



FAKULTA
CHEMICKO-INŽENÝRSKÁ
VŠCHT PRAHA

Studentská Vědecká Konference

2017

20. 11. 2017

SBORNÍK ANOTACÍ

DĚKUJEME ZA PODPORU VŠEM NAŠIM SPONZORŮM

ZeNTIVA



ŠKODA



Lonza





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

837 Ústav ekonomiky a managementu

Mgr. Ing. Marek Botek, Ph.D.

444 Ústav fyziky a měřicí techniky

doc. Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.

445 Ústav počítačové a řídicí techniky

Ing. Iva Nachtigalová, Ph.D.



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



MERCK

Analytická chemie I

MÍSTO: A105

KOMISE

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

Mgr. Alla Sinica, Ph.D.

Ing. Gabriela Broncová, Ph.D.

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

PROGRAM

08:30 **zahájení**

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

Konjugace zlatých nanočástic s různými typy biomolekul

08:45 [Bc. Thuy Bui Duong](#) (M2, Ing. Martin Člupek, Ph.D.)

Vibračně spektroskopické studium stimulujících alkaloidů s využitím Ag hydrosolů

09:00 [Bc. Johanna Kozánková](#) (M2, doc. Ing. Vladimír Setnička, Ph.D.)

Identifikace padělků přípravků pro léčbu erektilní dysfunkce Ramanovou spektroskopií

09:15 [Bc. Ondřej Mrkos](#) (M2, Ing. Martin Člupek, Ph.D.)

Studium povrchových vrstev oligopeptidů deponovaných na SERS aktivní substrát

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

Studium nové syntetické drogy butylonu v roztoku metodami molekulové spektroskopie

09:45 [Bc. Oleksandr Volochanskyi](#) (M1, Ing. Vadym Prokopec, Ph.D.)

Využití spektroskopie povrchem zesíleného Ramanova rozptylu pro detekci a identifikaci lékařsky významných alkaloidů

vyhlášení výsledků

Konjugace zlatých nanočástic s různými typy biomolekul

Bc. Judita Arnoštová (M2)

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

Zlaté nanočástice jsou v posledních letech významné pro různá odvětví chemie. Kromě např. cíleného transportu léčiv jsou tradičně využívány i pro detekci výsledků imunochromatografických testovacích souprav. Cílem práce je připravit stabilní, modifikované nanočástice zlata pro následnou konjugaci s aminoderiváty steroidů cholesterolu a kortizolu [KZ1] [AJ2] tak, aby výsledný konjugát nanočástice-steroid bylo možné využít pro konstrukci imunochromatografické testovací soupravy pro detekci steroidů v klinickém vzorku. V tomto příspěvku je popsána úspěšná příprava nanočástic zlata ve vodě a v ethanolu a následné experimenty s jejich modifikací kyselinou 3-merkaptopropanovou a konjugací s benzylaminem. Benzylamin byl zvolen jako modelová látka pro ověření, zda konjugace bude proveditelná i pro zmiňované steroidy. Výsledky byly analyzovány pomocí UV/VIS spektrometrie a Ramanovy spektroskopie. Obtížná detekce výsledků reakcí pomocí Ramanovy spektroskopie u vzorků nanočástic v ethanolu, které byly pro konjugaci s benzylaminem převedeny do THF (použitá rozpouštědla poskytují velmi silné signály) vedla k závěru, že další vývoj této práce bude směřovat k využití nanočástic ve vodném prostředí a ke snaze o konjugaci se steroidy ve vhodně zvolených, s vodou mísitelných rozpouštědlech.

Vibračně spektroskopické studium stimulujících alkaloidů s využitím Ag hydrosolů

Bc. Thuy Bui Duong (M2)

Školitel: Ing. Martin Člupek, Ph.D.

Důležitou roli v oblasti forenzní chemie hraje Ramanova spektroskopie, která dokáže spolehlivě analyzovat kriminalistické stopy. Jedná se zejména o biologické materiály, oděvní vlákna nebo návykové látky. Pro potřebu stanovení stopových množství je použití Ramanovy spektroskopie omezené, protože její limit detekce se pohybuje kolem koncentrace $10^{-2} \text{ mol L}^{-1}$. Řešení nabízí metoda povrchem zesíleného Ramanova rozptylu (zkr. SERS – Surface Enhanced Raman Scattering), která snižuje limit detekce až do koncentrace $10^{-9} \text{ mol L}^{-1}$. K zesílení signálu dochází na povrchu plasmonických nanočástic kovů, na něž se adsorbují jednotlivé analyty. Cílem tohoto projektu je prozkoumat využití Ag hydrosolů při detekci kofeinu, který zde slouží jako zástupce stimulujících alkaloidů. Proměření kofeinu deponovaném na Ag hydrosolech v rozsahu koncentrací od 10^{-3} do $10^{-9} \text{ mol L}^{-1}$ byla získána SERS spektra, ze kterých byl sestaven kalibrační model pomocí metody částečných nejmenších čtverců (zkr. PLS – partial least squares) a zhodnocena spolehlivost pomocí hodnoty indexu výkonnosti (performance index).

Identifikace padělků přípravků pro léčbu erektilní dysfunkce Ramanovou spektroskopií

Bc. Johanna Kozánková (M2)

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

S neustále se zvyšující poptávkou po léčivých přípravcích roste rok od roku i počet jejich padělků, což má za následek negativní dopad na světovou ekonomiku a veřejné zdraví. Novou hrozbu pro vyspělé země představují nelegální internetové lékárny nabízející širokou škálu léčivých přípravků neznámého původu. Populární skupinou takto prodávaných léčiv jsou tzv. „lifestyle drugs“ (léky zlepšující kvalitu života). K těm se řadí i na lékařský předpis vázané inhibitory fosfodiesterázy pátého typu (PDE-5) pro léčbu erektilní dysfunkce. V této práci byly nejprve analyzovány základní fyzikální vlastnosti (vzhled, hmotnost a rozměry) tablet odvozených od originálních přípravků Viagra® a Cialis®. K identifikaci jejich padělků byla použita také Ramanova spektroskopie, jakožto rychlá a nedestruktivní analytická metoda. Na základě porovnání Ramanových spekter podezřelých tablet se spektry originálních přípravků bylo možné jednoznačně identifikovat padělky. Za účelem spolehlivé identifikace charakteristických spektrálních pásů byla rovněž provedena interpretace Ramanových spekter standardů léčivých látek obou přípravků.

Studium povrchových vrstev oligopeptidů deponovaných na SERS aktivní substrát

Bc. Ondřej Mrkos (M2)

Školitel: Ing. Martin Člupek, Ph.D.

Oligomerní peptidické řetězce jsou nezbytné látky pro živý organismus, ve kterém mají široké uplatnění. Účinným nástrojem pro jejich studium je metoda povrchem zesíleného Ramanova rozptylu (SERS – Surface Enhanced Raman Scattering). Je to rychlá a nedestruktivní metoda. Hlavní výhoda této metody spočívá v její citlivosti, kdy dokáže detegovat analyt v řádově nižších koncentracích než běžné metody vibrační spektroskopie, mnohdy i pod jejich detekčním limitem. Citlivost je způsobena zesílením signálu analytu deponovaného na SERS aktivní substrát. Cílem této práce je vývoj metodiky a studium vybraných oligopeptidů deponovaných na SERS aktivní substrát. Příprava a měření bylo provedeno s dipeptidem glycyl-tryptofan a tripeptidem arginin-glycyl-asparagin. Pro zesílení byl použit zlatý a stříbrný povrch. Naměřená spektra byla vyhodnocena metodou analýzy hlavních komponent.

Studium nové syntetické drogy butylonu v roztoku metodami molekulové spektroskopie

Bc. Dita Spálovská (M2)

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

Nové syntetické drogy jsou v současné době oblíbenou alternativou k nelegálním omamným a psychotropním látkám, jejichž strukturu a účinky napodobují. Jejich dostupnost se stále zvyšuje, každoročně přibývá i celkový počet zjištěných drog. Proto je vyžadována rychlá a spolehlivá analýza, stejně jako vývoj metod pro detailní studium struktury těchto látek. Metody molekulové spektroskopie představují jeden z efektivních nástrojů pro identifikaci a analýzu nových syntetických drog, přičemž chiroptické metody mohou poskytnout detailnější informace o jejich 3D struktuře, což je klíčové pro studium biologické aktivity v organismu. Tato systematická strukturní studie jedné z nových syntetických drog butylonu v roztoku využívá konvenční metody infračervené a Ramanovy spektroskopie a navíc, jelikož je látka opticky aktivní, i metody vibračního a elektronového cirkulárního dichroismu v kombinaci s *ab initio* výpočty. Pomocí kvantově chemických simulací se zahrnutím vlivu rozpouštědla bylo nalezeno 6 stabilních konformerů butylonu, pro něž byla popsána molekulární struktura na atomární úrovni a na základě Boltzmannova rozdělení odhadnuto jejich relativní rovnovážné zastoupení. Velmi dobrá shoda simulovaných a experimentálních spekter také umožnila určení absolutní konfigurace enantiomerů.

Využití spektroskopie povrchem zesíleného Ramanova rozptylu pro detekci a identifikaci lékařsky významných alkaloidů

Bc. Oleksandr Volochanskyi (M1)

Školitel: Ing. Vadym Prokopec, Ph.D.

Metody povrchem zesíleného Ramanova rozptylu (Surface-Enhanced Raman Scattering, SERS), umožňují výrazné zesílení spektrální odezvy analytů deponovaných na kovové plasmonické substráty (typicky až 10^6 , nejběžněji se používají Au, Ag, Cu) a díky tomu lze detegovat látky i ve velmi nízkých koncentracích. Látky s relativně vysokou afinitou ke kovovému povrchu (lze je snadno adsorbovat) ve své struktuře často obsahují heteroatomy. Těmito látkami jsou např. sekundární metabolity rostlin, kam patří zejména alkaloidy, protože obsahují heterocyklicky vázaný dusík. Obecně mezi alkaloidy patří látky nejrůznější povahy, pro člověka jsou však významné především ty s lékařským využitím. Dlouhodobě známým alkaloidem s lékařským potenciálem je atropin, jenž má využití např. v očním lékařství, uvolnění křečí hladkého svalstva, Parkinsonovy choroby, protijed při otravách insekticidy. Další významnou látkou tohoto typu je pergolid, jenž působí jako agonista na dopaminových a serotoninových receptorech (léčivo Parkinsonovy choroby). Cílem této práce je studium využití SERS spektroskopie s různými excitačními vlnovými délkami (785 a 1064 nm) pro detekci a identifikaci atropinu a pergolidu na základě přiřazení zesílených charakteristických pásů konkrétním vibračním funkčním skupin.

Analytická chemie II

MÍSTO: A21

KOMISE

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

Ing. Vadym Prokopec, Ph.D.

Ing. Patrik Kania, Ph.D.

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

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 [Bc. Jitka Bartnická](#) (M2, Mgr. Tereza Uhlíková, Ph.D.)

Fononové vibrace v krystalu Ambroxolu

08:45 [Bc. Jana Burianová](#) (M2, prof. RNDr. Pavel Matějka, Ph.D.)

Application of various analytical techniques for characterization and rational solid form selection of investigated antidiabetic drug

09:00 [Bc. Jana Křivanová](#) (M2, prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka)

Využití polymerních micel na bázi hyaluronanu při studiu transdermální prostupnosti léčiv

09:15 [Bc. Kateřina Luková](#) (M2, Mgr. Tereza Uhlíková, Ph.D.)

Vysoce rozlišené rotační spektrum 1,2,3,4-tetrahydrochinolinu

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

Optimalizace postupů pro ¹H NMR analýzu metabolitů v krevní plazmě

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

Příprava a charakterizace křemičitých nanočástic pro stanovení pH

vyhlášení výsledků

Fononové vibrace v krystalu Ambroxolu

Bc. Jitka Bartnická (M2)

Školitel: Mgr. Tereza Uhlíková, Ph.D.

