíkové sondy

vyhlášení výsledků

Nanášení porézní katalytické vrstvy do automobilových katalyzátorů a filtrů pevných částic

Bc. Miroslav Blažek (M2)

Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Ve spalovacích motorech vznikají výfukové plyny, které obsahují jak plynné, tak pevné složky. Ke konverzi zdraví škodlivých plynných látek se používají automobilové katalyzátory. Pevné částice jsou odstraňovány ve filtrech pevných částic. Automobilové katalyzátory jsou tvořeny nosičem (monolitem) z keramiky nebo kovu, který se skládá ze soustavy mnoha kanálků pokrytých tenkou porézní vrstvou katalyzátoru. Toto uspořádání umožňuje současně dosáhnout velkého povrchu katalyzátoru a nízké tlakové ztráty. Konverze škodlivin závisí na tloušťce a porozitě nanesené vrstvy. Filtry pevných částic jsou dnes nepostradatelnou součástí všech automobilů s dieselovými motory a nově jsou řazeny také za některé benzinové motory. V případě filtru jsou kanálky vždy na jedné straně zaslepeny, plyn proto musí projít přes porézní stěnu mezi kanálky. V moderních katalytických filtrech pevných částic je do vnitřní porézní struktury stěny nanesen katalyzátor – i zde je nutné kromě požadované filtrační účinnosti a konverze škodlivin zajistit co nejnížší tlakovou ztrátu filtru. Cílem prováděného výzkumu je tedy vylepšení postupu nanášení katalytické vrstvy do monolitu a filtru pevných částic namáčením (dip-coating) a dále návrh aparatury pro podtlakové nanášení katalytických vrstev do filtrů pevných částic.

Durability of homogenous and heterogenous ion-exchange membranes for vanadium redox flow batteries

Lukáš Joukl (B3)

Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Redox flow batteries are promising technology for electricity storage in large scale applications. However, the current high cost of redox flow batteries limits a wide spread of this technology. Membrane is a critical component of the battery as it determines its performance as well as the economic viability. It acts as a separator preventing mixing of the positive and negative electrolytes, while allowing the transport of ions to complete the electric circuit. An ideal membrane should be ionically conductivity, impermeability for electroactive species and chemically stable. The last aspect is studied within this contribution for various selected homogeneous and heterogeneous ion-exchange membranes. The ion-exchange capacities are measured for pristine membranes and after their exposure to oxidative environment of charged vanadium positive electrolyte. The causes of the degradation of membrane properties are investigated.

Microstructure based simulation of the disintegration and dissolution of pharmaceutical tablets

Bc. Martin Kalný (M2)

Školitel: Ing. Zdeněk Grof, Ph.D.

The design of pharmaceutical tablets relies on determination of the optimal formulation parameters that define the tablet shape, structure and composition. Since these parameters also affect the release rate of an active ingredient from it, their optimal values have to be found, so the dissolution curve follows a prescribed profile. However, in order to find their appropriate values, numerous experiments are required. This could be avoided by modelling the tablets disintegration and dissolution behaviour and determining the effects of the formulation parameters. Ultimately, a reliable simulation can be used to predict the dissolution curve and therefore to reduce the number of experiments required. In the present work, the disintegration and dissolution of a directly compressed tablet containing ibuprofen as an active ingredient and croscarmellose as a disintegrant was simulated. Firstly, the discrete element method (DEM) is used to simulate tablet fragmentation triggered by the swelling of the disintegrant. The effect of disintegrant amount and its spatial distribution inside the tablet on the resulting fragment size distribution was evaluated. The dissolution of the fragments was then separately simulated, and the computational simulation results were compared with experiments.

3D printing of orodispersible films

Bc. Veronika Lesáková (M2)

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

The 3D printing is a popular technology that planted its roots in a various fields of study including food technology and tissue engineering. It has promise for producing orodispersible drug forms for pharmaceutical industry. One of the 3D printing techniques is Fused deposition modeling (FDM) which builds on filaments that are produced by Hot-melt extrusion, technique which is already frequently used in the pharmaceutical technology. Extrusion applies heat and pressure to melt mixture of ingredients and force it out of a head in a form of a filament. The filaments for oral films are made of various ingredients which includes polymers, active pharmaceutical ingredient, disintegrants, flavours, colours, saliva stimulating agents, plasticizers and surfactants. Because of various excipients that also can be implemented as film formers, 3D printing method seems to be the most advantageous technique of producing orodispersible films. The porous structure of printed films leads to increased dissolution rate in comparison to casted films. The aim of this work is to print a rapid release orodispersible film by choosing suitable polymers, other excipients and printing design.

Vliv velikosti částic $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ na vlastnosti katalytické vrstvy v automobilovém filtru

Bc. Dominik Čapkovič (M2)

Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Spalovací motory produkují velké množství škodlivých plynů a pevných částic. K největšímu nárůstu automobilů došlo v sedmdesátých letech, což vedlo ke zhoršení ovzduší – začaly se vytvářet emisní normy a automobily musely být vybaveny katalytickými konvertory výfukových plynů. Řešením pro snížení množství pevných částic je použití filtrů pevných částic, jež se nově používají u benzínových motorů. Filtry pevných částic se skládají z velkého množství souběžných kanálků, které jsou vždy na jedné straně zaslepeny tak, aby plyn musel prostoupit přes porézní stěnu do sousedních kanálků. Stejně jako monolity tak i na filtry je nanesená katalytická vrstva suspenze obsahující $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ jako nosič. Tloušťka a umístění vrstvy má zásadní vliv na tlakovou ztrátu filtru. V této práci je použita metoda „dip-coating“ – nanášení namáčením. V suspenzi lze upravovat různé parametry (pH, velikost částic, viskozita), tak aby bylo dosaženo tenké a rovnoměrné vrstvy $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ na povrchu kanálků, případně uvnitř porézní stěny. Velikost částic $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ je jednou z klíčových vlastností suspenze – v této práci byly použity dvě suspenze s velikostí $d_{90} = 8,7$ a $20,5 \mu\text{m}$, které vykazovaly různé fyzikální vlastnosti. Vzorky byly profukovány různými tlaky a některé z nich byly před samotným nanášením ponořeny do vody.

Využití exosomů jako nosičů pro cílené doručování léčiv

Bc. Jan Mokrý (M2)

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

Tato práce se zabývá využitím exosomů – váčků uvolňovaných buňkami do okolního prostředí – izolovaných z kultivačních médií komerčně pěstovaných buněk a jejich následnou využitelností jako potenciálních součástí nosičů pro cílené doručování léčiv. Po nalezení konzistentního způsobu izolace exosomů se studuje schopnost enkapsulace barviva do těchto částic. Sledována je především účinnost enkapsulace, její časová stálost a schopnost uvolnění enkapsulované látky. Dalším z cílů je také připravit kompozitní částice či agregáty exosomů s laboratorně připravenými liposomy.

Nanášení antistatických nanovrstev metodou elektrosprejování

Bc. Jana Sklenářová (M2)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

As demands on energy increase, it is necessary to improve renewable technologies to obtain higher amount of safe and clean energy. One of the resources, solar energy, can potentially satisfy such demands. According to available data, if we covered only 4 % of deserts with solar panels, they could provide enough electricity for the entire mankind. However, the accumulation of sand particles hinders the efficiency of the solar panels by around 40 %. The panels cannot be efficiently cleaned by water, because water is more precious than electricity in desert areas and mechanical cleaning scratches the panels, which leads to permanent efficiency losses. We aim to find a solution to remove the dust from solar panels utilizing the combination of antistatic coating and electric field. Therefore, we examined the electrostatic charging of sand – glass systems to find the polarity of charge generated on sand particles due to the friction between the particles and solar panel surface made of glass. Afterwards, we applied the method of electrospraying in order to form antistatic nanolayers on glass surface that would be of the same polarity as the sand particles. This layer combined with voltage pulses may ensure repulsion of accumulated dust particles from the panel's surfaces.

Chování homogenních iontově-výměnných membrán v elektrickém poli

Bc. Jakub Strnad (M1)

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

Homogenní iontově-výměnné membrány se používají v elektrodialyzérech jako permselektivní médium zajišťující požadovanou separaci iontů v elektrickém poli. Při porovnání s heterogenními membránami, které obsahují značné množství iontově nevodivého materiálu, jsou homogenní membrány tvořeny pouze iontově selektivním materiálem a tedy obecně vykazují lepší separační vlastnosti ovšem často na úkor mechanické a chemické stability. Jedním z cílů našeho projektu je pochopit rozdíl v chování homogenní a heterogenní iontově-výměnné membrány v elektrickém poli. Tato práce se zaměřuje na pozorování dějů, které nastávají na diluátové straně membrány při měření voltampérové charakteristiky. Hlavní pozornost je věnována tzv. nadlimitní oblasti v níž dochází k tvorbě elektrokineticky řízených vírů popřípadě ke vzniku jiných jevů, např. štěpení vody. Provádění odsolování v elektrodialyzérech v nadlimitní oblasti je jednou z možností, jak intensifikovat daný proces. K vlastním experimentům byly využity homogenní aniontové i kationtové-výměnné membrány, jež byly integrovány do speciálně vyvinutého čipu umožňující elektrochemickou charakterizaci i pozorování procesů na membráně. Získané výsledky budou detailně popsány a diskutovány s ohledem na provozování elektrodialyzérů v nadlimitním režimu.

Experimentální vývoj vodíkové sondy

Adam Tylich (B3)

Školitel: doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha

V primárním okruhu jaderných elektráren se využívá demineralizovaná voda díky svým vhodným fyzikálně-chemickým vlastnostem, snadné dostupnosti a nízké ceně. Nevýhodou je její radiolytický rozklad a následná koroze zařízení. Kvůli zlepšení vlastností se do vody přidávají aditiva. Jedním z nejvýznamnějších je amoniak, jehož radiolytickým rozpadem přímo v primárním okruhu vzniká vodík. Ten zajišťuje v chladivu redukční podmínky a snižuje obsah kyslíku. Z bezpečnostních a ekonomických důvodů je vhodné sledovat koncentraci vodíku, která se pohybuje v jednotkách ppb. Použití většiny na trhu dostupných snímačů není vhodné vzhledem k jejich neselektivitě. Nabízí se myšlenka využívat k měření koncentrací vodíku polarografické sondy, které jsou často využívány k měření koncentrací kyslíku. Výsledkem vývoje H-metru na bázi polarografických sond by v budoucnu mohl být nový žádaný produkt, protože dnes existuje pouze jediná firma nabízející obdobný přístroj. Byl sestaven první prototyp H-metru, který je nyní ve fázi testování funkčnosti a přesnosti. Na laboratorní aparatuře byly testovány nově vyvinuté vodíkové sondy. Do budoucna je plánováno zlepšení celkové mechanické odolnosti H-metru a vývoj modernější elektroniky, která by splňovala požadavky na přesnost měření, stabilitu a funkčnost.

Chemické inženýrství 4

MÍSTO: B 07

KOMISE

prof. Dr. Ing. Juraj Kosek (předseda)

Ing. Jan Haidl, Ph.D.

Ing. Alexandr Romanov

Ing. Jakub Dvořák

Ing. Martin Hubička, Ph.D.

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:40 [Bc. Ondřej Navrátil](#) (M1, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.)

Využití hydrogelových mikrokapslí jako variabilního nosiče léčiva

09:00 [Bc. Kateřina Sladká](#) (M2, Dr. Ing. Pavlína Basařová)

Experimental study of bubble adhesion on solid surface in aqueous solutions of simple alcohols

09:20 [Bc. Přemysl Richtř](#) (M1, Ing. Jaromír Pociďč, Ph.D.)

Vliv konstrukce zinko-vzduchové průtočné baterie na její účinnost a životnost

09:40 [Kateryna Korniienko](#) (B3, Ing. Viola Tokárová, Ph.D.)