Tato práce je zaměřena na fononové vibrace v krystalu Ambroxol hydrochloridu. Z kvantové mechaniky je známo, že energie harmonického oscilátoru je kvantována, podobně je kvantována i energie mřížkové vibrace v krystalu – fonon = kvantum vibrací v krystalu. Fonony dokáží vysvětlit některé vlastnosti pevné fáze, např. teplotu tání, tepelnou a elektrickou vodivost nebo strukturní (ne)stabilitu. Z uvedených důvodů je studium fononů zajímavé. Zaměřujeme se na teoretický výpočet těchto fononových vibrací Ambroxol hydrochloridu, který se provede metodou Hartree-Fock s bází STO-3G, na základě vypočtených konstant se získá rotačně vibrační spektrum, které bude porovnáno s experimentálně získaným terahertzovým spektrem krystalické látky Ambroxol hydrochlorid. K výpočtu teoretického spektra je využit programový balík CRYSTAL k získání vstupních dat pro výpočty, které následně probíhají na vzdálených počítačích metacentra (www.metacentrum.cz). Jako analytická metoda k naměření spektra Ambroxol hydrochloridu byla vybrána Terahertzová spektroskopie, kvůli nedestruktivnímu charakteru této metody, jednoduché přípravě vzorků a schopnosti měření kratších vlnových délek vibrací krystalu, které byly dříve měřeny obtížnějšími technikami založených na rozptylu neutronů nebo rentgenových paprsků.

TRANSFORMATION MAP OF SOLID FORMS OF INVESTIGATED ANTIDIABETIC DRUG

The diagram illustrates the transformation pathways between different solid forms of an antidiabetic drug:

- Hydrate (H) to Form III:** Stability tests at 25 °C 75 % RH (180 days), 40 °C 0/3/75 % RH (180 days), 60 °C 33/75 % RH (180 days), and 80 °C 0 % RH (3 days).
- Form III to Hydrate (H):** Transformation in suspension; methyl isobutyl ketone at 25 °C, 14 days.
- Form III to Amorphous (A):** Transformation in suspension.
- Amorphous (A) to Form III:** Transformation in suspension.
- Form III to Form II:** Transformation in the melt at -172 °C; continuing of hydrate conversion.
- Form II to Form III:** Transformation in suspension.
- Form II to Form I:** Transformation in the solid above 95 °C.
- Form I to Form II:** Transformation in suspension.
- Form I to Form III:** Transformation in the melt at -172 °C.

Legend:

- Not completed reversible conversion
- ⇌ Not completed conversion
- Complete conversion

Comment: Reproduction of Form IV and V failed.

*Transition temperature Tt

Využití polymerních micel na bázi hyaluronanu při studiu transdermální prostupnosti léčiv

Bc. Jana Křivanová (M2)

Školitel: prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka

Nanorozměrové materiály typu micel jsou v současné době často skloňovány v souvislosti s transdermální penetrací, jakožto akceleranty asociovaných látek přes *stratum corneum*. Vzhledem k velikosti těchto nosičových systémů hrozí, kromě chtěné zvýšené propustnosti léčiva, nebezpečí penetrace i samotné polymerní matrice do hlubších vrstev kůže. Aby bylo minimalizováno riziko akumulace neodbouratelných částic v těle, jsou polymery pro přípravu nosičových systémů připravovány z biodegradabilních a biokompatibilních materiálů. Takovým materiálem je kyselina hyaluronová (HA), která tvoří většinu kožní extracelulární matrix a přirozeně se vyskytuje v epidermis i v dermis. Cílem této práce je vyhodnocení penetrační aktivity několika vzorků HA o různé molekulové hmotnosti a výběr nejvhodnější HA pro syntézu micelárních nosičů s vhodně vybranými účinnými látkami a jejich následnou analýzu. Kožní propustnost je sledována in vitro především za použití Franzových difuzních cel, kdy vhodným modelem pro testování prostupnosti léčiv je prasečí kůže. Ve vybraných případech budou měřeny a interpretovány kinetické série vibračních spekter, umožňující sledovat změny v samotné kůži. Výsledky práce budou dále využity k vyhodnocení dat industriální použitelnosti hyaluronanu pro topické podání léčiv.

Vysoce rozlišené rotační spektrum 1,2,3,4-tetrahydrochinolinu

Bc. Kateřina Luková (M2)

Školitel: Mgr. Tereza Uhlíková, Ph.D.

Emisní rotační spektroskopie představuje neotřelou analytickou techniku vyznačující se především značnou přesností poskytovaných výsledků. Právě tato technika společně s kvantově-chemickými výpočetními metodami byla použita pro získání přesných hodnot spektroskopických a geometrických parametrů molekuly 1,2,3,4-tetrahydrochinolinu, sloučeniny s mnohými biologickými a farmakologickými účinky. Pomocí kvantově-chemické výpočetní metody založené na teorii funkcionálu hustoty byl identifikován jediný stabilní položidličkový konformer této molekuly. Následně pro něj byly vypočítány analytické druhé derivace, na jejichž základě byla vytvořena predikce vysoce rozlišeného rotačního spektra. S její pomocí bylo ve frekvenční oblasti 7 až 20 GHz změřeno 60 rotačních přechodů s rozlišenou hyperjemnou strukturou hladin. Analýzou získaných dat byly stanoveny hodnoty rotačních, centrifugálně distorzních a kvadrupólových konstant, jež jednoznačně definují geometrii studovaného konformeru.

Optimalizace postupů pro ^1H NMR analýzu metabolitů v krevní plazmě

Bc. Lenka Michálková (M2)

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

Metabolomika je rychle se rozvíjející obor zabývající se studiem především nízkomolekulárních látek (metabolitů), které poskytují informace o fyziologickém stavu organismu. Záměrem metabolomických analýz je sledovat výkyvy endogenních metabolitů a určit tak jejich vztah se specifickými patofyziologickými podmínkami. K tomu jsou jako hlavní profilovací techniky využívány hmotnostní spektrometrie a spektroskopie nukleární magnetické rezonance (NMR). Cílem této práce byla ^1H NMR analýza nízkomolekulárních metabolitů v krevní plazmě. Hlavním úkolem bylo nalezení optimálních podmínek přípravy vzorku i následných parametrů měření s ohledem jak na kvalitativní, tak i kvantitativní analýzu. Výsledky analýzy plazmy pomocí pulsní sekvence CPMG filtrující široké signály proteinů a lipidů byly porovnány s výsledky po odfiltrování látek s vyšší molekulovou hmotností. Především z hlediska kvantitativní analýzy metabolitů se vhodným přístupem ukázalo měření ^1H spekter filtrované plazmy, pro kterou byla zároveň provedena optimalizace kroků nezbytných pro samotné měření (odstranění glycerolu z membrány filtrů a následná úprava pH vzorku). Dalším záměrem je statistické zpracování získaných metabolomických dat s cílem nalézt nové biomarkery karcinomu slinivky břišní.

Příprava a charakterizace křemičitých nanočástic pro stanovení pH

Bc. Aneta Motýčková (M2)

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

V současnosti jsou vyvíjeny různé modifikace povrchu nanočástic i možnosti navázání určitých látek do nanočástic s aplikacemi v medicíně za účelem diagnostiky a cílené léčby. Tato práce byla věnována přípravě křemičitých nanočástic, jejich povrchové modifikaci různými fluorescenčními látkami a následné charakterizaci připravených nanočástic. Byly také studovány fluorescenční vlastnosti připravených modifikovaných nanočástic v závislosti na pH. Křemičité nanočástice byly připraveny alkalickou hydrolýzou tetraethoxysilanu a na jejich povrch byly navázány fluorescenční látky. Připravené nanočástice byly charakterizovány transmisním elektronovým mikroskopem, Ramanovou a infračervenou spektrometrií a termogravimetrickou analýzou. Bylo zjištěno, že intenzita fluorescence nanočástic modifikovaných fluoresceinem a rhodaminem závisí na pH vodného roztoku v rozmezí od 5 do 7,5 a nezávisí na koncentraci nanočástic, čehož může být využito pro zjištění pH uvnitř buněk.

Analytická chemie III

MÍSTO: A238 - SEKRETARIÁT

KOMISE

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

doc. Ing. Ivan Víden, CSc.

Ing. Antonín Kaňa, Ph.D.

PROGRAM

08:30 **zahájení**

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

Stanovení vybraných kanabinoidů v modelu transdermálního přenosu s využitím chromatografických metod

08:45 [Bc. Martina Hegrová](#) (M2, doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.)

Studium selektivity připraveného komplexačního činidla k fosfátovým skupinám kapilární elektroforézou

09:00 [Bc. Markéta Kašparová](#) (M2, prof. RNDr. Štěpán Urban, CSc.)

Sorbenty pro forenzní odorologii

09:15 [Bc. Beáta Tóthová](#) (M2, Ing. Oldřich Vyhnálek, CSc.)

Analýza degradačních produktů HMTD metodou GCMS

09:30 [Bc. Anastasiia Tulupova](#) (M1, Ing. Gabriela Broncová, Ph.D.)

Studium vlastností elektropolymerní vrstvy na bázi 4-amino-2,1,3-benzothiadiazolu

09:45 [Bc. Lenka Vatrsková](#) (M1, doc. Mgr. Taťjana Šiškanova, CSc.)

Elektrochemické senzory pro detekci psychoaktivních látek ze skupiny kationů

10:00 [Bc. Aneta Vobinušková](#) (M2, doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.)

Separace methoxetaminu a jeho metabolitů kapilární elektroforézou

vyhlášení výsledků

Stanovení vybraných kanabinoidů v modelu transdermálního přenosu s využitím chromatografických metod

Bc. Šárka Bicanová (M2)

Školitel: doc. Dr. RNDr. David Sýkora

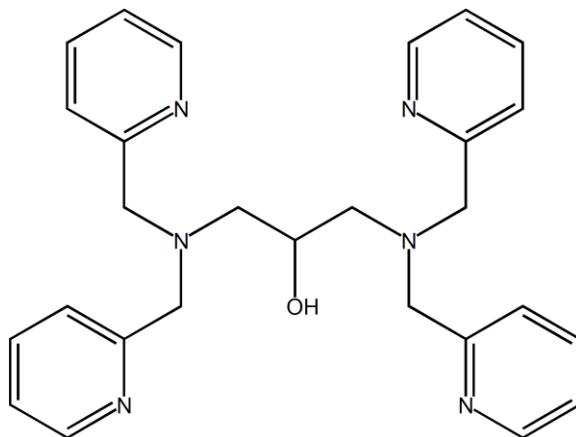
Konopí seté (*Cannabis sativa*) je používáno pro své léčivé účinky již několik tisíc let. Za jeho farmakologické účinky jsou zodpovědné látky v něm obsažené, a to především kanabinoidy. Konopí je ale často zneužíváno pro své psychoaktivní účinky vyvolané přítomným Δ^9 -tetrahydrokanabinolem (Δ^9 -THC) a patří mezi nejzneužívanější drogy na světě. Mnohé další kanabinoidy ale psychoaktivní efekt nemají a nabízejí široké spektrum účinků terapeutických (analgetické, anti-emetické, hojivé) a jsou úspěšně využívány v kosmetice. Transdermální podání léčiv obchází metabolismus prvního průchodu játry, a tím umožňuje lokální působení přesně v žádaných oblastech. Transdermální přenos kanabinoidů do krevního oběhu zatím není doposud spolehlivě popsán. Cílem této práce je v modelu simulujícím transdermální přenos stanovit obsah vybraných kanabinoidů a jejich metabolitů jak ve vrstvách kůže, tak v receptorové tekutině napodobující krevní sérum. Pro tento experiment byla vyvinuta a optimalizována metoda HPLC-MS/MS. V metodě je aplikována gradientová eluce a pro identifikaci a kvantifikaci analytů využita technika MRM. Doposud byla zjištěna výtěžnost extrakce analytů z receptorové tekutiny metodami SPE a LLE s precipitací bílkovin.

Studium selektivity připraveného komplexačního činidla k fosfátovým skupinám kapilární elektroforézou

Bc. Martina Hegrová (M2)

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

Biologicky významné látky s fosfátovou skupinou jsou sloučeniny různé chemické struktury a velikosti. Významná skupina těchto látek jsou nukleotidy, které jsou nezbytné pro správnou funkci organismu. Tato práce se zabývá studiem selektivity připraveného komplexačního činidla (viz obrázek) k fosfátovým skupinám. Analýza byla prováděna pomocí kapilární elektroforézy a jako analyty byly použity nukleotidy (monofosfáty, ale také difosát či trifosfát), karboxylové kyseliny (benzoová kyselina, acetylsalicylová kyselina a ibuprofen) a adenosin. Selektivita byla zkoumána při různém pH (3; 7,5; 10), které bylo dosaženo citronanovým, tris(hydroxymethyl)-aminomethanovým, resp. boritanovým pufrům. Základní elektrolyt obsahoval příslušný pufr a komplexační činidlo o koncentraci v rozmezí 0 až 300 mmol/l. Pro komplexy nukleotid-komplexační činidlo byly zjištěny podmíněné konstanty stability, které byly vypočteny nelineární regresí z dat získaných naměřených elektroforegramů. Předpoklad selektivity komplexačního činidla k fosfátovým skupinám byl potvrzen, přičemž bylo zjištěno, že při pH 7,5 vznikají stabilnější komplexy než při pH 3 a 10, kdy k interakci prakticky nedochází.



Sorbenty pro forenzní odorologii

Bc. Markéta Kašparová (M2)

Školitel: prof. RNDr. Štěpán Urban, CSc.

K odběrům pachových stop je v kriminalistice využíván textilní nosič (bavlna 74%, viskóza 16%, polyester 6%) obchodní značky ARATEX®. Jak ukazuje plynová chromatografie, pachové pozadí této textilie způsobené nečistotami je nepřiměřeně vysoké a pro chemickou analýzu pachu zcela nevhodné. Z toho důvodu se v současné době k laboratorním účelům používají skleněné kuličky, které lze snadno přechistit a opětovně používat, ale pro odběr pachu v terénu, na místě činu, jsou obtížně použitelné. Pro tyto případy by bylo žádoucí ARATEX® vhodnou optimálně přechištěnou textilií nahradit. Cílem této práce je porovnání pozadí jednotlivých pachových sorbentů: skleněných kuliček, ARATEXu®, nanotextilií ACC, PUR a PVDF a textílie od výrobce Lohmann a Rauscher. Při hledání optimálního přechištění byly jako rozpouštědla používány hexan a ethanol. Měření byla prováděna plynovou chromatografií, a to jak technikou „headspace“, tak i kapalným nástřikem. Ze zkoumaných sorbentů nejlépe vyšly skleněné kuličky, ale jak již bylo zmíněno, nejsou vhodné pro kriminalistické odběry. Proto se jako ideální sorbent pro kriminalistickou odorologii ukázala textílie od výrobce Lohmann a Rauscher s minimálním pozadím.

Analýza degradačných produktov HMTD metódou GCMS

Bc. Beáta Tóthová (M2)

Školiteľ: Ing.Oldřich Vyhnálek, CSc.

Predmetom tejto práce je peroxidová výbušnina hexametylén-triperoxid-diamín, známa pod skratkou HMTD. Jedná sa o látku často zneužívanú pri teroristických útokoch. HMTD sa vyznačuje nízkou chemickou stabilitou, rozkladá sa na prchavejšie degradačné produkty. Jeho priama analýza je zložitá, ale k detekcii je možné využiť degradačné produkty. Cieľom práce bola analýza HMTD, resp. jeho rozkladných produktov metódou GC/MS, a to priamym nástrekom roztokov v acetonitrile a dichlór-metáne pri injekčných teplotách 150 °C a 260 °C, ďalej analýza „parovej signatúry látky“ pomocou mikroextrakcie na tuhú fázu (SPME). Cieľom bolo tiež porovnanie získaných výsledkov s výsledkami uvedenými v odbornej literatúre. Boli analyzované rôzne staré vzorky poskytnuté Univerzitou v Pardubiciach. Ako rozpúšťadlo sa ukázal byť vhodnejším acetonitril. SPME analýzou sme získali rozkladné produkty, ako formaldehyd, kyselina mravčia a octová, trimetyl-amín, N,N-dimetyl-formamid, N-metyl-formamid a 1-metyl-1-H-1,2,4-triazol. Analýzou acetonitrilového roztoku pri 260 °C boli identifikované nasledujúce látky: formamid, hexametylén-tetramín, N,N'-metylénbis(formamid), 1-metylimidazolidin-2-on, kyselina iminodioctová a kyselina barbiturová. Výsledky tejto práce budú ďalej využívané pri vývoji detekčných metód.

Studium vlastností elektropolymerní vrstvy na bázi 4-amino-2,1,3-benzothiadiazolu

Bc. Anastasiia Tulupova (M1)

Školitel: Ing. Gabriela Broncová, Ph.D

V současné době jsou hledány nové elektrodové materiály s rozpoznávacími místy schopných polymerizace pro přípravu elektrochemických senzorů, které umožní použití v klinické analýze. Těmito zajímavými látkami mohou být např. deriváty thiadiazolu. Táto práce je zaměřená na přípravu a charakterizaci vodivé polymerní vrstvy na bázi 4-Amino-2,1,3-benzothiadiazolu (ABTD). Polymerní vrstva byla připravena na platinové elektrody z vodného roztoku kyseliny sírové obsahující 5 mmol l⁻¹ ABTD metodou cyklické voltametrie (CV) při rozsahu potenciálu od 0,00 V do +1,25 V vs. Ag/AgCl při počtu cyklů 25 a rychlosti scanu 50 mV s⁻¹. Výsledná polymerní vrstva byla charakterizována metodou CV a elektrochemické impedanční spektroskopie (EIS). Metoda CV prokázala, že polymerní elektrody jsou citlivé na Cu²⁺ ionty v koncentračním rozsahu od 1,99 do 9,90 μmol l⁻¹. Dále tato studie ukazuje, že mědí modifikované polymerní elektrody mohou být použity pro elektrochemickou detekci nukleotidů. Interakce mědí modifikovaných PABTD elektrod s adeninem byla pozorována pomocí EIS na základě změny odporu polymerní vrstvy z hodnoty 0,82 MOhm na 1,14 MOhm při koncentraci adeninu 0,76 μmol l⁻¹.

Elektrochemické senzory pro detekci psychoaktivních látek ze skupiny katinonů

Bc. Lenka Vatrsková (M1)

Školitel: doc. Mgr. Tatjana Šiškanova, CSc.

Cieľom tejto práce je ukázať možnosti voltametrických a potenciometrických senzorov detekcie nových psychoaktívnych látok (NPL) zo skupín aminoindánov a katinónov. Úspešnosť elektrochemickej detekcie závisí na voľbe pracovnej elektródy. V prípade voltametrického senzoru bol za materiál pracovnej elektródy zvolený skelný uhlík. V prípade potenciometrického senzoru na báze kvapalných membrán, kde je dôležitá voľba selektívneho receptora, boli otestované ionomenič (tetrafenylborát sodný, TPBNa) a neutrálne nosiče (dibenzo-18-crown-6, DB18C6; kalix[4]arén). Ukázalo sa, že i) potenciometrický senzor na báze DB18C6 preferuje primárny amín zo skupiny aminoindánov, 5,6-methylénedioxy-2-aminoindán (MDAI); ii) potenciometrický senzor na báze kalix[4]arénu preferuje sekundárny amín zo skupiny syntetických katinónov, 3,4-methylénedioxy-*N*-methyلكatinón (MDMC), iii) na rozdiel od potenciometrických senzorov, selektivita voltametrického senzoru je riadená oxidačnými vlastnosťami amino skupiny NPL.

Separace methoxetaminu a jeho metabolitů kapilární elektroforézou

Bc. Aneta Vobinušková (M2)

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

Tato práce se zabývá optimalizací podmínek, za kterých dochází k nejlepší separaci methoxetaminu (MXE) a jeho pěti metabolitů kapilární elektroforézou. Optimalizován byl typ cyklodextrinu (β -cyklodextrin, karboxymethylovaný β -cyklodextrin, sulfonovaný β -cyklodextrin, hydroxypropylovaný β -cyklodextrin a karboxymethylovaný γ -cyklodextrin) a pH elektrolytu (2,5; 3; 3,5; 4; 4,5 a 5). Nejlepší separace bylo dosaženo ve fosfátovém pufru o pH 2,5 s přidavkem 10 mmol/l β -cyklodextrinu, kdy došlo k separaci nejen jednotlivých analytů ale i k enantioseparaci tří látek. Přídavek karboxymethylovaného β -cyklodextrinu vedl k chirální separaci MXE a jeho tří metabolitů. Ostatní dva metabolity se nepodařilo chirálně oddělit. Kvantifikace účinnosti chirální separace pomocí podmíněných konstant stability byla vyhodnocena na komplexech MXE, resp. jednoho jeho metabolitu, s β -cyklodextrinem, resp. karboxymethylovaným β -cyklodextrinem.

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](#)

SPONZOŘI ÚSTAVU FYZIKÁLNÍ CHEMIE

ZeNTIVA



Authorized Distributor



Fyzikální chemie I

MÍSTO: A402

KOMISE

prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka (předseda)

Ing. Štěpán Hovorka, Ph.D.

Ing. Pavel Morávek, Ph.D.

Ing. Martin Růžička (Unipetrol)

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Bc. Tereza-Markéta Durdáková](#) (M1, doc. Ing. Ondřej Vopička, Ph.D.)

Studium objemového zbotnění polymerních membrán z PDMS a PTMSP ve směsných parách DMC a MeOH bezkontaktní metodou

09:20 [Bc. Kristián Fónod](#) (M1, doc. Ing. Ondřej Vopička, Ph.D.)

Polyvinylalkoholové hydrofilné separačné membrány: efekt polyakrylovej kyseliny ako sieťovacieho činidla na sorpčné vlastnosti

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

Vliv aditiva na limitní aktivitní koeficient ETBE ve vodě

10:00 [Bc. Dominika Kollárová](#) (M2, doc. Mgr. Michal Fárník, Ph.D., DSc.)

Elektrónmi indukovaná chémia v hexafluoropropylén oxide

10:20 [Bc. Adam Kovalčík](#) (M1, Ing. Daniel Ondo, Ph.D.)

Kalorimetrická studie kolapsačního procesu poly-N-isopropylakrylamidu ve vodných roztocích sodných a guanidných solí

10:40 [Bc. Martin Král](#) (M2, Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.)

Studium tryptofanu pomocí pokročilých technik vibrační spektroskopie a nanoskopie



11:00 [Bc. David Palounek](#) (M1, Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.)

Studium vlivu excitační vlnové délky na Ramanův a SERS signál flavonoidů

11:20 [Bc. Radek Točík](#) (M2, prof. Ing. Květoslav Růžička, CSc.)