Vliv procesních parametrů mikroenkapsulátoru na přípravu alginátových mikročástic

10:20 [Bc. Adrián Žák](#) (M1, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Porovnanie kinetiky oxidácie CO a C₃H₆ na automobilových katalyzátoroch Pt/ γ -Al₂O₃ a Pt/CeO₂/ γ -Al₂O₃

10:40 [Bc. Jan Šíkola](#) (M2, Ing. Jan Haidl, Ph.D.)

Termografická studie fázového rozhraní v systému kapalyna-plyn

11:00 [Bc. Ondřej Šrom](#) (M2, doc. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.)

Deeper insight into the dynamic light scattering technique for particle size characterization

11:20 [Milan Žalud](#) (B3, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Nanášení katalytické vrstvy do automobilového filtru - vliv reologie suspenze $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$

vyhlášení výsledků

Využití hydrogelových mikrokapslí jako variabilního nosiče léčiva

Bc. Ondřej Navrátil (M1)

Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Lékové formy s prodlouženou dobou uvolňování účinné látky jsou jednou z lékových forem s cíleně modifikovanou disoluční kinetikou. Jejich snahou je co nejefektivnější využití léčiva, doprovázeno nižší zátěží pro uživatele. Tato práce se zabývá přípravou hydrogelových mikročástic jako možnou alternativou ke klasickým lékovým formám s prodlouženou dobou uvolňování. Mezi částice se strukturou jádro-slupka lze zařadit alginátové kapsle, jež jsou schopny nést v jádře jak hydrofilní nebo lipofilní účinnou látku tak i jejich suspenze. Vlastnosti připravovaných kapslí závisí na volbě systému roztoků. Alginát sodný vždy figuruje jako gelující polymer (gelující v roztoku CaCl_2 procesem externí cross-polymerace) tvořící hlavní strukturu kapsle, kdy roztok v jádře je pak olejového, nebo vodného charakteru. Kapsle byly připravovány enkapsulátorem BÜCHI B-395 PRO, kdy vznikaly frekvenčním rozrušováním laminárního toku tekutiny ze soustředné soustavy trysek. U připravených kapslí byla provedena rozměrová analýza. Vybrané typy byly vybaveny modelovou účinnou látkou a byla testována funkčnost tohoto navrhovaného systému. Rovněž byla prozkoumána povrchová modifikace kapslí chitosanem.

Experimental study of bubble adhesion on solid surface in aqueous solutions of simple alcohols

Bc. Kateřina Sladká (M2)

Školitel: Dr. Ing. Pavlína Basařová

This work deals with the study of bubble adhesion on a solid surface in the differently concentrated aqueous solutions of n-propanol. Alcohols influence adhesion and decrease the surface tension of liquid. Bubble adhesion can be used to determine the type of solids which are divided into two groups according to their character – hydrophobic and hydrophilic. Adhesion can work only on a hydrophobic surface and it determines the efficiency of a separation and flotation process. The image sequences are captured by a high-speed camera. A process and used substances are characterized by the velocity of a rising bubble, the angle of wetting and the size of a three-phase contact line. All the parameters describing this process are evaluated in NIS-Elements program. The three measured solutions contained 30, 10 and 0,5 molar percent of n-propanol. It was found that bubble adhesion had a strong dependency on the alcohol concentration of a solution. The size of a three-phase contact line decreased with the increasing contain of an alcohol in solution in proportion to a bubble size.

Vliv konstrukce zinko-vzduchové průtočné baterie na její účinnost a životnost

Bc. Přemysl Richtr (M1)

Školitel: Ing. Jaromír Pocedič, Ph.D.

S ohledem na omezené množství fosilních paliv je stále více elektrické energie produkováno z obnovitelných zdrojů, které mají ovšem kolísavou produkci energie, a tudíž je nutné stabilizovat jejich výkon. V dnešní době jsou k tomuto účelu nejvíce v používány Li-iontové baterie, vanadové redoxní průtočné baterie či vodíková energetika, nicméně tyto technologie limituje cena a zásoba nerostných zdrojů či nízká energetická účinnost. Proto se hledají cenově efektivní systémy pro akumulaci a jako slibné řešení se ukazují zinko-vzduchové průtočné baterie, které mají vysokou hustotu energie, jsou ekologické a na zemi jsou velké zásoby zinku. Přes perspektivnost systému je však tato technologie velmi málo prozkoumaná a existuje velmi omezené množství představených technických řešení. Cílem této práce bylo zjistit vliv designu baterie na její fungování a účinnost. V rámci studie byla připravena série konstrukčních řešení, které byly charakterizovány galvanostatickým nabíjením a vybíjením. Na základě výsledků byly navrženy změny, které přispěly k lepšímu fungování zinko-vzduchové průtočné baterie. Zásadní vliv na funkčnost baterie mělo uspořádání vzduchové elektrody sloužící k redukci a zpětné regeneraci vzdušného kyslíku.

Vliv procesních parametrů mikroenkapsulátoru na přípravu alginátových mikročástic

Kateryna Korniienko (B3)

Školitel: Ing. Viola Tokárová, Ph.D.

V posledních letech dochází k rozvoji v oblasti enkapsulace látek. Enkapsulace je proces, kdy jsou do polymerní matrice začleněny další látky, například vitamíny, enzymy nebo léčiva. Takto připravené částice mohou být využity pro cílené doručení léčiv nebo zefektivnění jejich vstřebávání v těle pacienta. Tato práce se zabývala výzkumem alginátových mikročástic, vyráběných na laboratorním Enkapsulátoru BÜCHI B-395 Pro. Princip spočíval v protlačování vodného roztoku alginátu sodného skrz trysku enkapsulátoru. Pomocí vibrační frekvence byl tento tok rozrušován na kapky o stejných rozměrech. Ty byly dispergovány pomocí elektrického napětí, díky čemuž byla eliminována možnost koalescence mezi jednotlivými kapkami. Částice byly následně vytvrzeny v lázni s roztokem CaCl_2 , kde docházelo k polymeraci díky záměně sodných iontů za dvojmocné vápenaté ionty. Na základě popsané metody přípravy mikročástic byla provedena parametrická studie, zahrnující výzkum vlivu parametrů přístroje na charakteristiky mikročástic. A to zejména vliv elektrického napětí, vibrační frekvence a vzdálenost trysky od hladiny vytvrzovacího roztoku CaCl_2 . Vyhodnocování charakteristik částic bylo provedeno pomocí programu Image J (Fiji), a byl vytvořen poloautomatický algoritmus pro jejich obrazovou analýzu.

Porovnanie kinetiky oxidácie CO a C₃H₆ na automobilových katalyzátoroch Pt/ γ -Al₂O₃ a Pt/CeO₂/ γ -Al₂O₃

Bc. Adrián Žák (M1)

Školiteľ: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

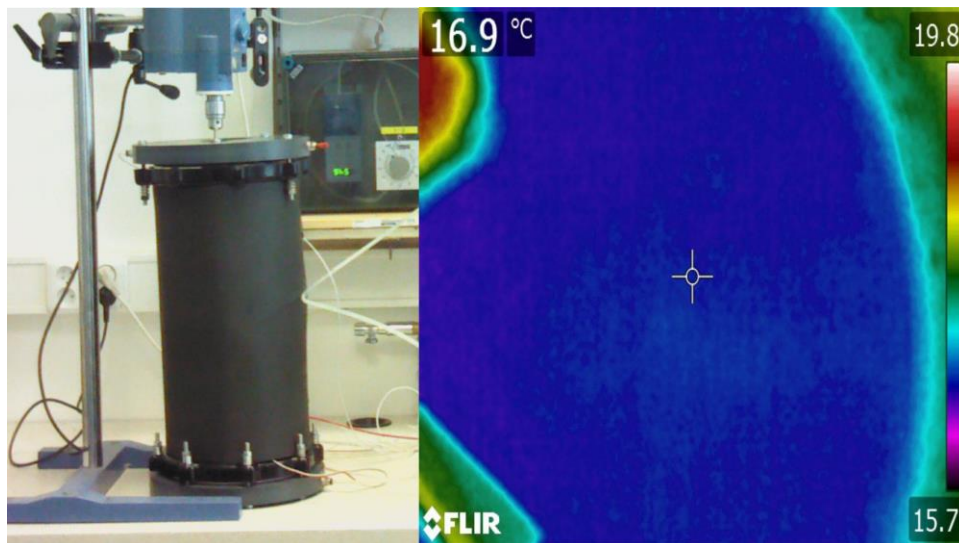
Táto práca študuje kinetiku nežiadúceho javu, ktorý je v praxi označovaný názvom dvojité zapálenie katalytickej oxidácie CO. Počas bežnej automobilovej prevádzky je tento jav pozorovaný pri nepravidelnom jazdnom cykle napríklad v hustej premávke, ale hlavne počas studeného štartu z dôvodu, že teplota katalyzátoru je nižšia, než jeho optimálna prevádzková teplota. V tomto deji môže byť pozorované, že s rastúcou teplotou dochádza k dočasnemu poklesu konverzie CO. Nárast koncentrácie CO je z časti spôsobený jeho tvorbou, ako vedľajšieho produktu nedokonalkej oxidácie propénu a z časti tvorbou organických medziproduktov katalytickej oxidácie propénu, ako etylén, octany a mravčany, ktoré blokujú katalyticky aktívne centrá a prispievajú k inhibícii reakcie. Boli testované dve vzorky automobilových katalyzátorov Pt/ γ -Al₂O₃ a Pt/CeO₂/ γ -Al₂O₃. Na vzorke s obsahom CeO₂ je pozorovaný nižší pokles konverzie CO.

Termografická studie fázového rozhraní v systému kapalyna-plyn

Bc. Jan Šíkola (M2)

Školitel: Ing. Jan Haidl, Ph.D.

Procesy odehrávající se na fázovém rozhraní kapalina-pára, kapalin-plyn jsou zásadní pro popis celé řady operací, jež se uplatňují v mnoha oblastech chemického průmyslu. Tyto děje tvoří podstatnou část separačních procesů, z nichž se zejména destilace, sušení a odpařování podílí až deseti procenty na celosvětové energetické spotřebě. Při návrhu aparátů se vychází z empirických integrálních dat, která však svým charakterem neumožňují optimalizaci jednotlivých součástí daného procesu. Z tohoto důvodu je klíčové bližší studium dějů odehrávajících se lokálně na fázovém rozhraní a jejich správné popsání. Pro tuto studii byla jako vhodná neinvazivní metoda navržena termografie, jež by mohla poskytovat informace o teplotě fázového rozhraní kapalina-plyn (či kapalina-pára) v reálném čase. To by umožnilo další studie aktivity rozhraní z hlediska sdílení tepla a hmoty, důležitých dějů probíhajících ve zmiňovaných separačních procesech. Tato práce se zabývá návrhem a konstrukcí experimentální aparatury pro termografické měření klidné hladiny v situacích s probíhajícím mezifázovým sdílením tepla a hmoty, kde se očekává rozdílná teplota rozhraní od jádra obou fází. Aparatura je navržena k zodpovězení klíčové otázky projektu: Je možné termograficky spolehlivě určovat teplotu fázového rozhraní?



Deeper insight into the dynamic light scattering technique for particle size characterization

Bc. Ondřej Šrom (M2)

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

The size of nanoparticles (NPs) is an essential attribute which determines their physical and chemical properties, such as solubility, melting point, surface area, surface plasmon resonance, catalyst efficiency, etc. It is therefore crucial to have knowledge about the dimensions of NPs in order to comprehend their behavior. Thanks to its convenience, rapidness and statistical sufficiency, a very useful and commonly used technique for NP characterization is carried out through dynamic light scattering (DLS), tracing the substantial Brownian motion of such particles dispersed in a liquid medium. Due to the scattering intensity fluctuations, speckles of light carry precious information about NPs' size. Furthermore, the technique is non-invasive to the sample and therefore one obtains (indirect) information directly about a sample with no previous modification. However, the indirect nature of DLS creates a greater scope for data misinterpretation, which occurs very often among its users. Since the results obtained from DLS measurements are frequently mistreated, the goal of this work is to provide deeper understanding and improvement of the data treatment. Besides that, other measuring modes of the DLS and their usage are presented.