Kalorimetrická studie vybraných chalkogenidů bismutu a antimonu

vyhlášení výsledků

Studium objemového zbotnění polymerních membrán z PDMS a PTMSP ve směsných parách DMC a MeOH bezkontaktní metodou

Bc. Tereza-Markéta Durdáková (M1)

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

Jednou z významných vlastností polymerních membrán je botnění, které lze vyjádřit jako schopnost měnit objem v prostředí separovaných látek. Znalost objemových změn může být důležitá jednak pro návrh a konstrukci separačních aparatur, jednak pro hlubší pochopení struktury a vlastností polymerů. Cílem této práce je kvantifikace botnění dvou běžně používaných polymerů pro membránové separace, kaučukovitého polydimethylsiloxanu (PDMS) a sklovitého polytrimethylsilylpropynu (PTMSP), které lze využít k separaci azeotropické směsi dimethylkarbonátu (DMC) a methanolu (MeOH). Botnění polymerních membrán bylo měřeno bezkontaktní metodou a vyhodnocováno pomocí obrazové analýzy. Tento způsob přináší velkou výhodu tím, že při něm nedochází k mechanickému namáhání membrán. Výsledkem práce je popis objemových změn v prostředí čistých látek, zejména pak v prostředí směsných par. Pro oba polymery bylo zjištěno, že objemové zbotnění roste s aktivitou měřené látky, což je v souladu s výsledky sorpčních experimentů. Zároveň, shodně pro oba polymerní materiály, způsobuje methanol menší objemovou změnu než dimethylkarbonát. Botnění ve směsných parách nelze předpovědět na základě dat o botnění v parách jednosložkových. Tato práce o botnění ve směsích proto přináší hlubší vhled do problematiky.

Polyvinylalkoholové hydrofilné separačné membrány: efekt polyakrylovej kyseliny ako sieťovacieho činidla na sorpčné vlastnosti

Bc. Kristián Fónod (M1)

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

Predmetom práce je štúdium sorpcie metanolu a dimetylkarbonátu v membránach z polyvinylalkoholu zosieťovaných polyakrylovou kyselinou. Aj napriek tomu, že sú membrány na báze zosieťovaného PVA hodne využívané pre separáciu hydrofilných látok (voda, alkoholy) zo zmesí s hydrofóbnymi látkami, je pomerne málo známy vplyv sieťovadiel na ich sorpčné vlastnosti. Pre štúdium boli vybrané membrány z PVA zosieťované s PAA, pre ktoré boli v literatúre nájdené dáta pre pervaporačné delenie zmesi azeotrop tvoriacej dvojice MeOH a DMC. Sorpčné izotermy boli namerané pri 30°C a 40°C gravimetrickou metódou s použitým McBainovej kremennej špirály. V práci boli taktiež vyhodnotené difúzne koeficienty meraných látok v membránach. Namerané sorpčné izotermy poukazujú na preferenčnú sorpciu MeOH do všetkých skúmaných membrán. Rovnako je z nich zrejmé, že so zvyšujúcim sa podielom PAA v membránach, sorpcia i difuzivita MeOH rastie. Sorpčné izotermy boli dobre vystihnuté modelom ENSIC, ktorý predpokladá dva základné módy sorpcie – sorpciu na povrchu polyméru a agregáciu sorbovaných molekúl. S rastúcim obsahom PAA rástol podiel k_p/k_s , teda klesal vplyv agregácie, zatiaľ čo rástla afinita molekúl k polymérnej matici.

Vliv aditiva na limitní aktivitní koeficient ETBE ve vodě

Bc. Patrik Hanák (M1)

Školitel: Dr. Ing. Pavel Vrbka

Palivová aditiva jsou látky, které napomáhají dokonalejšímu spalování motorových paliv a tím snižují emise ekologicky škodlivých spalin. Dvě nejvýznamnější palivová aditiva jsou terc-butyl(ethyl)ether (ETBE) a dosud nejpoužívanější terc-butyl(methyl)ether (MTBE). Avšak tyto látky jsou ekologicky problematické, neboť bylo mezitím prokázáno, že jsou zdraví škodlivé a dále už byly detekovány ve spodních vodách. V této práci byla stanovena teplotní závislost limitního aktivitního koeficientu ETBE v čisté vodě, neboť limitní aktivitní koeficient málo rozpustných látek je v úzkém vztahu s jejich rozpustností. Dále byl studován vliv anorganických solí jako přírodního aditiva na hodnotu limitního aktivitního koeficientu ETBE ve vodě, tzv. vysolovací efekt. Míra vysolování je určena tzv. Sečenovovou konstantou, která byla v této práci stanovena pro ETBE v roztoku NaCl. Tato hodnota byla porovnána s hodnotou Sečenovovy konstanty pro MTBE, čímž mohl být posouzen vliv struktury rozpuštěnce na míru vysolování. Stanovením limitního aktivitního koeficientu ETBE ve vodě s přidavkem chloridu alkalického kovu byl studován vliv velikosti kationtu na hodnotu limitního aktivitního koeficientu rozpuštěnce ve vodě.

Elektrónmi indukovaná chémia v hexafluoropropylén oxide

Bc. Dominika Kollárová (M2)

Školiteľ: doc. Mgr. Michal Fárník, Ph.D., DSc.

Fluorid sírový (SF_6) sa v priemysle využíva v elektrických rozvádzačoch vďaka svojej schopnosti zachytiť voľné elektróny. Tento plyn má ale 23000-krát väčšiu hodnotu potenciálu globálneho otepľovania ako CO_2 , čím výrazne prispieva ku skleníkovému efektu. Preto bolo cieľom tejto práce zistiť, či by mohol byť SF_6 vo vysokonapäťových spínačoch nahradený hexafluoropropylén oxidom (HFPO). V našom experimente sme študovali účinný prierez HFPO ($\text{C}_3\text{F}_6\text{O}$) pre záchyt elektrónov pomocou aparatury disociatívneho elektrónového záchytu, kde sa molekula zrážala s voľnými elektrónmi. Reakcia záchytu elektrónu viedla k vzniku dočasného záporne nabitého iónu v excitovanom stave, ktorý sa disocioval na neutrálnu molekulu a stabilný záporný ión, ktorý sme detekovali. Pre jednotlivé detekované fragmenty sme následne získali ich účinné prierezy, ktorých suma bola až 74-krát menšia ako hodnota účinného prierezu SF_6 . To znamená, že HFPO nepredstavuje vhodnú náhradu SF_6 do vysokonapäťových spínačov. Počas experimentu dochádzalo ale k silnej produkcii iónu F^- , ktorý mal najvyšší účinný prierez z detekovaných iónov, čím nám otvoril cestu k štúdiu polymerizácie HFPO. Na záver sme ešte previedli výpočty optimalizácie HFPO, vďaka ktorým sme získali prehľad o tom, kde sa molekula štiepila.

Kalorimetrická studie kolapsačního procesu poly-N-isopropylakrylamidu ve vodných roztocích sodných a guanidných solí

Bc. Adam Kovalčík (M1)

Školitel: Ing. Daniel Ondo, Ph.D.

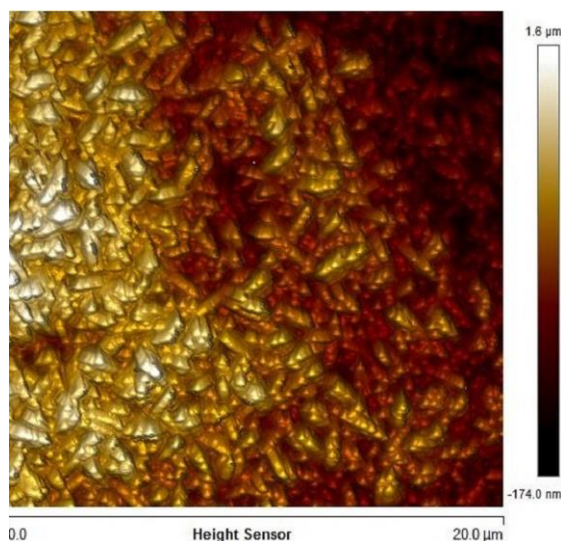
Poly-n-isopropylakrylamid (pNIPAM) je termoresponzivní polymer mající dolní kritickou rozpouštěcí teplotu (LCST) v čisté vodě kolem 33°C. Tento polymer je schopen interagovat dvojím způsobem, a to hydrofilně s vodou za tvorby rozbalené polymerní struktury a hydrofobně sám se sebou za tvorby zkolabované struktury. Přejít mezi těmito dvěma strukturami a fakt, že jeho dolní kritická rozpouštěcí teplota je blízká teplotě lidského těla, ho zařazuje mezi potenciální kandidáty na nosič léčivých látek. Cílem této práce bylo získat základní informace o termodynamickém chování tohoto polymeru ve vodných roztocích solí. Kolaps polymeru byl studován v roztocích síranů a thiokyanátů sodných a guanidných pomocí diferenční skenovací kalorimetrie (VP-DSC). Jelikož kolapsační proces nelze popsat jednoduchým dvoustavovým modelem analogickým k denaturaci proteinu, byly pozorované složitější vícestavové přechody modelovány jako součty dvoustavových procesů. Naměřená kalorimetrická data celkového kolapsačního procesu (náběhová teplota a entalpie) pNIPAMu v závislosti na molalitě a typu přidané soli jsou ve shodě s dostupnou literaturou a vysolovací efekt koreluje se strukturou soli.

Studium tryptofanu pomocí pokročilých technik vibrační spektroskopie a nanoskopie

Bc. Martin Král (M2)

Školitel: Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.

Pro pochopení biologických systémů je potřeba studovat tyto systémy na molekulární úrovni. Nejmodernější metody vibrační spektroskopie umožňují nedestruktivní a neinvazivní studium ploch o submikronových rozměrech a detekci stopových koncentrací vzorku až po detekci jednotlivých molekul. V této práci je zkoumána možnost využití povrchem a hrotem zesílené Ramanovy spektroskopie (SERS a TERS) a skenovací infračervené mikroskopie blízkého pole (SNIM) ke studiu interakcí biomolekul s povrchem plasmonických kovů. V ideálním případě lze z naměřených dat určit způsob interakce dané molekuly s použitým kovem. Jako vzorek byla vybrána aminokyselina tryptofan nanosená na zlatém nanostrukturovaném povrchu. Nanostrukturovaný zlatý povrch byl připraven galvanickým pokovením platinového plíšku v lázni obsahující dikyanozlatnan draselný. Tryptofan byl na substrát adsorbován z methanolického roztoku této aminokyseliny. Výsledky ukazují, že použité techniky jsou vhodné k detekci nízkých koncentrací tryptofanu. Zároveň naznačují, že tyto techniky je možné použít k výzkumu a analýze dalších aminokyselin, popřípadě také peptidů a bílkovin.



Studium vlivu excitační vlnové délky na Ramanův a SERS signál flavonoidů

Bc. David Palounek (M1)

Školitel: Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.

Signál Ramanova rozptylu bývá zejména u barevných látek často překryt silnějším signálem fluorescence. Řešením tohoto problému může být změna excitační vlnové délky, nebo zesílení signálu Ramanova rozptylu. V této práci byly pomocí Ramanovy spektroskopie a povrchem zesílené Ramanovy spektroskopie (z angl. SERS) zkoumány 2 zástupci fluorescenčních a 2 zástupci nefluorescenčních flavonoidů. Povrchového zesílení bylo dosaženo adsorpcí analytu z roztoku o koncentraci 10^{-4} mol/l na povrch elektrochemicky pozlaceného platinového terčíku. Pro každý analyt byla měřena Ramanova a SERS spektra při užití 4 excitačních vlnových délek od viditelné po blízkou infračervenou oblast. Výsledky ukazují, že Ramanova spektra se při užití různých excitačních vlnových délek liší pouze v intenzitě pozadí způsobeného zejména fluorescencí. V SERS spektrech byl pozorován mnohem menší vliv fluorescence. Povrchem zesílená Ramanova spektra kromě různé intenzity pozadí vykazují i odlišný spektrální průběh způsobený odlišnými mechanismy povrchového zesílení pro různé excitační vlnové délky.

Kalorimetrická studie vybraných chalkogenidů bismutu a antimonu

Bc. Radek Točík (M2)

Školitel: prof. Ing. Květoslav Růžička, CSc.