Nanášení katalytické vrstvy do automobilového filtru - vliv reologie suspenze $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$

Milan Žalud (B3)

Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Spalovací motory jsou v současné době jednoznačně nejpoužívanějším pohonem pro automobily. Jejich největším problémem jsou emise škodlivých plynných látek a pevných částic do ovzduší. Jednou ze součástí systému pro čištění výfukových plynů jsou filtry pevných částic, které jsou již běžnou součástí dieselových motorů (DPF) a nově i některých benzínových (GPF). U katalytického filtru pevných částic je na povrch a do pórů stěn jeho vnitřních kanálků nanášena katalytická vrstva. V mé práci je tato vrstva nanášena v podobě suspenze obsahující $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ metodou washcoatingu. Při přípravě suspenze je třeba sledovat několik parametrů, jako je velikost částic Al_2O_3 , pH či reologii. Připravená suspenze je neneutonská tekutina, konkrétně ji lze charakterizovat modelem pseudoplastické kapaliny. Pro tyto systémy je zaveden pojem zdánlivá dynamická viskozita, která není konstantou, nýbrž je závislá na smykové rychlosti. Pomocí reologického měření jsou získány reogramy, které zobrazují závislost smykového napětí na smykové rychlosti. Při analýze výsledků nanášení suspenze na vzorky pak znalost reologie umožňuje definovat optimální vlastnosti suspenze $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ a následně dosáhnout požadovaného umístění a rovnoměrnosti nanesené vrstvy.

Chemické inženýrství 5

MÍSTO: B III

KOMISE

doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha (předseda)

Ing. Věra Pěnkavová, Ph.D.

Ing. Ladislav Konopka

Ing. Jiří Charvát

Ing. František Plát, Ph.D.

Ing. Jan Hronza, Ph.D.

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:40 [Bc. Martin Bureš](#) (M1, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)

Simulation of long term cycling of vanadium redox flow battery

09:00 [Bc. Daniel Götz](#) (M2, Ing. Petr Mazúr, Ph.D.)

Vliv vlastností membrány na provozní charakteristiky vanadové redoxní průtočné baterie

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

Viskoelastické chování polyethylenových částic

09:40 [Jakub Nademlejský](#) (B3, RNDr. Ivan Řehoř, Ph.D.)

Blood cell-like microparticles produced with continuous lithography

10:20 [Bc. Tomáš Pachel](#) (M1, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Porovnání kinetiky dvojitého zapálení CO v přítomnosti C₃H₆ na katalyzátorech Pd/ γ -Al₂O₃ a Pt/ γ -Al₂O₃

10:40 [Bc. Jakub Svoboda](#) (M2, Ing. Ondřej Kašpar, Ph.D.)

Příprava hierarchických mikro-strukturovaných povrchů s využitím polystyrenových částic

11:00 [Adam Vondra](#) (B3, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Vliv tlaku na konverzi škodlivin v automobilovém katalyzátoru

11:20 [Václav Šmíd](#) (B3, Ing. Jan Haidl, Ph.D.)

Možnosti zvýšení energetické účinnosti ejektorového čerpadla kapalina-plyn

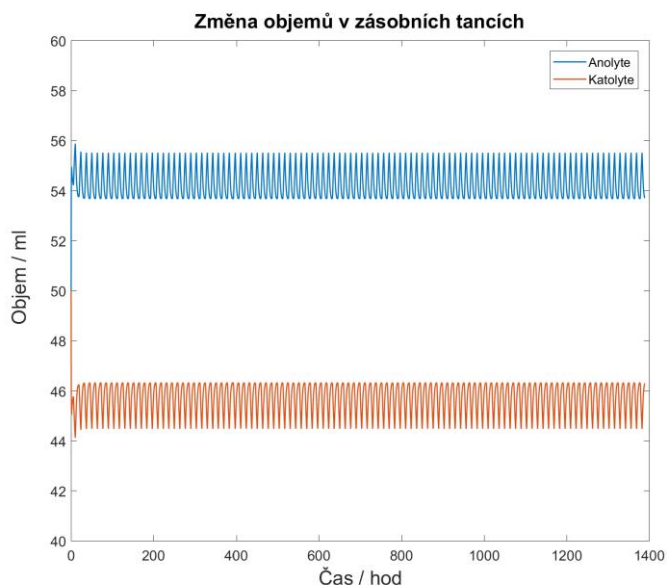
vyhlášení výsledků

Simulation of long term cycling of vanadium redox flow battery

Bc. Martin Bureš (M1)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Alternativou k uskladnění energie z obnovitelných zdrojů jsou vanadové průtočné baterie, u nichž probíhá přečerpávání elektrolytů skrz porézní elektrody oddělené membránou. Membrány jsou v ideálním případě propustné pouze pro vodíkové ionty, které přenášejí elektrický náboj. V reálném případě jsou ale propustné i pro vanadové kationty a vodu, což mírně snižuje účinnost baterie a její kapacitu při dlouhodobém cyklování. Naštěstí lze baterii snadno regenerovat na původní plnou kapacitu. V této práci simulujeme pomocí matematického modelu chování reálné baterie. V modelu využíváme její rozdělení na 4 části, pozitivní a negativní celu a dva zásobní tanky k nim připojené. Model zahrnuje popis transportu iontů skrz membránu Nernst-Planckovu rovnici, popis reakční kinetiky v roztoku a popis elektrochemických reakcí Butler-Volmerovou rovnici. K výpočtu toku vody využíváme osmotický tlak a popis membrány jako homogenní i porézní prostředí. K popisu rovnovážného napětí je použita Nernstova rovnice. Z výsledků lze predikovat jak vývoj kapacity baterie, tak objemů a koncentrací elektrolytů v průběhu dlouhodobého nabíjení a vybíjení. Využitím vyvinutého modelu budeme schopni řídit baterii tak, aby se zlepšila její účinnost a dlouhodobá stabilita.



Vliv vlastností membrány na provozní charakteristiky vanadové redoxní průtočné baterie

Bc. Daniel Götz (M2)

Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Dlouhodobý trend zvyšování časově nerovnoměrné poptávky po elektrické energii s sebou nese potřebu stabilizovat síť pomocí stacionárních uložišť, kupř. ve formě akumulátorů. Na ty jsou ale v této funkci kladené specifické požadavky zejména dlouhodobé výdrže, spolehlivosti a v neposlední řadě také nízké ceny. Právě tyto vlastnosti nabízejí vanadové redoxní průtočné baterie. Jednou z klíčových komponent, který rozhoduje o technických a ekonomických parametrech baterie, je membrána oddělující kladný a záporný elektrolyt a zajišťuje iontové propojení mezi poločlánky. Cílem mé práce bylo experimentální studium provozních vlastností baterie s rozdílnými membránami. Pro experimenty jsem zkonstruoval aparaturu umožňující nejen základní charakterizaci laboratorního monočlánku, ale též k průběžnému monitorování změn objemu a složení elektrolytu. Aparatura byla využita k charakterizaci několika zástupců výměnných membrán o různé iontovýměnné kapacitě. Byl sledován významný vliv vlastností membrány na provozní vlastnosti baterie (účinnost, kapacita), ale též na transport jednotlivých složek elektrolytu membránou, a to i v dlouhodobém horizontu.

Viskoelastické chování polyethylenových částic

Bc. Jarmila Kučerová (M2)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

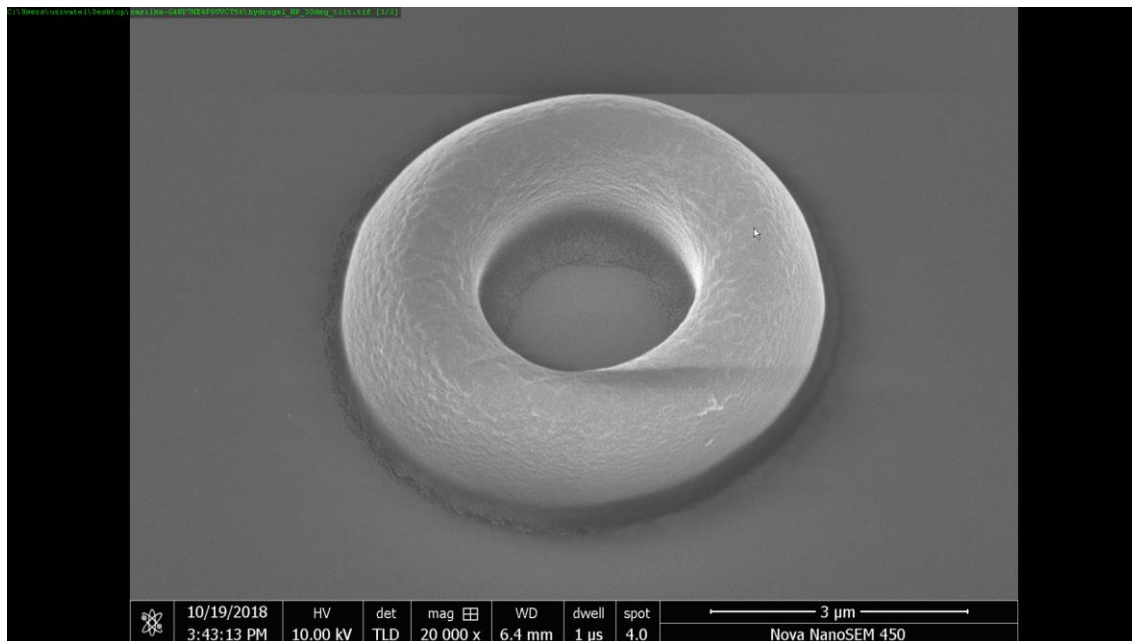
Powder particles, for example polymers or drugs, undergo various collisions during their manufacturing and transport. Their viscoelastic properties lead to energy dissipation during collisions. The amount of dissipated energy determines the behaviour of the whole particulate system and is crucial when studying phenomena like particle aggregation or fouling. In our work, we focus on collision behaviour of PE particles. As a measure of dissipated energy, we use restitution coefficient (defined as the ratio of velocity after and before impact). Based on our experimental observations, we developed DEM model that enables us to predict restitution coefficient and post-impact behaviour of particles under various conditions. During the experiments, we recorded PE particles impacting metal plate and by image analysis obtained their restitution coefficients. We used the measured data to fit dissipative force parameter in one-element model. Consequently, we applied the same force description in a model with discretized particles represented by aggregate of elements. This model enabled us to predict energy dissipation of particles of different shapes and surface roughness. Our results also provide information about force propagation during impact and the significance of particle rotation.

Blood cell-like microparticles produced with continuous lithography

Jakub Nademlejnský (B3)

Školitel: RNDr. Ivan Řehoř, Ph.D.

In this work, we try to synthesize hydrogel particles that can mimic the red blood cells and flow through the bloodstream and not being excreted by kidney or liver. To achieve that, we must mimic the shape, surface and mechanical properties of the blood cells. We have synthesized the blood-cell shaped particles from polymer PEGDA using stop flow lithography, demonstrating we are able to do such small and diversified particles. We plan to use the particles as in-vivo microsensors of blood composition by loading them with fluorescent sensors of biologically relevant parameters (pH, glucose, lactate...)