V předložené práci jsou uvedeny nově naměřené hodnoty tepelných kapacit v pevném skupenství (kalorimetry SETARAM μ DSCIIIa, Perkin Elmer DSC 8500 a PPMS) pro vybrané vrstevnaté chalkogenidy bismutu a antimonu. Konkrétně se jedná o sulfid bismutu (CAS Reg. No: 1313758-50-7), tellurid bismutu (12068-70-1), selenid bismutu (1313614-27-5), sulfid antimonu (1345-04-6), tellurid antimonu (1107553-90-1) a selenid antimonu (1315-05-5). Chalkogenidy bismutu mají široké uplatnění jako polovodičové materiály a v současné době se používají při výrobě termoelektrických generátorů a chladičů. Chalkogenidy antimonu jsou dobré polovodiče a jsou součástí fotorezistorů, termočlánků nebo infračervených a laserových nástrojů. Hojně jsou využívány jako příměsi do termoelektrických materiálů. Dostupná literární data tepelných kapacit byla v této práci srovnávána spolu s nově naměřenými hodnotami. Výsledkem jsou doporučené hodnoty tepelných kapacit v širokém teplotním rozsahu od 2 do 393 K.



Fyzikální chemie II

MÍSTO: A125

KOMISE

prof. Ing. Anatol Malijevský, CSc. (předseda)

RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.

RNDr. Eva Muchová, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Bc. Kryštof Březina](#) (M1, prof. RNDr. Pavel Jungwirth, DSc.)

Improving Molecular Dynamics Simulations: Effectively Accounting for Electronic Polarization in Non-Polarizable Force Fields

09:20 [Bc. Jiří Janek](#) (M1, prof. RNDr. Jiří Kolafa, CSc.)

Modifikace prediktoru Gearových integračních metod pro dosažení lepší časové reverzibility

09:40 [Bc. Radka Kittova](#) (M2, prof. RNDr. et Bc. Petr Slavíček, Ph.D.)

MD simulácie vodných kvapôčiek a ľadíkov v kondenzovanej fáze

10:00 [Bc. Martin Klíma](#) (M1, prof. RNDr. Jiří Kolafa, CSc.)

Nukeace vody a argonu při supersonické expanzi

10:20 [Bc. Jaroslav Sita](#) (M1, prof. RNDr. et Bc. Petr Slavíček, Ph.D.)

Efektivní přístupy k modelování absorpčních spekter: (E)- a (Z)-azobenzen

10:40 [Bc. Jiří Suchan](#) (M2, prof. RNDr. et Bc. Petr Slavíček, Ph.D.)

Fotodynamické simulace experimentů s laserem v kontinuálním režimu

11:00 [Bc. Alexandr Zaykov](#) (M1, RNDr. Zdeněk Havlas, DrSc.)

Chromophores for Singlet Fission

vyhlášení výsledků

Improving Molecular Dynamics Simulations: Effectively Accounting for Electronic Polarization in Non-Polarizable Force Fields

Bc. Kryštof Březina (M1)

Školitel: prof. RNDr. Pavel Jungwirth, DSc.

Simulations of molecular dynamics (MD) are a computational method of modelling chemical systems at molecular resolution. The atomic motion within a MD simulation is described by classical mechanics. While this description offers computational efficiency and high descriptive quality, it runs into issues when facing problems of quantum nature, which is not contained in the classical description. One such issue is the *electronic polarization*, i.e. the rearrangement of electron clouds of atoms upon interaction with external electric fields. Therefore, ion-ion interactions are weakened in the condensed phase due to the electronic polarization of the solvent. These effects are not captured by standard MD simulations and appropriate corrections are necessary to obtain correct interactions. The Molecular Dynamics in Electronic Continuum (MDEC) method deals with the issue of electronic polarization in a mean-field manner. It approximates the dielectric solvent environment as a homogenous continuum, which allows one to simply scale the charges of the ions by a given factor (for water this factor is approx. 0.75) and obtain correct interactions. This work contains the basics of the MDEC theory and a few illustrative cases of its implementation and use in the usual MD practice.



Modifikace prediktoru Gearových integračních metod pro dosažení lepší časové reverzibility

Bc. Jiří Janek (M1)

Školitel: prof. RNDr. Jiří Kolafa, CSc.

Numerické metody pro řešení obyčejných diferenciálních rovnic druhého řádu jsou hlavním matematickým nástrojem molekulární dynamiky (MD). Důležitou třídou těchto metod jsou metody typu prediktor–korektor. Hlavní nevýhodou při jejich použití pro integraci Newtonových pohybových rovnic je jejich časová ireverzibilita, která se projevuje tím, že se v průběhu simulace nezachovává energie. Hlavním cílem této práce je dosáhnout lepší časové reverzibility vhodnou úpravou prediktoru a korektoru Gearových metod čtvrtého, pátého a šestého řádu s přihlédnutím ke stabilitě takto vzniklých metod. V předešlé práci jsem ukázal, že tento cíl není dosažitelný prostou změnou posledních koeficientů korektoru. V této práci ukážu, že zlepšení lze dosáhnout komplexnějšími změnami korektoru, které lze odvodit na základě požadavku na zachování řádu metody. Testy provedené na harmonickém oscilátoru a jednoduchém MD systému složeném z 16 atomů argonu ukazují, že nové metody vedou za cenu poněkud menší stability k lepšímu zachování energie.

MD simulácie vodných kvapôčiek a ľadíkov v kondenzovanej fáze

Bc. Radka Kittova (M2)

Školiteľ: prof. RNDr. et Bc. Petr Slaviček, Ph.D.

Motiváciou pre štúdium kvapiek a ľadíkov o konečnej veľkosti sú jej unikátne vlastnosti v porovnaní s klasickou kvapalnou vodou. Cieľom mojej práce je študovať chovanie a vlastnosti vodného/ľadového jadra v reverzných micelách, ktoré predstavujú unikátne médium poskytujúce široké využitie v rôznych odvetví chémie. K tomuto štúdiu som využila program Gromacs, ktorý predstavuje univerzálny balík pre výpočty klasickej molekulovej dynamiky s využitím TIP4P/2005 silového poľa. Zo simulácií systému kvapalnej vody a hexagonálneho ľadu vo vákuu a v prítomnosti chloroformu bol určený bod tuhnutia pre kvapalnú vodu v danom silovom poli a taktiež bol zistený rozdiel v správaní v závislosti na prítomnosti chloroformu. Vlastnosti vodného/ľadového jadra boli sledované o rôznych veľkostiach, z ktorých vybrané boli dve a to o počte molekúl ľadového jadra 55 a 212 a tie sme ďalej sledovali pri rôznych teplotách. Schopnosť udržateľnosti a prípadnej ďalšej kryštalizácie ľadového jadra poskytuje potrebné informácie k štúdiu kvapôčok a ľadíkov o konečnej veľkosti v reverzných micelách, kde je taktiež cieľom v súvislosti s experimentálnymi NMR meraniami objasniť formáciu ľadíkov vo vnútri miciel z kvapalnej vody o konečnej veľkosti.

Nukeace vody a argonu při supersonické expanzi

Bc. Martin Klíma (M1)

Školitel: prof. RNDr. Jiří Kolafa, CSc.

Tato práce se zabývá studiem nukleace v molekulových paprscích. Experimentálně jsou tyto paprsky realizovány expanzí plynu do vakua. Plyn prochází tryškou, ochlazuje se pod bod tuhnutí a nukleuje za vzniku klastrů různých velikostí a tvarů. Experimentální data naznačují, že takto připravené klastry mohou mít nepravidelný tvar. A právě ověření pravdivosti této domněnky prostředky molekulární dynamiky je hlavním cílem této práce. Celá MD simulace je realizována v periodickém simulačním boxu s konstantním počtem molekul. Box v průběhu simulace mění svůj objem, a to na základě závislosti hustoty na čase. Ta je předem vypočtena za předpokladu ideálního chování plynu. Změna objemu boxu kopíruje proudění tryškou a následnou expanzi do vakua. Po skončení simulace je zpětně vypočten celkový tok hmoty simulačním boxem. Ten má být konstantní. V typickém případě tomu tak ovšem není, neboť expandující plyn se nechová ideálně. Je tedy třeba provést korekci průběhu hustoty a zopakovat simulaci. Cyklus je opakován, dokud není celkový tok konstantní. Z výsledků simulací je vypočten průměrný příčný průřez a velikost klastrů. Tyto hodnoty jsou porovnávány s experimentálními daty poskytnutými skupinou M. Fárníka z Ústavu fyzikální chemie Jana Heyrovského Akademie věd České republiky.

Efektivní přístupy k modelování absorpčních spekter: (E)- a (Z)-azobenzen

Bc. Jaroslav Sita (M1)

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

Ve své práci se zabývám testováním nových přístupů k efektivnímu modelování absorpčních spekter na příkladu azobenzenu. Azobenzen je fotochromní molekulární přepínač, což znamená, že při ozáření světlem o určitých vlnových délkách přechází mezi dvěma izomerními strukturami. Ve spolupracující laboratoři doc. Hegera z Masarykovy univerzity v Brně nedávno naměřili vysoce přesná absorpční spektra (E)- i (Z)-azobenzenu, která naznačovala nesoulad s předchozími daty. Dále jimi byla změřena i teplotní závislost absorpčního spektra, přičemž diferenční spektra vykazovala vibrační strukturu. Tyto výsledky se mi podařilo v dobré shodě s experimentem zreprodukovat pomocí metod teoretické chemie. Na těchto výsledcích testuji modelování diferenčních veličin pomocí konceptu převáhování absorpčního spektra. Zde diskutuji dvě aplikace tohoto přístupu. Prvním je převáhování absorpčního spektra z jedné teploty na druhou. Při použití tohoto konceptu je možné ušetřit mnoho výpočetního času spojeného s výpočtem spekter při různých teplotách. Druhým přístupem je převáhování metody, pomocí které je spektrum modelováno. To umožňuje použití delší trajektorie molekulové dynamiky získané obecně horší a výpočetně levnější metodou pro dostání spektra na úrovni vypočtené kvalitnější metodou.

Fotodynamické simulace experimentů s laserem v kontinuálním režimu

Bc. Jiří Suchan (M2)

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

Teoretický popis fotochemických reakcí umožňuje lepší porozumění dějům, probíhajícím například v naší atmosféře. V této práci si kladu za cíl posunout metodiku v této oblasti navržením nového přístupu: molekulární dynamiky s podmínkou konstantní excitační energie. Aplikací této podmínky jsem schopen získat počáteční stavy odpovídající stavům v laserových experimentech o přesné vlnové délce/energii paprsku. Metodu testuji a aplikuji na případě freonu 12. Diskutovány jsou zajímavé trendy, vyvstávající z této podmínky. Dále provádím fotodynamické simulace a srovnávám získaná spektra vůči obvyklým metodám a experimentu.

Chromophores for Singlet Fission

Bc. Alexandr Zaykov (M1)

Školitel: RNDr. Zdeněk Havlas, DrSc.

In the prelude, a brief explanation of singlet fission phenomenon and its electronic aspects between two molecules of a chromophore is outlined and is continued with a short review of an approach to approximatively evaluate square of the matrix element, which is a part of Fermi's golden rule, through frontier orbitals model. This approximate approach permits us to search for local maxima of the said square of the matrix element that represent the optimal mutual disposition of two molecules for singlet fission. For these optimal structures, it also allows us to evaluate intermolecular interactions that could lead to Davydov splitting or too excessive binding between the monomers, both of which could affect the phenomenon detrimentally. The end of the overture also partially covers the latest advances in the model. The pinnacle is the transformation of the gained knowledge from the calculation of 7,14-diphenyldiindolo[3,2,1-de:3',2',1'-ij][1,5]naphthyridine-6,13-dione, so called Cibalackrot, using a Fortran written program and the past knowledge of synthesis of its derivatives into a concrete look of a molecule that could support the phenomenon – therefore, the setting up and the later achievement of a synthetic goal.

Fyzikální chemie III

MÍSTO: A135

KOMISE

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

Ing. Ctirad Červinka, Ph.D.

Dr. Ing. Pavel Vrbka

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Michal Belina](#) (B3, prof. RNDr. Petr Slaviček, Ph.D.)