Porovnání kinetiky dvojitého zapálení CO v přítomnosti C₃H₆ na katalyzátorech Pd/γ-Al₂O₃ a Pt/γ-Al₂O₃

Bc. Tomáš Páchl (M1)

Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

New strict emission standards for internal combustion engine vehicles require deeper understanding of catalytic converters. This study focuses on co-oxidation of propene and carbon monoxide over Pd/γ-Al₂O₃ and Pt/γ-Al₂O₃ monolith-supported catalysts. Partial oxidation of light hydrocarbons to intermediates and their accumulation on active sites reduce efficiency of the catalyst. This can lead to temporary decreasing conversion of CO with increasing temperature, which is known as dual light-off. This effect was studied under lean and stoichiometric conditions typical of diesel oxidation and three-way catalysts. The biggest impact was observed on Pt based catalyst with presence of NO under stoichiometric conditions. On the other hand, under lean conditions oxidation of intermediates is sufficient and their effect is negligible. A global mathematical model was modified to take into account these findings. Additional reactions describe: a) partial oxidation of propene to intermediates that block active sites and slow down other reactions, b) oxidation of the intermediates and c) partial oxidation of propene to CO. The newly created CO plays only a minor role in dual light-off behaviour. The results from the modified model are consistent with the experimental data.

Příprava hierarchických mikro-strukturovaných povrchů s využitím polystyrenových částic

Bc. Jakub Svoboda (M2)

Školitel: Ing. Ondřej Kašpar, Ph.D.

This work deals with the preparation of artificial surfaces with hierarchical topology inspired by the natural templates. Many natural materials with two-scale roughness show unique properties such as superhydrophobicity (rose petals), self-cleaning effect (lotus leaf), antibacterial properties (cicada wing) or cytocompatibility (moth eye). The aim of this work is to use various methods of soft-lithography to produce hierarchical structures with the possibility to control both levels of surface roughness and thus the final surface properties. First, the microscale roughness can be altered by the size of primary polystyrene (PS) beads (Fig. 1a) and secondary, the nano-roughness can be controlled via process parameters of oxygen plasma etching (Fig. 1b) or alternatively, by deposition of the additional layer composed from nanoparticles on top of microspheres. A close-packed layer of PS with various diameter was prepared by spin coating of glass/PDMS surface pre-activated by oxygen plasma. Influence of inlet parameters (presence of solvent, acceleration or speed of drying) on quality of surface coverage by PS beads will be presented. Additionally, wetting parameters of structured surfaces and resistance to bacterial colonization compared to a flat surface will be investigated.

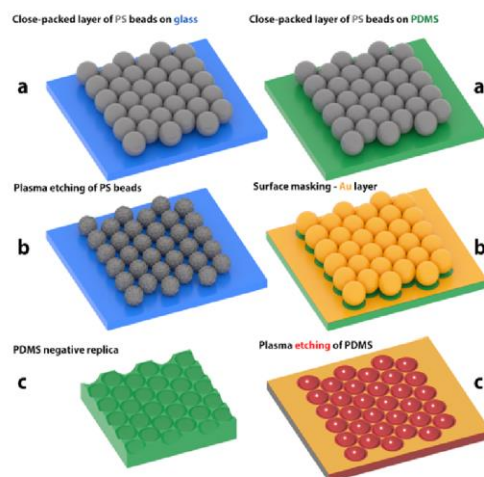


Fig. 1: a- c- Preparation of patterned negative PDMS replica; a' - c' - Preparation of structured surface using Au mask

Vliv tlaku na konverzi škodlivin v automobilovém katalyzátoru

Adam Vondra (B3)

Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

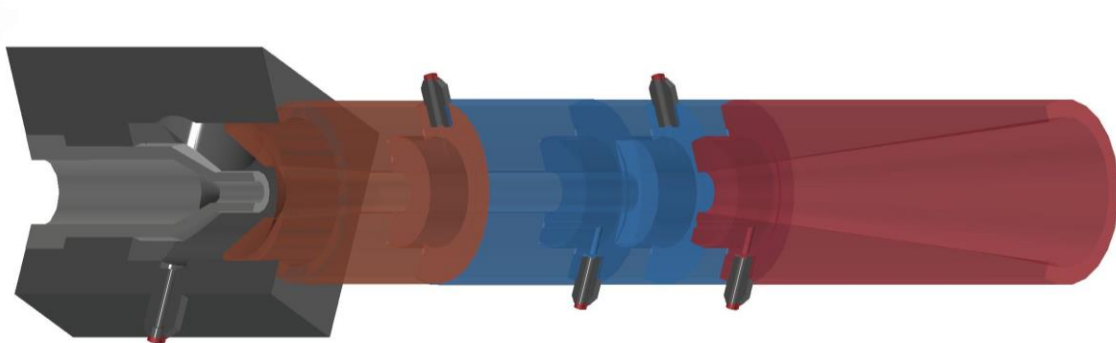
V dnešní době je kladen stále větší důraz na ochranu životního prostředí. Neustále se zpřísnující limity na snížení emisí automobilových výfukových plynů, společně s novými testovacími postupy pro zjišťování emisí a spotřeby paliva WLTP (Worldwide Harmonized Light Vehicles Test Procedures) a RDE (Real Driving Emissions), nutí výrobce používat neustále sofistikovanější katalytické konvertory, které přeměňují stopy zdraví škodlivých látek, jako je oxid uhelnatý (CO), zbytky nespálených uhlovodíků (HC) a oxidy dusíku (NO_x) na zdraví nezávadné plyny (vodu, oxid uhličitý a dusík). Jednou z uvažovaných možností, jak dosáhnout co nejvyšší konverze škodlivin, je umístění katalyzátoru do místa s vyšším tlakem výfukového plynu (před turbo). Tato práce se zabývá matematickým modelováním vlivu tlaku na konverzi škodlivin v automobilovém katalyzátoru a porovnáním výsledků simulací s experimentálními daty naměřenými v laboratoři. Při zvýšeném tlaku došlo v případě oxidace CO a uhlovodíků k drobnému snížení teploty zapálení, u adsorpce NO_x pak k mírnému nárůstu adsorpční kapacity, což je v obou případech žádoucí.

Možnosti zvýšení energetické účinnosti ejektorového čerpadla kapalina-plyn

Václav Šmíd (B3)

Školitel: Ing. Jan Haidl, Ph.D.

Ejektor je jednoduché a poměrně bezporuchové zařízení, které je díky absenci jakýchkoliv pohyblivých částí vhodné pro čerpání znečištěných kapalin a plynů, např. suspenzí, kalů, prachů či dýmů, které by v konvenčních zařízeních mohly způsobovat zanášení. Principem jeho činnosti je tvorba jemné, velmi dobře míchané, disperze plynu v hnací kapalině, což podporuje intenzivní přestup hmoty mezi plynem a kapalinou. Velmi vysoká hustota mezifázové plochy ve vznikající plynokapalinové směsi umožňuje použití ejektoru jako zařízení pro mechanické nebo chemické čištění plynů a par z průmyslových procesů. Alternativně lze ejektor použít jako velmi účinný chemický reaktor, který si sám přisává reagující plyn. Mimořádné vlastnosti ejektoru jako výměníku hmoty jsou však kompenzovány vysokými energetickými nároky a omezenou databází návrhových dat. Tato práce se zaměřuje na možnosti zvýšení energetické účinnosti ejektoru pro zpracování velkých objemů plynu prostřednictvím mechanického rozrušení paprsku hnací kapaliny. V práci jsou popsány a studovány dvě možnosti rozrušení paprsku: (i) prostřednictvím rotace části kapaliny v paprsku způsobené rotačním tělískem – swirllem; (ii) rozpad paprsku vlivem expanze bublin komprimovaného plynu v trysce.



Ústav fyziky a měřicí techniky (444)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

doc. Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.

SEZNAM SEKČÍ

1. [Fyzika a měřicí technika](#)

SPONZOŘI ÚSTAVU FYZIKY A MĚŘICÍ TECHNIKY



Fyzika a měřicí technika

MÍSTO: ÚSTAV FYZIKY A MĚŘICÍ TECHNIKY

KOMISE

prof. Dr. Ing. Martin Vrnáta (předseda)

Ing. Ladislav Fišer, Ph.D.

Mgr. Tomáš Kotrba

doc. RNDr. Jaroslav Julák, CSc. (1. lf UK)

Ing. Martin Straka, Ph.D. (ÚJV Řež, a.s.)

Ing. Jiří Protivínský, Ph.D. (Sysmex CZ s.r.o.)

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Bc. Tereza Měřinská](#) (M1, doc. Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.)

Inaktivace původce akantamébové keratitidy nízkoteplotním plazmatem

09:15 [Bc. Silvie Hejzlarová](#) (M1, doc. Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.)

Životní cykly trematoid a jejich ovlivnění nízkoteplotním plazmatem

09:30 [Eliška Lokajová](#) (B3, Ing. Josef Khun, Ph.D.)

Dynamika růstu plísni sekvenčně exponovaných nízkoteplotním plazmatem

09:45 [Klára Lukášová](#) (B3, doc. Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.)

Podklady pro návrh terapeutického programu léčby oychomykóz nízkoteplotním plazmatem

10:00 [Bc. Martin Hruška](#) (M2, Ing. Přemysl Fitl, Ph.D.)

Senzor plynů na bázi křemenné krystalové mikrováhy

10:15 [Lýdie Jakobová](#) (B3, Dr. Mgr. Jana Jirešová)

Studium trichologických stop pomocí elektronové mikroskopie

10:30 [Gabriela Soukupová](#) (B3, doc.Ing. Dušan Kopecký, Ph.D.)

*Pokročilé metody simulace a zpracování spektroskopických dat z energiově
disperzní spektroskopie*

10:45 [Bc. Stanislav Valtera](#) (M2, doc.Ing. Dušan Kopecký, Ph.D.)

Chemická funkcionalizace polypyrrolu pro biosenzory

11:00 [Bc. Richard Šípka](#) (M1, Ing. Jan Vlček, Ph.D.)

Chemické senzory využívající polyionové nanokompozity

vyhlášení výsledků

Inaktivace původce akantamébové keratitidy nizkoteplotním plazmatem

Bc. Tereza Měřínská (M1)

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

Akantamébové keratitidy představují významného původce očních infekcí. Nedodržováním vhodných hygienických zásad při manipulaci s očními čočkami může dojít k jejich kontaminaci některým parazitem z rodu *Acanthamoeba* sp. Tato práce se zabývá možností inaktivace izolátu akantaméby BM-18AK pomocí nizkoteplotního plazmatu. Z výsledků vyplývá, že expozicí cyst plazmatu dochází k jejich inaktivaci již za dobu 30 min, což by v budoucnu mohlo vést k vývoji zařízení pro dekontaminaci očních čoček *in situ*.

Životní cykly trematoid a jejich ovlivnění nízkoteplotním plazmatem

Bc. Silvie Hejzlarová (M1)

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

Trematody (motolice) jsou paraziti s jedinečnými životními cykly, které zahrnují sexuální reprodukci u finálních hostitelů a asexuální reprodukci u intermediálních hostitelů. Mezi typické zástupce třídy Trematoda patří rod *Schistosoma*. V této práci jsou zkoumány inaktivační účinky nízkoteplotního plazmatu na cercáriích rodu *Schistosoma*. Inaktivace vzorků cercárií ve vodném prostředí je prováděna kladným a záporným korónovým výbojem a kometárním výbojem pro různou dobu expozice. Hodnocení účinnosti inaktivace je založeno na pozorování cercárií pod lupou a hodnocením především jejich pohybu. Při experimentech byly měřeny také koncentrace látek, které vznikají během expozice (H_2O_2 , NO_3^- , NO_2^-), pH jakož i teplota vodného prostředí.

Dynamika růstu plísňí sekvenčně exponovaných nízkoteplotním plazmatem

Eliška Lokajová (B3)

Školitel: Ing. Josef Khun, Ph.D.

Práce se zabývá testováním mikrobicidního účinku nízkoteplotního plazmatu generovaného střídavým korónovým výbojem z Teslova transformátoru v elektroodovém systému s třinácti hroty. Plazma bylo generováno v uzavřené komoře. Dekontaminační efekt byl testován na sporách plísňí *Penicillium* spp. naočkovaných na povrchu živného média. Testování bylo provedeno na koloniích plísňí v různém stádiu růstu a zároveň při různých sekvencích expozice (různá kumulace 10 až 40 min). Bylo zjištěno, že různé sekvence expozice mají vliv na růst kolonií v různých stádiích vývoje. Je možné také inhibovat narostlé kolonie, které se ale po přerušení expozičního cyklu mohou dále rozrůstat v závislosti na délce působení. Předpokládané využití by bylo možné v potravinářství, restaurování nebo lékařství.