Radikálové kationty v difúzních interstelárních pásech: modelování spekter

09:20 [Stanislav Chvíla](#) (B3, prof. RNDr. et Bc. Petr Slaviček, Ph.D.)

Reaktivita v tripletním stavu v chemii atmosféry

09:40 [Jan Poštulka](#) (B3, prof. RNDr. Petr Slaviček, Ph.D.)

Molekulární model organických aerosolů: teoretické studium klastrů pinenu a vody

10:00 [Ondřej Kolín](#) (B3, doc. Ing. Vladimír Dohnal, CSc.)

Rovnováha kapalina-pára ve vodných roztocích γ -butyrolaktonu a γ -valerolaktonu

10:20 [Andrea Pavlíková](#) (B3, Ing. Alena Randová, Ph.D.)

Možnost použití viskozity pro stanovení koncentrace sodium dodecyl sulfátu ve vodě

10:40 [Štěpán Tvrdý](#) (B3, Ing. Pavel Morávek, Ph.D.)

Rozpustnost CO_2 v iontových kapalinách saturační metodou

vyhlášení výsledků

Radikálové kationty v difúzních interstelárních páslech: modelování spekter

Michal Belina (B3)

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

Radikálové kationty polycyklických aromatických uhlovodíků jsou horkými kandidáty na původce tzv. difúzních interstelárních pásů. Bohužel podmínky pro získání experimentálních dat jsou značně složité, ve své práci se proto snažím o získání spekter s využitím teoretických metod. K tomu využívám metod *ab initio* molekulové dynamiky kombinované s pokročilými přístupy modelování excitovaných stavů. Teoretické studium radikálových kationtů je náročnější kvůli jejich elektronové struktuře a je nutné použít odlišné výpočetní metody než pro neutrální molekuly. Ve své práci předkládám srovnání experimentálních spekter s teoretickými pro méně náročné metody, u nichž je ovšem riziko vyšší tzv. spinové kontaminace jako ukazatele jejich nevhodnosti. Dále zkoumám aplikovatelnost náročnější metody FOMO-CASCI a srovnávám získaná spektra. V dalším pokračování práce bych chtěl modelovat spektra větších molekul, včetně radikálového kationtu fullerenu C₆₀⁺, který byl identifikován jako jedna z molekul v difúzních interstelárních mračnách.

Reaktivita v tripletním stavu v chemii atmosféry

Stanislav Chvíla (B3)

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

Chemie atmosféry je v posledních letech předmětem podrobných studií nejen kvůli zvýšenému zájmu o sledování klimatických změn. Tato práce si klade za úkol vymezit prostor dalšímu teoretickému zkoumání chemických reakcí, na nichž se podílejí do tripletního stavu excitované species, ať už jako reaktivní částice nebo jako reagenty. Klíčovou molekulou je pro toto zkoumání 6-karboxypterin, významný produkt degradace biomolekul, jenž se v dříve provedených studiích ukázal být účinným fotosensitizátorem podílejícím se na mnoha reakcích, jejichž energetickým zdrojem je světlo. Jeho vlastnosti vypočtené za pomoci kvantově chemických metod, ať už jeho struktura v různých nábojových stavech, jeho redoxní potenciál v tripletním stavu či jeho absorpční spektrum v různých excitačních stavech, slouží jednak jako benchmark, druhak jako zdroj experimentálně obtížně získávaných dat. Srovnáním s dostupnými experimentálními daty je prověřena vhodnost použitých metod výpočetní chemie s uvažováním jejich přesnosti a využitelnosti pro další výzkum.

Molekulární model organických aerosolů: teoretické studium klastrů pinenu a vody

Jan Poštulka (B3)

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

Aerosoly hrají velkou roli při tvorbě oblak a srážek. Významným vlivem aerosolů na srážky je nukleace na kondenzačních jádrech, která není ještě uspokojivě popsána. Společně s Laboratoří molekulových klastrů ÚFCH JH AV ČR se proto věnujeme studiu ionizace klastrů α -pinenu s molekulami vody. V Laboratoří molekulových klastrů ÚFCH JH AV ČR byla měřena hmotnostní spektra klastrů po ionizaci. Z experimentálních dat vyplývá, že mezi vodou a ionizovaným pinenem dochází k přenosu náboje. Pomocí CDFT výpočtů jsem zjistil, že tento přenos náboje není způsoben přenosem elektronu, nýbrž přenosem protonu z ionizovaného pinenu na klastř vody, který je k němu vázán. Tuto domněnku jsem potvrdil pomocí optimalizačních výpočtů geometrií zkoumaných klastrů. Získaná data ukázala, že ochota systému k přenosu protonu roste s počtem vázaných molekul vody. Dosavadní výsledky mé práce uspokojivě vysvětlují experimentální data naměřená na ÚFCH JH AV ČR a poslouží k dalšímu studiu pinenového klastru jako kondenzačního jádra pro tvorbu srážek.

Rovnováha kapalina-pára ve vodných roztocích γ -butyrolaktonu a γ -valerolaktonu

Ondřej Kolín (B3)

Školitel: doc. Ing. Vladimír Dohnal, CSc.

V této práci byla provedena přesná měření aktivity vody v systémech voda + γ -butyrolakton a voda + γ -valerolakton při 298.15 K. Získané závislosti aktivitních koeficientů vody na složení byly korelovány různými modelovými vztahy; nejlepší výsledky poskytla Wilsonova rovnice, která vystihuje data v rámci experimentální nejistoty. S cílem předložit ucelený popis rovnovah kapalina-pára těchto systémů v širším oboru teplot, byla naměřená aktivitní data korelována spolu s dostupnými údaji o termálních veličinách (dodatková entalpie a rozpouštěcí entalpie laktonu v nekonečném zředění) rozšířenou Wilsonovou rovnicí s teplotně závislými parametry. Tato korelace poskytuje nejen dobrý simultánní popis zahrnutých dat, ale jak dokumentují porovnání s literárními izobarickými měřeními rovnovah kapalina-pára a kapalina-pevná fáze, i spolehlivé extrapolace aktivitních koeficientů do oblastí výrazně vyšších i nižších teplot. V práci byly dále kriticky zhodnoceny literární informace o tlacích nasycených par čistých laktonů a předloženy jejich doporučené teplotní závislosti. Řešena byla též otázka azeotropického chování systému voda + γ -valerolakton: naše výpočty ukazují, že limitní relativní těkavost laktonu roste s teplotou a azeotropie nastává v těsné blízkosti normálního bodu varu vody.

Možnost použití viskozity pro stanovení koncentrace sodium dodecyl sulfátu ve vodě

Andrea Pavlíková (B3)

Školitel: Ing. Alena Randová, Ph.D.

V mnoha oborech je důležité často stanovit jednoduše množství detergentu ve vodě. Pro určení kritické micelární koncentrace může být využito například měření viskozity, které lze provádět s větší citlivostí na teplotu než měření povrchového napětí. K měření byl použit rotační viskozimetr Anton Paar Stabinger. Z naměřených hodnot byla určena kritická micelární koncentrace tenzidu. Ta byla následně porovnána s tabulkovými hodnotami. Práce je konkrétně zaměřena na sodium dodecyl sulfát (SDS) jako povrchově aktivní látku. Tato a další povrchově aktivní látky jsou součástí našeho každodenního života, protože se s jejich účinky setkáváme v řadě procesů jako praní, mytí podlah a nádobí, nebo v šamponech a pěnách do koupele. Teprve dosažení kritické micelární koncentrace zajišťuje kvalitní provedení těchto procesů. Z tohoto důvodu je znalost kritické micelární koncentrace důležitá.

Rozpustnost CO₂ v iontových kapalinách saturační metodou

Štěpán Tvrdý (B3)

Školitel: Ing. Pavel Morávek, Ph.D.

Koncentrace oxidu uhličitého v zemské atmosféře roste i vlivem lidské činnosti. Množství tohoto plynu uvolněné do ovzduší lze snížit kupříkladu jeho zachytáváním před vypouštěním emisí do atmosféry a jeho následným uskladněním nebo dalším využitím. K tomu účelu mohou pomoci iontové kapaliny, které vykazují vysokou rozpustnost oxidu uhličitého a jsou proto zkoumány jejich absorpční vlastnosti. V rámci této práce byla měření rozpustnosti CO₂ v iontové kapalině [hmim][Tf₂N] (1-hexyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethanesulfonyl)imide, doporučený standard pro tato měření) a porovnáním s literárními daty ověřena funkčnost a přesnost aparatury sestavené na Ústavu fyzikální chemie při teplotách 25, 50 a 70°C do tlaku 1,1 MPa.

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



Lonza



Chemical Engineering I

MÍSTO: B139

KOMISE

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

Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.

Ing. Denisa Lizoňová

Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D.

Ing. Jiří Schöngut, Ph.D. (Unipetrol)

Ing. Jiří Čech, Ph.D. (Škoda Auto)

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:40 [Bc. Tommaso Arduini](#) (M2, doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha)

Measurement of k_L in pilot-plant stirred vessels

09:00 [Aliye Hazal Koyuncu](#) (M1, Ing. Viola Tokarová, Ph.D.)

Synthesis and Characterization of SiO_2 Nanoparticles Using Microfluidics

09:20 [Gerson Martinez](#) (B3, Ing. František Muzika, Ph.D.)

Dynamic behaviour of Urea-Urease system in a membrane reactor

09:40 [Bc. Mária Minichová](#) (M2, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)

Density functional theory as a tool for a calculation of l-g interface properties

10:20 [Bc. Boleslav Zahradník](#) (M2, doc. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.)

Effect of shell thickness on the properties of fractal aggregates created by physical locking

10:40 [Adam Waněk](#) (B3, Ing. Matěj Novák)

Manufacturing of tablets containing two APIs by FDM 3D printing



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

Dissolution Kinetics of Poorly Soluble Injectable Suspension

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

Preparation of graphene/polyaniline nanocomposites

vyhlášení výsledků

Measurement of k_La in pilot-plant stirred vessels

Bc. Tommaso Arduini (M2)

Školitel: doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha

Fermentation is a unit operation based on mass transfer from a gas phase to a liquid one. So, one key parameter required to study of this process is the volumetric mass transport coefficient. It is possible to calculate it with empirical correlation, based on geometrical and physical characteristics of the system considered. In order to create this kind of correlations, several measurements are required: a pilot-plant vessel was used for this purpose. Data for two and three impellers in different type combination, also with different diameters on the common shaft, was taken in order to guarantee a large validity range of the results. Usually, k_La correlations are based on gassed power input and superficial gas velocity. We tested several correlation types, evaluated their empirical parameters and proposed the correlation shapes suitable for fermenter design, operating and scale-up. The difference between the measured k_La and the predicted one with a correlation is expressed through the standard deviation. In particular this correlation show the lowest standard deviation: $kLa = 0,0055 \cdot (P/V)^{0,7073} \cdot v_s^{0,4748}$ (1) SD = 28,9 % The Figure 1 below shows the difference between the measured values and the predicted one: Figure 1: Comparison of measured and predicted k_La for correlation 1.

Synthesis and Characterization of SiO_2 Nanoparticles Using Microfluidics

Aliye Hazal Koyuncu (M1)

Školitel: Ing. Viola Tokarová, Ph.D.