Podklady pro návrh terapeutického programu léčby onychomikóz nízkoteplotním plazmatem

Klára Lukášová (B3)

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

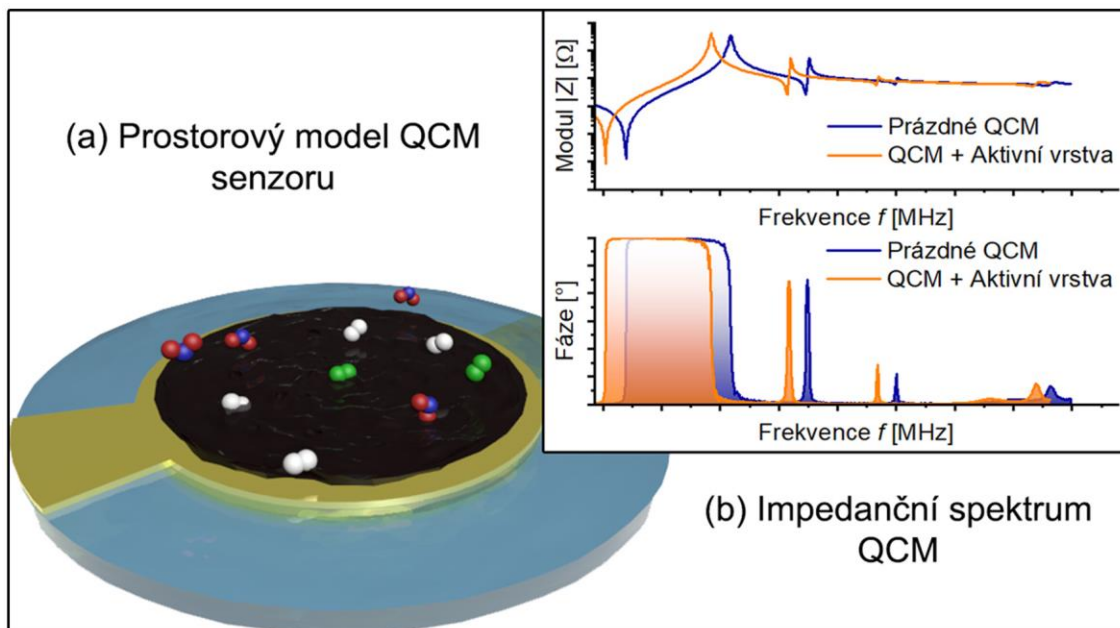
Práce pojednává o možném využití mikrobicidních účinků nízkoteplotního plazmatu na inaktivaci růstu plísní. Plazma je generováno korónovým výbojem a je aplikováno na kolonie plísní v různém stádiu vývoje na povrch agaru. Následně jsou plísně kultivovány po stanovenou dobu. Se vzrůstajícím časem expozice, v řádu několika minut až několika desítek minut, lze pozorovat výrazný úbytek jejich vitality. Nabyté poznatky budou použity jako podklady pro optimalizaci stávajícího terapeutického postupu experimentální léčby onychomikóz u pacientů. Tento typ onemocnění je velmi běžný a současná léčba bývá neúčinná nebo kontraindikována.

Senzor plynů na bázi křemenné krystalové mikrováhy

Bc. Martin Hruška (M2)

Školitel: Ing. Přemysl Fitl, Ph.D.

Studium foto-indukovaných dějů na tenkých vrstvách polovodičových chemických senzorů poukazuje na možnost existence různých desorpčních mechanismů. Pro lepší pochopení této problematiky byl navrhnout experiment využívající odlišný přístup detekce a sice senzor na bázi křemenné krystalové mikrováhy – QCM. QCM senzory oproti vodivostním senzorům pracují na odlišném principu a poskytují odezvu ve formě změny rezonanční frekvence křemenného výbrusu, jež je přímo úměrná hmotnosti adsorbovaných molekul. Předložená práce se zabývá zlepšením detekčních vlastností QCM senzorů, užitím křemenných výbrusů kmitajících na frekvenci 10,8 MHz a zvětšením aktivního povrchu senzoru (zvýšení počtu sorpčních míst), aplikací nanostrukturovaných porézních materiálu na bázi černých kovů. V rámci práce byla vytvořena aparatura pro měření QCM senzorů s možností referenční kompenzace (teplotního driftu), četně obslužného programu sepsaného ve vývojovém prostředí NI LabVIEW. Na vyvinutém systému byly následně proměřeny a porovnány odezvy připravených senzorů s nanostrukturovanou vrstvou černého kovu. Pomocí analyzátoru Agilent 4294A byla naměřena a porovnána impedanční spektra QCM před a po depozici aktivní vrstvy a po expozici analytem.



Studium trichologických stop pomocí elektronové mikroskopie

Lýdie Jakubová (B3)

Školitel: Dr. Mgr. Jana Jirešová

Hlavním cílem této práce je prozkoumat potenciál elektronové mikroskopie jako metody pro určování původu trichologického materiálu při forenzním vyšetřování. Jelikož z této metody získáváme primárně informaci o povrchové struktuře, je počet znaků důležitých při identifikaci do jisté míry omezen. Přesto se u všech druhů zvířat vyskytují topografické rozdíly, přispívající k taxonomickému zařazení živočicha. Pro tuto práci byl použit skenovací elektronový mikroskop MIRA3 od firmy TESCAN, který byl nastaven na detekci sekundárních elektronů, uvolněných po interakci se vzorkem při urychlovacím napětí 3 kV. Pod mikroskopem byl pozorován trichologický materiál běžných domácích a hospodářských zvířat, jako je kočka, pes, králík, kůň nebo prase. U každého vzorku jsme provedli měření šířky stvolu a porovnali tvar a vzdálenost šupin. Tyto parametry se lišily nejen v rámci druhů, ale i jednotlivých plemen.

Pokročilé metody simulace a zpracování spektroskopických dat z energiově disperzní spektroskopie

Gabriela Soukupová (B3)

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

Data získávaná metodou energiově disperzní spektroskopie (EDS), zejména spektra a údaje o prvkovém složení, jsou zpravidla zpracovávána v softwaru dodávaném výrobcem přístroje (OEM software). Cílem tohoto OEM softwaru je dosáhnout maximální uživatelské přívětivosti a plně automatizovaného zpracování dat. Díky tomu může metodu EDS používat širší spektrum uživatelů, bez hlubších znalostí jejích fyzikálních principů. Ve většině případů je tento přístup dostatečný a získané výsledky vyhovující. Cenou za jednoduchost OEM softwaru je však zvýšená chybovost kvalitativního i kvantitativního určení prvkového složení komplexních vzorků, kterou však z důvodu nedostatečného popisu použitých algoritmů nelze snadno eliminovat. Cílem této práce je proto využít specializovaného softwaru NIST DTSA II, vyvinutého pro pokročilé uživatele metody EDS, kteří chtějí mít větší kontrolu nad zpracováním naměřených dat. Pomocí NIST DTSA II jsou simulována a zpracována EDS spektra a je provedena zevrubná kvalitativní i kvantitativní analýza iontově výměnných membrán, vyvíjených pro mikrofluidní systémy.

Chemická funkcionalizace polypyrrolu pro biosenzory

Bc. Stanislav Valtera (M2)

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

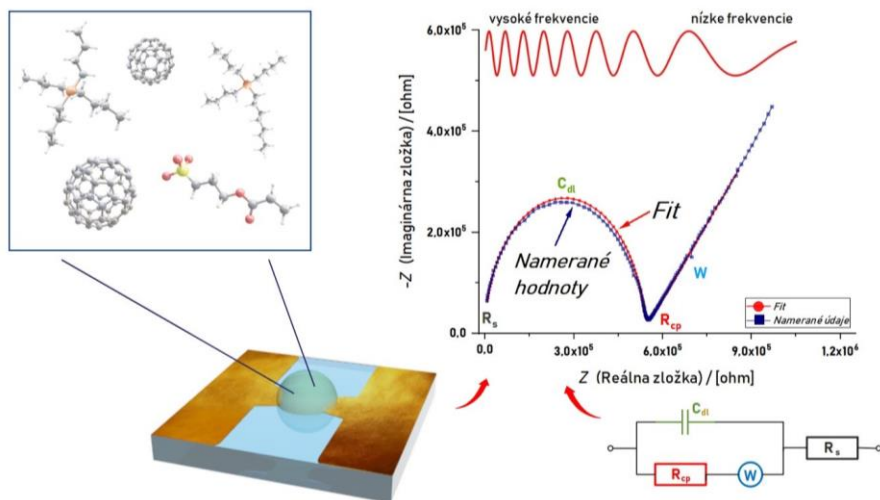
Příspěvek je zaměřen na syntézu a charakterizaci nanotrubek chemicky funkcionalizovaného vodivého polymeru polypyrrolu (PPy). Chemická funkcionalizace probíhá při polymerizaci PPy v přítomnosti kyseliny pyrrol-2-karboxylové a pyrrol-3-karboxylové. V závislosti na podmínkách syntézy a přítomnosti látek schopných tvořit šablony pro růst nanostruktur (např. methylovaný anilin či bipyrrrol) jsou vytvářeny pravidelné struktury polymeru, jejichž vlastnosti, např. elektrická vodivost, relativní specifický povrch či odolnost vůči přirozenému stárnutí materiálu jsou výrazně vylepšené oproti jejich nestrukturovaným protějškům. Tyto nanostruktury jsou navíc vybaveny funkčními skupinami –COOH, které slouží jako kotva schopná tvořit s aminy peptidickou vazbu. Díky tomu je možné připevnit na povrch nanostruktur řadu biologicky aktivních látek, které vynikají specifickou reakcí s kapalnými i plynnými analyty. Takto funkcionalizované, elektricky vodivé nanotrubky jsou zajímavou platformou pro přípravu biosenzorů či mikrofluidních čipů a reaktorů.

Chemické senzory využívajúce polyiónové nanokompozity

Bc. Richard Šípka (M1)

Školiteľ: Ing. Jan Vlček, Ph.D.

Rastúci záujem o polyiónové kvapaliny, ďalej iba (PIL) k senzorovým aplikáciám, sa odvíja od ich silných interakcií s niektorými analytmi. Značná jednoduchosť v prípade PIL, daná ľahkým výberom polymérnej alebo iónovej časti, vedie k značnej variabilite a z nej plynúcej širokej aplikovateľnosti. Práca sa zaoberá syntézou materiálov na báze tetrabutylfosfónium a tributylloktylfosfónium sulfopropylakrylátu: (i) čistý PIL, (ii) kompozit PIL + C₆₀ a (iii) kompozit PIL + C₇₀. Ako senzorové substráty boli použité sklá B270 o rozmeroch 10 x 10 mm² s párom naprášených zlatých elektród o hrúbke 200 nm a vzdialenosti 1 mm. Na takto pripravených jednoduchých senzoroch s nanosenou aktívnou vrstvou bola nameraná senzorová odozva plyných analytov. Merania boli uskutočnené pomocou metódy elektrochemickej impedančnej spektroskopie na potenciostate/galvanostate GAMRY Reference 600. Impedančná metóda prebiehala v rozsahu frekvencií 1 Hz až 1 MHz a výsledkom boli dáta vo forme Nyquistových diagramov. Nyquistové diagramy boli fitované pomocou Randlesovho ekvivalentného obvodu, z ktorého sme následne obdržali dáta postačujúce k výpočtu difúzneho koeficientu voľných iónov v prítomnosti rôznych plyných analytov. Difúzne koeficienty sa pohybovali v závislosti na type analytu v rozmedzí 1–3x10⁻¹⁰ m² s.



Ústav počítačové a řídicí techniky (445)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Iva Nachtigalová, Ph.D.