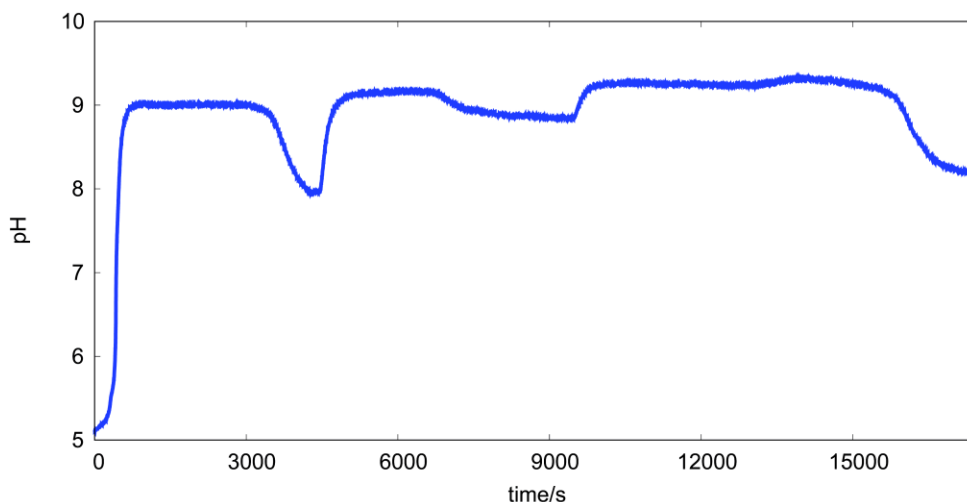
In recent years, there has been increasing demand for using nanoparticles in biomedical studies. These applications can only be successful with a high degree of control over the process parameters. Nucleation phase and growth of nanoparticles, desired size distribution of particles and their morphology are main objectives of a synthesis process. For further use of nanocarriers towards targeted cells or tissue, the surface modification of nanoparticles is the next step. The aim of this work is the production of uniform silica nanoparticles by the continuous microfluidic system. Silica nanoparticles are produced based on Stöber process in a microchip prepared from PDMS (Polydimethylsiloxane) by a standard soft lithography method. The dispersed phase of the system forms ethanol with reagents (ammonia and TEOS) and the continuous phase is fluorinated oil FC-40. The surface of all microfluidic channels is modified with a silanizing agent (1H,1H,2H,2H-perfluorodecylsilane). Final particle size and morphology are analysed using SEM (Scanning Electron Microscope), TEM (Transmission Electron Microscope) and DLS (Dynamic Light Scattering) are used.

Dynamic behaviour of Urea-Urease system in a membrane reactor

Gerson Martinez (B3)

Školitel: Ing. František Muzika, Ph.D.

The objective of this research is to assess the pH dynamic behaviour of Urea-Urease system in a membrane reactor by varying pH of stock solutions, flow rate and concentrations of urea and urease solutions. The urease performs enzyme-catalyzed hydrolysis of urea under acidic conditions to yield ammonia and CO₂. The membrane reactor consists of the main reactor, where the urease with specific pH is fed and the flow-through reservoir, where urea with specific pH is fed. Both the reactor and reservoir were coupled via dialysis membrane Spectra/Por 7 MWCO:1000, both the reactor and reservoir were stirred at 1050 rpm, the pH was monitored using a pH electrode immersed in the reactor part. The system was closed to the atmosphere. According to work of Bánsági, Jr. et al., (2014), J. Phys. Chem. B 118, 6092-6097, pH oscillations can occur in a membrane system loaded with urease when ratio of permeances of H⁺ ions and urea is between 3.3 and 20 towards the H⁺ ions. Our measurement shows the membrane have unequal permeances for both H⁺ and urea, the ratio is 2.7 towards the H⁺ ions. Parameter space has been mapped by marking multiple stationary states and oscillatory regions. pH oscillatory behavior has been found with the difference between minima and maxima ~1.2 pH units.



Density functional theory as a tool for a calculation of l-g interface properties

Bc. Mária Minichová (M2)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Interfacial properties can be often difficult to measure. An alternative approach is to derive all missing information about interfaces from thermodynamics in a self-consistent manner. Density functional theory (DFT) is a powerful tool enabling to calculate thermodynamic properties. The theory works with energy functionals of density functions distributed along spatial coordinate(s). Subsequent minimization of this functionals lead to finding the density profiles which are starting points towards physical properties of systems such as surface tension, etc. In this work we simplified the description of one-component system with (l)-(g) interface as a spatially one-dimensional problem employing Van der Waals equation. DFT was applied to the mentioned system in order to find density profiles. Further steps involved numerical solution of boundary value problem for the nonlinear second order differential equation. As this work is a familiarization with the DFT theory the next step will be a closer approach to real systems and thus a three-dimensional model with a more accurate description of state behaviour of two-component systems to find desired interface properties and thus to participate in a building of the self-consistent model for foaming and other applications.

Effect of shell thickness on the properties of fractal aggregates created by physical locking

Bc. Boleslav Zahradník (M2)

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

In this work, porous microparticles, so called microclusters, were prepared by aggregation of polymeric primary particles under completely destabilized conditions. The polymeric nanoparticles have core-shell structure, where the core is formed by highly crosslinked polymethyl methacrylate and the shell is formed by mixture of polymethyl methacrylate and polybutylacrylate, resulting in different mechanical properties of core and shell. The soft character of the shell increases the adhesion of the nanoparticles, resulting in variable mechanical strength of formed microcluster. Main goal of this work was to investigate impact of operating conditions on the mechanical properties of these microclusters. Parameters included in the work are temperature, stirring speed and shell thickness. Analysis of the microcluster properties was done by static light scattering. Creating of microclusters by physical locking method over the chemical polymerization method has several advantages like reduction of aggregation time, reduction of the need to use chemicals and higher flexibility of the process.

Manufacturing of tablets containing two APIs by FDM 3D printing

Adam Waněk (B3)

Školitel: Ing. Matěj Novák

3D printing is nowadays fast-growing sector with high perspective in pharmaceutical industry. Large number of pharmaceutical companies is trying to enlarge their traditional ways of producing drugs with techniques based on 3D printing, especially FDM 3D printing (Fused deposition modeling). First achievements were already reached and the first 3D printed drug called Spiritam is available in the USA. The goal of this work is to print tablets by commercial FDM printer that will contain two active pharmaceutical ingredients (APIs). Main advantage of such tablet is dissolution kinetic controlled by designed porosity and internal surface area of the tablet. The spatial concentration of the API in the tablet is also well defined according to required treatment. As a printing material, the FDM 3D printers use filaments that are produced by hot-melt extrusion technique. Mixture of carrier polymers, API and plasticizers were melted together in nozzle of an extruder to produce homogenous filament. Filaments were analyzed and results were compared with fully printable referent filament (obtained from previous project). In the final step two filaments (containing different API) will be used to print a tablet according to model designed in AutoCAD software.

Dissolution Kinetics of Poorly Soluble Injectable Suspension

Bc. Erik Sonntag (M1)

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

Sustained release injectable suspensions (also called “nanoparticle depot systems”) are relatively new phenomenon in clinical practice. Compare to the conventional treatment methods, these dosage forms provide a number of benefits such as: lower frequency of administration, blood level remains within therapeutic range, etc. These suspensions may be administered in the form of a poorly soluble drug and the release time of the Active Pharmaceutical Ingredient (API) of such medication is dependent on the particle size and the specific surface area of drug particles. The conversion from the insoluble drug to the soluble API occurs through natural mechanisms of the human body (enzymatic hydrolysis). In drug development, it is very important to have reliable method how to evaluate drug dissolution profile in *in vitro* conditions before clinical trials on animals and humans. For this purpose we have developed a dissolution method that can provide the data of dissolution kinetics. Within this method a parametric study on the laboratory mill was carried out that allows us to prepare suspensions of defined particle size distribution, two analytical methods (HPLC and LC-MS) to determine concentration of API and prodrug were created and a sample preparation procedure was designed.

Preparation of graphene/polyaniline nanocomposites

Tereza Bautkinová (B3)

Školitel: Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D.

Graphene has received considerable attention in recent years due to its remarkable thermal, electrical and mechanical properties. Its large surface-to volume ratio makes it a promising option as a filler for polymers. But synthesis of true monolayer graphene provides considerable challenges and can also be extremely costly, therefore an oxidised derivative of graphene - graphene oxide, has attracted attention due to its relative ease of preparation. The functionalities (like hydroxyl, carboxyl, carbonyl and epoxy) also support the uniform distribution of rGO nanosheets in a polymer matrix. Polyaniline is perhaps the most extensively studied conductive polymer due to its relatively simple synthesis, environmental stability, economic viability and its chemical, electrical and optical properties. Combining the excellent properties of graphene with the advantages of polyaniline aims to improve many of the properties of the resulting composite material which might find variable applications for example in supercapacitors, flexible sensors or materials for CO₂ capture.

Chemical Engineering II

MÍSTO: B141B (KNIHOVNA)

KOMISE

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

Sandra Kordač Orvalho, Ph.D.

Ing. Marek Šoltys

Ing. Radim Petříček

Ing. Petr Matuška (MSD)

PROGRAM

08:30 **zahájení**

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

Synthesis of magnetic nanoparticles for remotely controlled PCR reaction

09:00 [Bc. Jan Haša](#) (M1, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

Pseudo-peptide Grafted Magnetic Nanoparticles

09:20 [Suada Dukaj](#) (M2, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

Particle Size Effect on Release Kinetics of Drug From Suspension

10:20 [Vladimír Němec](#) (B3, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

Effect of granulation process parameters on the dissolution of IBU-lactose formulations

10:40 [David Zůza](#) (B3, Ing. Tokárová Viola, PhD.)

Design of micro-reaction apparatus for continuous synthesis of silica particles

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

Retardation of API dissolution by formulation approaches



11:20 [Bc. Jakub Mužík](#) (M2, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

In situ drug amorphisation by microwave irradiation stabilized by mesoporous silica

11:40 [Bc. Vojtěch Klimša](#) (M2, Ing. Ondřej Kašpar, Ph.D.)

Continuous spray drying with variable inlet formulation - design and optimization

vyhlášení výsledků

Synthesis of magnetic nanoparticles for remotely controlled PCR reaction

Bc. Ivana Pivarníková (M2)

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

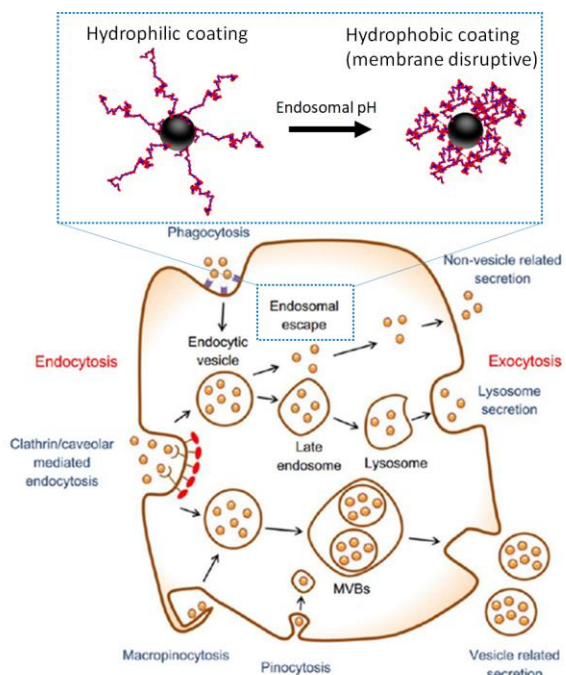
Owing to their exceptional properties, magnetic iron oxide nanoparticles (MIONs) serve promising applications in molecular biology and biomedical research. Currently, one of the objectives is to investigate the conjugation of MIONs with nucleic acid molecules (DNA/RNA). Such systems can be significant for progress in applications including detecting molecules at very low concentrations or manipulation and targeting by external magnetic field. One of the important techniques in molecular biology is the polymerase chain reaction (PCR), which allows *in vitro* reproduction and amplification of DNA sequences using DNA polymerase. The combination of MIONs with PCR can have beneficial but also inhibitory effect on the reaction. MIONs are widely used due to their low toxicity, physicochemical stability and ease of preparation. In presented work, dextran coated MIONs were prepared by co-precipitation method and characterized by Dynamic Light Scattering, Transmission Electron Microscopy and Fourier Transform Infrared Spectroscopy. Their heating properties were measured by Radio Frequency heating (RF). Finally, MIONs were used in PCR reaction to define the conditions for an effective PCR in the presence of MIONs and regulate the temperature cycles for PCR by RF heating.