SEZNAM SEKČÍ

1. [Aplikovaná informatika a kybernetika](#)
2. [Řízení procesů a analýza dat](#)

SPONZOŘI ÚSTAVU POČÍTAČOVÉ A ŘÍDÍCÍ TECHNIKY

SIDAT
AUTOMATION-INFORMATICS



EAT•N
Powering Business Worldwide

AIR
PRODUCTS 



Aplikovaná informatika a kybernetika

MÍSTO: A40

KOMISE

Ing. Jan Švihlík, Ph.D. (předseda)

prof. Ing. Jan Náhlík, CSc.

Ing. Jana Tylová

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Bc. Jakub Steinbach](#) (M1, doc. Ing. Jan Mareš, Ph.D.)

Matematický model grafenové membrány

09:20 [Bc. Martin Vejvar](#) (M2, prof. Ing. Jan Náhlík, CSc.)

Rekurentní neuronové sítě pro zpracování přirozené řeči

09:40 [Bc. Jan Hajiček](#) (M1, Ing. Iva Nachtigalová, Ph.D.)

Identifikace procesů pomocí doplňku aplikace Excel

10:00 [Bc. Jaromír Mašek](#) (M2, doc. Ing. Jaromír Kukal, Ph.D.)

Polynomial model of liquid flow

10:20 [Bc. Tomáš Karlík](#) (M1, doc. Ing. Jan Mareš, Ph.D.)

Obrazová analýza nanostruktur ze snímků SEM

10:40 [Bc. Klára Zuntová](#) (M2, doc. Ing. Jaromír Kukal, Ph.D.)

Optimální vyhlazování signálu a obrazu

vyhlášení výsledků

Matematický model grafenové membrány

Bc. Jakub Steinbach (M1)

Školitel: doc. Ing. Jan Mareš, Ph.D.

Grafen je alotropní modifikace uhlíku tvořící monomolekulární vrstvu atomů orientovaných do šestiúhelníkové mřížky. Jeho derivát, grafenoxid, se využívá pro přípravu tenkých grafenoxidových vloček. Tyto vločky mají pozoruhodné separační vlastnosti, a jelikož lze připravit grafenoxidové vrstvy o tloušťce již v řádech nanometrů, mají velký potenciál pro aplikaci v ochranných filtrech a membránách pro mikrofiltraci či separaci. Cílem práce bylo na základě dat z experimentů se separačními membránami vytvořit model procesu membránové separace přes grafenovou membránu. Separace byla popsána parametrizovanou lineární diferenciální rovnicí a pro každý experiment byly parametry optimalizovány v programu MATLAB pomocí funkce `fminsearch`. Pro tyto parametry potom byl zpětně sestaven graf znázorňující závislost výstupní veličiny na vstupní, úsek vybraný pro optimalizaci a výstup získaný z optimalizovaného modelu.

Rekurentní neuronové sítě pro zpracování přirozené řeči

Bc. Martin Vejvar (M2)

Školitel: prof. Ing. Jan Náhlík, CSc.

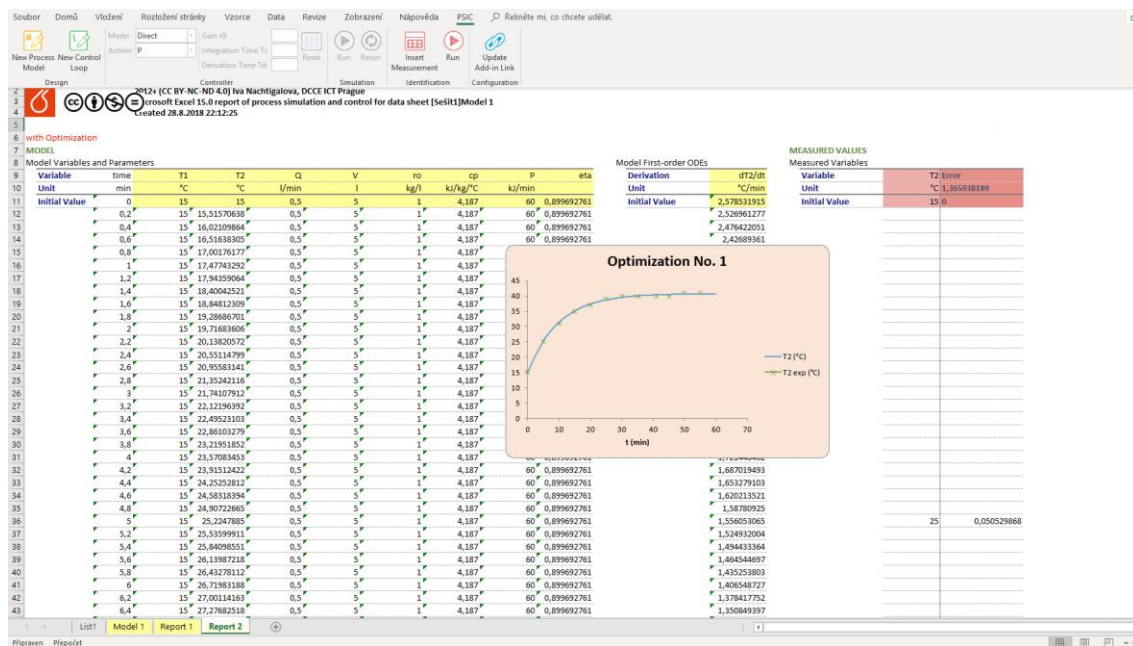
Náplní práce je návrh systému hlasového řízení robotických i jiných systémů s možností libovolných přirozenou řečí formulovaných příkazů. Přirozená řeč je jedním z nejstarších a lidem nejbližších způsobů komunikace, který umožňuje rychlý přenos velkého objemu dat prostřednictvím strukturovaného sledu zvukových signálů (fonémů). Jelikož se lidé s řečí setkávají již od útlého dětství, jedná se o velice intuitivní proces předávání informací. Je tedy žádoucí využít přirozenou řeč jakožto uživatelské rozhraní mezi člověkem a elektronickým zařízením. Syntaxe a sémantika řeči jsou však velice závislé na mluvčím a kontextu. Rekurentní neuronové sítě jsou specificky navrženy pro rozpoznávání kontextuálních závislostí a proměnné délky vstupních signálů, což je činní předními kandidáty pro umožnění počítačového zpracování přirozené řeči. Práce se zabývá zpracováním audiosignálů z korpusu mluvené češtiny Prague Dependency Treebank of Spoken Czech 1.0 (PDTSC 1.0) na cepstrální koeficienty (MFCC) a jejich využití pro naučení obousměrné rekurentní neuronové sítě (BRNN) převádět tyto signály na textový přepis, který bude dále využit pro vyhledávání klíčových slov k ovládání robotického systému.

Identifikace procesů pomocí doplňku aplikace Excel

Bc. Jan Hajíček (M1)

Školitel: Ing. Iva Nachtigalová, Ph.D.

Program *Process Simulation and Control (PSIC)* je doplněk aplikace MS Excel vyvinutý na Ústavu počítačové a řídicí techniky. Doplňek slouží jako učební pomůcka při výuce Laboratoří měřicí a řídicí techniky. Jedná se o jednoduchý simulační program, který zvládnou obsluhovat i studenti, kteří neumějí pracovat se složitějšími simulačními programy (Matlab, Maple). V rámci této práce došlo k přidání nové funkce, která umožňuje identifikaci procesů. Doplňek tak nově dovoluje uživateli zadat naměřená data, a pomocí optimalizačních metod nalezne přesnější hodnotu vstupního parametru modelu.



Polynomial model of liquid flow

Bc. Jaromír Mašek (M2)

Školitel: doc. Ing. Jaromír Kukal, Ph.D.

The contribution is focused on dynamical properties of isothermal incompressible liquid flow in horizontal pipeline. Fully developed laminar flow of non-newtonian liquid with diffusion absence is supposed. The study brings new results related to concentration changes in time. The method of investigation is demonstrated on Power-law liquids where shear stress is proportional to the power of radial velocity gradient. It is easy to obtain unit step response of pipeline flow in real time but the adequate transfer function cannot be expressed explicitly. But in the case of discrete response with given sampling period the discrete transfer function can be expressed as infinite time series in the Fourier domain. The novelty consist of effective approximation of residual terms. Without this trick the finite approximation of the series mentioned above is very rough and unacceptable for control applications. Thanks to the pseudospectrum we can investigate the properties of S, PS and PSD controllers in feedback control of given pipeline system. The final results are:

- * impulse response of discrete pipeline system
- * optimal setting of S and anti-wind up PS controller
- * stability verification using pseudo Nyquist plot
- * discrete control response of whole control system

Obrazová analýza nanostruktur ze snímků SEM

Bc. Tomáš Karlík (M1)

Školitel: doc. Ing. Jan Mareš, Ph.D.

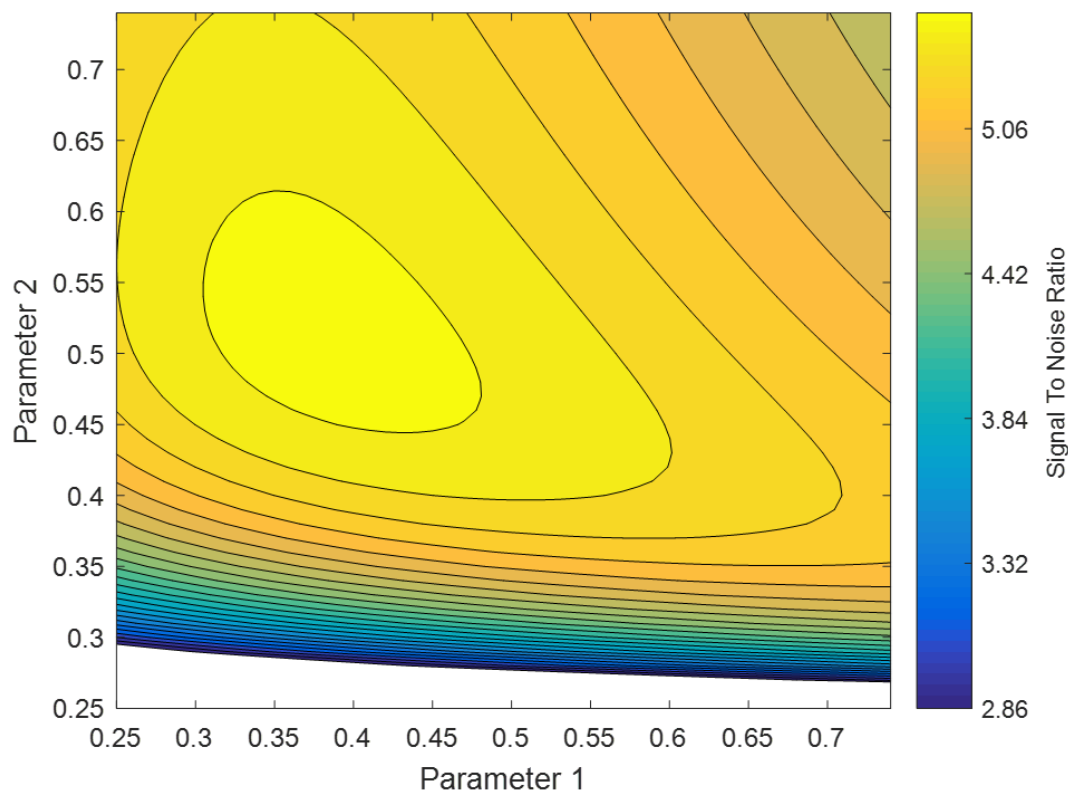
Obrazová analýza je důležitým doplňkem všech analytických metod, které produkují data ve formě snímků (např. SEM, AFM). Takové snímky je potřeba nejen dobře pořídít (s ohledem na minimalizaci šumu, rovnoměrné osvětlení, atp.), ale následně i zpracovat v digitální formě s využitím výpočetní techniky. Pro tyto účely slouží řada specializovaného software. Zpravidla pak záleží na uživateli, který musí zvolit vhodný postup pro danou analýzu. V rámci této práce byl vyvinut software v jazyce Python, jehož cílem je realizovat některé metody obrazové analýzy. Tento software byl následně demonstrován při analýze snímků nanovláken polypyrrolu ze skenovacího elektronového mikroskopu, jejichž rozměry jsou spojovány s jeho elektrickou vodivostí. Výsledný software byl obohacen o uživatelské rozhraní a lze jej použít pro analýzu dalších, podobných nanostruktur. Metody implementované v průběhu vývoje programu zahrnují např. úpravu histogramu, Gaussovskou filtraci, automatické prahování, morfologické operace aj., s analytickými nástroji pro manuální měření průměru a automatickou detekci objektů v binárních snímcích, jejich obvodu a plochy.

Optimální vyhlazování signálu a obrazu

Bc. Klára Zuntová (M2)

Školitel: doc. Ing. Jaromír Kukal, Ph.D.

Práce se zabývá využitím optimalizačních metod k nastavování vyhlazovacích filtrů pro vícerozměrné diskrétní signály. Optimalizovány jsou různé parametrizovatelné filtry s konečnou i nekonečnou impulsní odezvou (Gaussův filtr, konvoluční matice o různých rozměrech, Butterworthův filtr). Navržené algoritmy jsou implementovány v prostředí Matlab a testovány na medicínských signálech jednorozměrných (signály EEG) a dvojrozměrných (výřezy ze SPECT 3D obrazů). Kvalita vyhlazení je měřena účelovou funkcí SNR (Signal To Noise Ratio) a jejími variacemi. Na přiloženém obrázku jsou znázorněny hodnoty účelové funkce pro různé hodnoty dvou parametrů konvoluční matice o rozměrech 3x3 s nalezeným optimem – maximem účelové funkce.



Řízení procesů a analýza dat

MÍSTO: A330

KOMISE

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

Ing. Zuzana Krbcová

Ing. Jan Vrba

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Kristýna Žemlová](#) (B3, Ing. Jan Vrba)

Uživatelské rozhraní pro zpracování krystalografických dat

09:20 [Olena Marchenko](#) (B3, prof. Ing. Aleš Procházka, CSc.)

Pattern Recognition in Motion Analysis

09:40 [Karel Štícha](#) (B3, Ing. Jan Kohout)

Software pro analýzu obličejových dat

10:00 [Jan Vališ](#) (B3, doc. Ing. Jan Mareš, Ph.D.)

Diagnostika karcinomu plic s využitím in vivo Ramanovy sondy

10:20 [Jan Egermaier](#) (B3, Ing. Jan Kohout)

Software pro analýzu CT snímků

10:40 [Pavel Jíně](#) (B3, Ing. Jan Kohout)

Aplikace Průmysl 4.0 ve vnitřním prostředí budov

vyhlášení výsledků

Uživatelské rozhraní pro zpracování krystalografických dat

Kristýna Žemlová (B3)

Školitel: Ing. Jan Vrba

Při reaktivní sintraci dochází působením tlaku a tepla ke spékání práškových kovů za vzniku jejich sloučenin. Pro zkoumání mechanismu a kinetiky tohoto děje se využívá snímání reakční směsi pomocí rentgenové difrakce in situ. Z takto získaných dat lze zpětně vizuálním posouzením přibližně identifikovat moment vzniku jednotlivých intermetalických sloučenin. Cílem této práce bylo vytvořit aplikaci, která by umožnila efektivnější analýzu krystalografických dat s důrazem na přesnost identifikace vznikajících fází. Byla tedy vyvinuta aplikace vybavená intuitivním grafickým rozhraním, do něhož lze naměřená data importovat, vizualizovat je a provádět jejich filtraci. Aplikace byla naprogramována v jazyce Python.

Pattern Recognition in Motion Analysis

Olena Marchenko (B3)

Školitel: prof. Ing. Aleš Procházka, CSc.

Nowadays mobile phones are becoming more and more sophisticated and integrated into daily life not only due to increasing speed of data processing, but not least because of the wide range of possibilities to gather data. Various sensors as cameras, GPS sensors, microphones, temperature sensors etc. are able to provide us necessary and sufficient knowledge of the state of the environment or some system. Moreover, correlations between health state and physical activity patterns measured by accelerometers are of big interest for medical usage. Aim of this work is to preprocess data obtained from mobile phone accelerometer by means of signal processing techniques with purpose of future feature extraction and classification via neural network.

Software pro analýzu obličejových dat

Karel Štícha (B3)

Školitel: Ing. Jan Kohout

Obrna lícního nervu postihuje negativním způsobem funkčnost mimických svalů. Dosavadní klinické testy jsou založeny na subjektivním posouzení vyšetřujícího lékaře, pro kterého je obtížné postihnout všechny podstatné aspekty při diagnostice vyšetřovaného. Vyvíjený software má za úkol objektivně analyzovat vyšetřované pacienty, tzn. objektivizovat míru poruchy inervace obličeje, určit přesněji stupeň poruchy a zaznamenávat pokroky v léčbě pacientů. Cílem je individualizace léčby a rehabilitace pacientů pro zvýšení šancí na jejich zdárné uzdravení. K získání dat používáme hloubkovou kameru Microsoft Kinectu v2, který využívá pokročilé algoritmy na získání definovaných bodů obličeje v prostoru v reálném čase.

Diagnostika karcinomu plic s využitím in vivo Ramanovy sondy

Jan Vališ (B3)

Školitel: doc. Ing. Jan Mareš, Ph.D.

Karcinom plic je závažné onemocnění, jehož včasná diagnóza zvyšuje šanci na pacientovo přežití. S rozvojem vláknové optiky se otevřela možnost využít Ramanovu spektroskopii coby relativně neinvazivní a rychlou diagnostickou metodu. Překážkou pro klinické aplikace je však absence jak automatizovaného preprocesingu spekter, tak klasifikátoru. Vyvinutím algoritmické metodiky preprocesingu založené na Zero-phase FIR filtraci, implementované v programovém prostředí MATLAB, byla časová náročnost redukována o 94 % oproti semimanuální metodice Ústavu analytické chemie probíhající v programu Jasco Spectra Manager. FIR filtrace zároveň obstála ve srovnání s jinými metodikami umožňujícími algoritmické zpracování spekter, zejména Savitzky-Golay filtrací. Algoritmizace preprocesingu umožnila rychle a reprodukovatelně zpracovat větší množství spekter, díky čemuž bylo možné metodami strojového učení vytvořit model sloužící ke klasifikaci *in vivoměřených* Ramanových spekter plicní tkáně u pacientů s podezřením na karcinom plic. Celý proces vyhodnocování naměřeného spektra od preprocesingu po volbu modelu pro klasifikaci je možné ovládat v jednoduché aplikaci, která taktéž vznikla v MATLAB, čímž snad přiblíží využití Ramanovy spektroskopie směrem k *in vivo* diagnostice v reálném čase.

Software pro analýzu CT snímků

Jan Egermaier (B3)

Školitel: Ing. Jan Kohout

Pro svůj projekt jsem zvolil téma *Software pro analýzu CT snímků*, protože obrazové zpracování biomedicínských dat je velice důležité pro správné určení diagnózy pacienta a pomáhá lékařům určit další kroky léčby. V první části popisuji princip výpočetní tomografie, vysvětluji tvorbu obrazu pomocí Hounsfieldových jednotek a zabývám se významem datového standardu DICOM. Dále se krátce zmiňuji o virtuální realitě, což je technologie, která umožňuje uživateli interagovat se simulovaným prostředím. Prostřednictvím virtuální reality mají např. lékaři možnost prohlížet a prožívat složité operace, aniž by vstoupily do operačního sálu. V druhé části pak vysvětluji práci se softwarem a popisuji funkce, které jsem při jeho tvorbě použil. Série snímků, které jsem na začátku projektu obdržel, nahrávám do MATLABu a vytvářím z nich 3D model, který je dále možné v uživatelském prostředí modifikovat. Lze upravit objem zobrazeného obrazu, vykreslovat různé tkáně a struktury, které nahrané CT snímky obsahují, a uživatel je také schopen s modelem rotovat tak, aby zobrazil požadovanou část pacientova těla. Zobrazený model může uživatel vyexportovat ve formátu STL a následně vytisknout na 3D tiskárně, anebo ve formátu OBJ, který je určený pro virtuální realitu.

Aplikace Průmysl 4.0 ve vnitřním prostředí budov

Pavel Jíně (B3)

Školitel: Ing. Jan Kohout

Koncept Průmysl 4.0, také popisovaný jako čtvrtá průmyslová revoluce, byl oficiálně představen v roce 2013. Jedná se o trend digitalizace, automatizace a propojování různých technologií, založený na kyberneticko – fyzikálních systémech, internetu věcí (IoT) a služeb, digitální ekonomice. Tento projekt se konkrétně zabývá internetem věcí, koncepcí propojení, sběru a vyhodnocování dat z vnitřního prostředí budov. Pro zřízení naší sítě jsou využity čidla a gate, který zprostředkovává komunikaci s internetem. Systém je integrován s nástrojem Mervis, sloužící jako databáze k uchování dat a k jejich vizualizaci. Díky platformě Mervis jsou data dostupná z libovolného zařízení s prohlížečem a přístupem k internetu, nezávisle na zeměpisné poloze. Pro další podrobnější vyhodnocování dat byla vytvořena aplikace v programu Matlab.

Ústav ekonomiky a managementu (837)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Mgr. Ing. Marek Botek, Ph.D.

SEZNAM SEKČÍ

1. [Ekonomika a management](#)
2. [Lean management](#)

SPONZOR ÚSTAVU EKONOMIKY A MANAGEMENTU



Ekonomika a management

MÍSTO: C11

KOMISE

doc. Ing. Stanislava Grosová, CSc. (předseda)

Ing. Jakub Dyntar, Ph.D.

Ing. Petra Zemanová, Ph.D.

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 [Bc. Vojtěch Hamala](#) (M2, Ing. Petra Zemanová, Ph.D.)

Optimalizace výrobní linky při nízkém stavu zaměstnanců

08:45 [B.Sc. Anna Beata Fatyga](#) (M2, Ing. Jakub Dyntar, Ph.D.)

Optimalizace svozů

09:00 [Bc. Tereza Hanyková](#) (M2, Ing. Olga Kutnohorská, Ph.D.)

Ověření vlivu promoci na jednotlivé produkty společnosti Henkel s.r.o.

09:15 [Bc. Zuzana Zemanová](#) (M2, Ing. Olga Kutnohorská, Ph.D.)

Optimalizace věrnostního programu ve vybraném podniku

09:30 [Bc. Jakub Mareček](#) (M2, prof. Ing. Dušan Baran, Ph.D.)

Controlling výrobního procesu, výkazů práce a analýza výkonnosti výrobního zařízení

09:45 [Bc. Eliška Jandová](#) (M2, Ing. Petra Zemanová, Ph.D.)

Studium a zhodnocení poptávek po distribuci kávy z Ekvádoru

vyhlášení výsledků

Optimalizace výrobní linky při nízkém stavu zaměstnanců

Bc. Vojtěch Hamala (M2)

Školitel: Ing. Petra Zemanová, Ph.D.

V současné době dosahuje nezaměstnanost v ČR rekordně nízkých hodnot. Tento stav nahrává zaměstnancům, kteří si mohou vybírat práci z více nabídek, ale přináší problémy podnikům, které s nedostatečným počtem lidí nezvládají plnit všechny své pohledávky. Přestože práce při nedostatečném počtu zaměstnanců, v tzv. podstavu, může přinášet různé benefity: vyšší produktivitu práce jednotlivých pracovníků či větší pocit zadostiučinění pracovníků po vykonání všech zadaných úkolů. Avšak práce v podstavu je problémem v technologických procesech, ve kterých působí snížený výkon pracoviště nebo jeho úplně zastavení. V této práci jsem se zaměřil na jeden proces z výroby kondenzátorů v podniku AVX Česká republika s.r.o., kde se dlouhodobě s nedostatkem pracovníků potýkají. Na základě analýzy současné situace jsem identifikoval různé zdroje plýtvání a navrhl způsoby jejich eliminace. Ze získaných dat jsem navrhl restrukturalizovat výrobní linku tak, aby dosahovala stejných výkonů s menšími nároky na pracovní sílu. Za tímto účelem jsem pomocí simulačního programu Witness vytvořil model stávající a nově navrhované výrobní linky a porovnal jejich výkony. Při porovnání variant jsem zjistil, že nová linka je schopna dosáhnout stejného výkonu i s menším počtem pracovníků.

Optimalizace svozů

B.Sc. Anna Beata Fatyga (M2)

Školitel: Ing. Jakub Dyntar, Ph.D.

Cílem této práce je optimalizace svozů pro jeden z největších tuzemských e-shopů. Podnik kromě e-shopu provozuje i síť kamenných prodejen, kde má zákazník možnost si vyzvednout zboží objednané přes internet. Zboží je skladováno ve čtyřech distribučních centrech a několikrát denně doručováno na pobočky po celé České republice. Praktická část se zabývá analýzou svozů z jednoho distribučního centra, které zásobuje pražské pobočky. Záměrem je zjistit, zda všechny svozy jsou nutné, respektive najít optimální časy a počty svozů pro danou pobočku. Jako východisko pro optimalizace svozů poslouží analýza chování zákazníků, zejména časy vyzvedávání objednávek na příslušných pobočkách.

Ověření vlivu promoci na jednotlivé produkty společnosti Henkel s.r.o.

Bc. Tereza Hanyková (M2)

Školitel: Ing. Olga Kutnohorská, Ph.D.

Tato semestrální práce je zaměřena na vyhodnocení konkrétního nástroje podpory prodeje označovaný jako promoakce. V teoretické části jsou nejprve stručně popsány různé druhy podpory prodeje, následně proč jsou promoakce tak častým tématem především na českém trhu s rychloobrátkovým zbožím a v neposlední řadě, jak se mnohé firmy dostanou do tzv. promospirály. Nechybí i popis metod, pomocí kterých je zjištěn vliv promoakcí na prodeje výrobků. Následně se práce zabývá vyhodnocením a porovnáním promoakcí z roku 2016, 2017 a 2018, kde pro analýzu bylo zvoleno sedm skupin produktů z divize „Pracích a čistících prostředků“ společnosti Henkel.

Optimalizace věrnostního programu ve vybraném podniku

Bc. Zuzana Zemanová (M2)

Školitel: Ing. Olga Kutnohorská, Ph.D.

Při budování vztahu se zákazníky využívají firmy mimo jiné věrnostní programy, prostřednictvím kterých posilují loajalitu stávajících zákazníků a budují důvěru u zákazníků budoucích. Autorka semestrální práce v teoretické části nejdříve blíže vysvětluje pojmy jako marketingová komunikace, reklama, podpora prodeje a její nástroje, loajalita zákazníků a věrnostní programy jako takové. Cílem semestrální práce je navrhnout opatření vedoucí k optimalizaci věrnostního programu P.S.M. divize Adhesives Technologies firmy Henkel. V praktické části práce je navrženo snížení nákladů na dopravu na základě výsledků komparační analýzy nákladových údajů v programu Microsoft Excel. Při navržení nové skladby dárků je přihlédnuto k preferencím zákazníků ověřených Pearsonovým chí-kvadrát testem.

Controlling výrobního procesu, výkazů práce a analýza výkonnosti výrobního zařízení

Bc. Jakub Mareček (M2)

Školitel: prof. Ing. Dušan Baran, Ph.D.

Práce popisuje řešení a výsledek samostatného projektu zadané společností TSR autorovi práce. Autor se zabýval výrobním zařízením - stříhačem kovů na provozovně TSR Plzeň. Prvním ze zadaných úkolů bylo vylepšení záznamu průvodky agregátu, ve které se pro kontrolní účely zapisují časové a hmotnostní hodnoty práce stroje. Při řešení prvního úkolu autor zjistil nepřiměřené hodnoty práce a prostojů stroje, proto se projekt posléze rozšířil i o analýzu práce tohoto stříhače pozorovací metodou. Podle výsledků analýzy byly vypočítány půlroční ztráty vzniklé z prostojů, na základě čehož autor navrhl řešení pro snížení prostojových hodnot a tudíž i možnost zvýšení celkové efektivnosti a výkonnosti stroje jako úzkého místa této provozovny.

Studium a zhodnocení poptávek po distribuci kávy z Ekvádoru

Bc. Eliška Jandová (M2)

Školitel: Ing. Petra Zemanová, Ph.D.

Tato práce se zaměřuje na problematiku distribuce kávy z Ekvádoru do sídla české pražírny výběrové kávy Dos Mundos. Transport většího množství takové suroviny vyžaduje důmyslné logistické řešení s ohledem na výběr vhodné dopravní sítě, nákladovost nebo časovou náročnost přepravy. Náplní této práce tedy bylo provést průzkum poptávek vybraných distributorů, porovnat jejich nabídky a pražírně poskytnout informace, které mohou vylepšit její finanční stav, a přitom vyhovět požadavkům zákazníků.

Lean management

MÍSTO: C12

KOMISE

doc. Ing. Jan Rančák, CSc. (předseda)

Ing. Dana Strachotová, Ph.D.

Mgr. Ing. Marek Boteck, Ph.D.

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 [Bc. Vladimír Fedotov](#) (M2, Ing. Dana Strachotová, Ph.D.)

Standardizace jako nástroj pro zvyšování produktivity práce

08:45 [Bc. Petr Holánek](#) (M2, doc. Ing. Jan Rančák, CSc.)

Standardizace práce ve výrobním procesu

09:00 [Bc. Michaela Kolářová](#) (M2, Ing. Jiří Klečka, Ph.D.)

Analýza výrobní linky z hlediska principů štíhlé výroby

09:15 [Bc. Dina Sizova](#) (M2, Ing. Dana Strachotová, Ph.D.)

Uplatnění pracovních studií v laboratoři

09:30 [Bc. Zuzana Kostičová](#) (M2, Mgr. Ing. Marek Boteck, Ph.D.)

Implementace Lean při kompletaci zakázky

09:45 [Bc. Lenka Adamová](#) (M2, Mgr. Ing. Marek Boteck, Ph.D.)

Zvýšení výkonu balicí linky pro expedici do zámoří

vyhlášení výsledků

Standardizace jako nástroj pro zvyšování produktivity práce

Bc. Vladimír Fedotov (M2)

Školitel: Ing. Dana Strachotová, Ph.D.

Této práci byla napsána na základě zkušeností získaných v průběhu práce ve společnosti API s.r.o. K analýze pracovníků byli využity znalosti získané v průběhu studie na VŠCHT Praha zejména předmětu Průmyslové Inženýrství a na základě norem provádění podobných činností ve společnosti API s.r.o. Cílem práce ve společnosti API s.r.o. byl odhad průměrné přírážky pro jednotlivé pracovníky, čas trvání analýz a případně zjištění nedokonalostí v jejich práci nebo pracovních postupů v Unipetrol a.s. pomocí využití metod časových studie – snímkování pracovního dne. Této údaje se mohl využít management pro stanovení kapacity a kapacitních rezerv pracovní síly pro podnikové záměry. Další teoretický cíl bylo provést rešerši postupů vedoucích ke zvyšování produktivity a odstraňování plýtvání. Výsledkem prováděné práce je důkladný rozbor času několika pracovníků, které vykonávali různé činnosti v průběhu své práce s upozorněním na momenty, na které by bylo nutné zaměřit managementu.

Standardizace práce ve výrobním procesu

Bc. Petr Holánek (M2)

Školitel: doc. Ing. Jan Rančák, CSc.

Práce se zabývá zlepšením výrobního procesu a vytvoření standardizované práce na pracovišti v Faurecia Bakov. Vytvoření standardu práce je velmi komplikovaný proces s nezbytnou kooperací více oddělení pro zabezpečení technologických, kvalitativních i bezpečnostních kritérií. Cílem práce bylo zvýšení hodinového výstupu na tomto kritickém pracovišti. Vytvořená standardizovaná práce byla zavedena do výrobního procesu a bylo sledováno, jaký vliv na výstup z linky má tato změna při důsledném dodržování standardizované práce.

Analýza výrobní linky z hlediska principů štíhlé výroby

Bc. Michaela Kolářová (M2)

Školitel: Ing. Jiří Klečka, Ph.D.

Tento semestrální projekt se zabývá popisem některých nástrojů štíhlé výroby a jejich použitím v konkrétním výrobním podniku. Praktická část projektu je rozdělená do tří dílčích částí. V první části projektu je použita Paretova analýza pro vyhodnocení důležitosti a významnosti jednotlivých skupin příčin nedodržení normy a pro zobrazení nejčastějších příčin je dále použit Ishikawův diagram. Další část projektu se zabývá porovnáním výkonu vybrané linky před a po mírné změně layoutu linky. V poslední části je provedeno porovnání vlastního časového snímkování pracovníka s podnikovými podklady a zároveň s teoretickými poznatky o časových studiích.

Uplatnění pracovních studií v laboratoři

Bc. Dina Sizova (M2)

Školitel: Ing. Dana Strachotová, Ph.D.

Produktivita práce je jeden z faktorů, který rozhoduje o úspěšnosti podniku na trhu. Proto všechny úspěšné firmy neustále usilují o zvyšování produktivity práce a toto téma je nikdy nekončícím úkolem mnoha průmyslových inženýrů po celém světě. Tato práce se zabývá především uplatněním pracovních studií v laboratoři. Práce byla vykonávána v rámci letní praxe ve společnosti API s.r.o. V teoretické části práce se popisují způsoby analýzy a měření práce, druhy pracovních studií, provádí se srovnání uplatnění časových a pohybových studií. Cílem praktické části bylo s použitím časových studií, a konkrétně snímkování pracovního dne, analyzovat práci zaměstnanců v chemické laboratoři, zpracovat získané výsledky a odhalit zdroje plýtvání, případně neefektivního využití pracovní doby.

Implementace Lean při kompletaci zakázky

Bc. Zuzana Kostičová (M2)

Školitel: Mgr. Ing. Marek Boteck, Ph.D.

Filosofie „Lean“ je v současnosti velmi populární a stává se součástí většiny průmyslových podniků. Metodika Lean se zaměřuje na zlepšování procesů a identifikace plýtvání. Presentovaná práce vzešla z praxe v dynamické a rychle se rozvíjející společnosti. Zaměřuje se na optimalizaci balícího pracoviště při kompletaci zakázky dané společnosti. Cílem této práce bylo doporučit vhodnější uspořádání pracoviště a zefektivnit pracovní postup na něm. Nejprve byla vybrána vhodná metodika provykonání analýzy daného pracoviště. Výsledky analýzy dat byly zpracovány a použity k vypracování modelů pracoviště. Byl vytvořen efektivní pracovní postup a navrženo nové uspořádání pracoviště. Na závěr práce byla vykonána analýza rizik.

Zvýšení výkonu balicí linky pro expedici do zámoří

Bc. Lenka Adamová (M2)

Školitel: Mgr. Ing. Marek Botek, Ph.D.

Ani sebelepší nápad nepřinese chtěný výsledek bez správné realizace. Podnik, který chce být konkurenceschopný a chce generovat požadovaný zisk, musí umět pružně reagovat na poptávku zákazníka. Cílem této práce je detailně popsat situaci v podniku, kdy je potřeba zvýšit výkon balicí linky. První část práce je věnována teorii týkající se štihlé výroby, pro níž je klíčová práce zaměstnanců. V druhé části jsou popsány všechny kroky, které předcházely zvýšení výkonu konkrétní balicí linky. Na závěr jsou diskutovány doporučení pro udržení optimálního chodu linky.