Pseudo-peptide Grafted Magnetic Nanoparticles

Bc. Jan Haša (M1)

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

One of the recent challenges drug delivery systems are fronting is endosomal escape which can be prevented by co-delivery of endosomolytic pseudo-peptidic polymers. Co-delivery can be facilitated via various means such as loading the polymer directly inside a carrier or grafting the polymer on the surface of the delivery system components. Our focus turned to magnetic nanoparticles which can be employed in drug delivery systems as carriers, release triggers, contrast agent in magnetic resonance or for navigating the drug delivery system by magnetic field. In this work, a method of preparation of magnetic nanoparticles grafted with endosomolytic PP75 is described. Firstly, the surface chemistry that facilitates the grafting was studied and a standard operating protocol was optimized. The influence of the preparation method on the size distribution, colloidal stability, zeta-potential and pH responsiveness of the particles was studied.



(157) N. Oh; J. H. Park. Endocytosis and exocytosis of nanoparticles in mammalian cells. *International Journal of Nanomedicine* 2014, 9 Suppl 1, 51-63.

Particle Size Effect on Release Kinetics of Drug From Suspension

Suada Dukaj (M2)

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

Intramuscular depot formulations are considered as a way of providing constant plasma levels of a drug over extended periods of time and improving patient compliance. The principle of a depot formulation in the form of a suspension is based on the intramuscular injection of a poorly water-soluble drug, whereby the particles gradually dissolve and release the drug into systemic circulation. One of the modalities to improve the efficiency of a sustain release injectable suspensions of a poorly soluble drug into systematic circulation is to control the particle size distribution of the formulation. It is the main key parameter which controls the kinetic release of a drug delivery system. The aim of the present study is to investigate the properties of different size fractions in order to delineate how particle size governs the release profile. In order to describe the behaviour of single particle in drug dissolution, Noyes – Whitney equation was used to develop a mathematical model. This model will be used to extend the prediction of mono particle size class and later for the whole particle size distribution for understanding the mechanism and designing of drug release particles.

Effect of granulation process parameters on the dissolution of IBU-lactose formulations

Vladimír Němec (B3)

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

The aim of the study is to create a method, which allows the processing of a powder mixture of ibuprofen and lactose by high shear granulation in a laboratory scale granulator. Mapping of the parametric space and optimization of the granulation process are two crucial points, thus various experimental set-ups will be examined (i.e. batch volumes and different impeller speed). Granules will be prepared from different size fractions of ibuprofen and lactose. Powders for granulation will be prepared by sieving and the chosen fractions will be used for the size effect study. The produced granulate will be characterized by measuring particle size distribution, liquid to solid ratio necessary for achieving a properly granulated batch, and granule strength. The granulated powders will serve as a material for a further study of granule microstructure, content uniformity, dissolution and tableting.

Design of micro-reaction apparatus for continuous synthesis of silica particles

David Zůza (B3)

Školitel: Ing. Tokárová Viola, PhD.

Silica particles are subject of intense research in the last 20 years especially, because they are thermally and chemically stable and can be prepared in various shapes and sizes with a porous structure. One of the possible utilizations is their use as drug carriers for an oral drug delivery where some variants are FDA approved. However, usual batch preparation methods of silica with high porosities usually lead to polydispersity of final particles. Transferring the synthesis into a flow-through device with higher control over hydrodynamic conditions could lower the polydispersity and provide a continuous production process. This can be done using a CSTR, a plug-flow reactor or even a microfluidic chip. However, it is necessary to take into account a wide spectrum of parameters that needs to be set, such as reaction stoichiometry, reaction time and hydrodynamic conditions. In this work, a system for continuous preparation of silica microparticles with high porosity ($800 \text{ m}^2/\text{g}$) is designed and tested. After considering all aspects described above, several reactor designs are proposed and 3D printed from ABS. Synthesized silica microparticle in purposefully-designed reactors are characterized by optical microscopy, scanning electron microscopy and static light scattering.

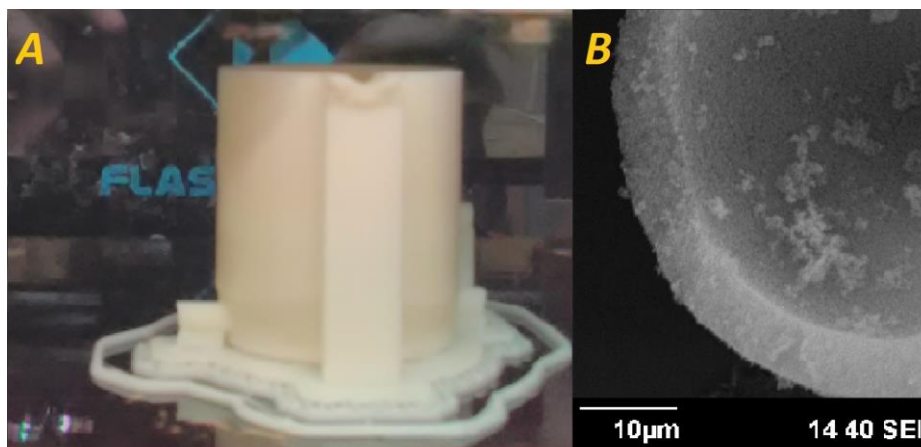


Figure 1: A) Reactor design being 3D printed. B) SEM image of broken silica particle with visible core-shell structure.

Retardation of API dissolution by formulation approaches

Bc. Sarah Akhlasová (M1)

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

The goal of generic pharmaceutical development is a production of dosage form bioequivalent with original drug product. Mostly, alternative solid form (polymorph or amorphous form) of active pharmaceutical ingredient (API) is used, due to the patent protection of the original. Various solid forms differ in physical - chemical properties, e.g. in dissolution behavior of API, which is one of the most important properties of the drug product. Fast API dissolution can lead to the failure of the developed prototype in bioequivalence study and moreover endanger patient safety. Thus, there is a need to retard the dissolution rate of API, if chosen API solid form has faster dissolution than is required. In this work, the retardation is done by appropriate formulation of the drug product. Polymers with promising properties for retardation were chosen and simulation of wet granulation with API in small scale, followed by the dissolution of granulates to study polymers capability of retardation was performed. Later, various technologies of manufacturing of drug product – direct compression, roller compaction, high-shear and fluid bed granulation were studied to determine the impact of the technology on the retardation. So far, some of the polymers showed the retardation of API dissolution.

In situ drug amorphisation by microwave irradiation stabilized by mesoporous silica

Bc. Jakub Mužík (M2)

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

A common issue in the pharmaceutical industry is low solubility and dissolution rate of Active Pharmaceutical Ingredients (APIs). The dissolution rate might be significantly enhanced by changing state of the matter from crystalline to amorphous one. Carriers or stabiliser such as polymer or porous materials, which can absorb or lock the molecules of API in its structure, are used to keep amorphous state of the API. Powders composed from ibuprofen as model API and mesoporous silica micro-particles as a carrier were experimentally investigated for *in situ* amorphization of ibuprofen by microwave (MW) radiation. As a source of microwaves commercially available MW oven was used and characterized. The MW power input and composition of the tablets (excipients/ibuprofen) were tested with respect to the melting point of ibuprofen (78°C). The changes of the crystalline structure before and after MW treatment were analysed by X-Ray Diffractometry (XRD) and Differential Scanning Calorimetry (DSC). Dissolution profiles of samples were evaluated by HPLC. Scanning electron and optical microscopy were used for the particle structure characterization. For further scale-up fabrication a fluid amorphizator was constructed and experimentally tested.

Continuous spray drying with variable inlet formulation - design and optimization

Bc. Vojtěch Klimša (M2)

Školitel: Ing. Ondřej Kašpar, Ph.D.

Spray drying is one of the most known unit operations for the production of powder materials and because of short contact times also one of least likely to damage heat-sensitive components. Therefore, it is widely used in pharmaceutical and food industry. The focus of this study is to design and optimize a system that converts conventional batch-wise spray drying operation into continuous one with the minimal risk of product cross-contamination. The proposed set-up allows time-efficient screening of products with various composition. For this task, a custom designed valve was developed along with a procedure allowing effective cleaning of separation cyclone during the run. Finally, the experiment was carried out to demonstrate the feasibility of modification and degree of cross-contamination across all sample fractions.

Chemické inženýrství 1

MÍSTO: BS9

KOMISE

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

Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Mgr. Chaloupka Tomáš

Ing. Lenka Krajáková

zástupce sponzora

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:40 [David Tichý](#) (B3, doc. Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.)

Předkoncentrace a separace v mikrofuidním čipu s gradientem elektrického pole

09:00 [Jakub Strnad](#) (B3, doc. Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.)

Elektrochemická charakterizace homogenních iontově-výměnných membrán

09:20 [Ondřej Navrátil](#) (B3, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.)

Manufacturability of core-shell particles made by alginate encapsulation

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

Příprava zlatých nanočástic a jejich agregátů

10:20 [Michaela Mikešová](#) (B3, Ing. Jaromír Pociď, Ph.D.)

Metodika stanovení složení elektrolytu vanadové průtočné baterie

10:40 [Ondřej Dupal](#) (B3, prof. Ing. Michal Příbyl, Ph.D.)

Vliv elektrického pole na rovnovážné koeficienty v systémech dvou nemísitelných vodných fází



11:00 [Martin Bureš](#) (B3, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)

Modelování transportních procesů v kation-výměnných membránách pro vanadové redoxní průtočné baterie

11:20 [Patrik Bouřa](#) (B3, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)

Příprava a charakterizace nových mikrocelulárních polymerních pěn

vyhlášení výsledků

Předkoncentrace a separace v mikrofluidním čipu s gradientem elektrického pole

David Tichý (B3)

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

Mikrofluidní zařízení nachází v poslední době široké uplatnění v oblasti point-of-care diagnostiky, tedy při konstrukci kompaktních diagnostických přístrojů pro domácí použití, bez nutnosti laboratorního zázemí. Mezi zmíněné nástroje patří například přenosné glukózové nebo těhotenské testy. Tato práce se zaměřuje na konstrukci elektrokinetického mikrofluidního zařízení vhodného pro předkoncentraci a separaci biomolekul a zkoumá jeho vlastnosti. K předkoncentraci dochází v průtočném mikrofluidním kanálku díky aplikaci elektrického pole s nelineárním profilem zajištěným dvěma iontovýměnnými membránami. Místo předkoncentrace záporně nabitých biomolekul je kontrolováno vloženým napětím a použitým průtokem. Testy byly provedeny s molekulami floresceinu, jejichž roztok byl 20 minut pumpován do mikrofluidního čipu a byla zaznamenávána poloha a tvar vzniklého předkoncentrovaného pásu. Byl zkoumán vliv rozdílných hodnot průtoků a aplikovaného napětí na pozici a tvar vytvořeného zakoncentrovaného pásu. Tyto parametry byly porovnány pro tři různé geometrie použitého kanálku, dva kónické a jeden rovnoběžný.

Elektrochemická charakterizace homogenních iontově-výměnných membrán

Jakub Strnad (B3)

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

Homogenní iontově-výměnné membrány se používají v elektrodialyzérech jako permselektivní médium zajišťující vlastní požadovanou separaci iontů v elektrickém poli. Při porovnání s heterogenními iontově-výměnnými 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. V našem projektu se zaměřujeme na pochopení základních rozdílů v chování homogenních a heterogenních iontově výměnných membrán v elektrickém poli. Jedním ze zásadních pozorovaných rozdílů je jejich odlišná reakce na přítomnost nabitých biopolymerů, které způsobují zanášení membrán. V této experimentální práci provádíme chronopotenciometrickou charakterizaci membrán, která umožňuje studovat časový vývoj napětí na membráně při konstantním vloženém elektrickém proudu. Z naměřených dat se poté vyhodnocují tzv. transientní časy, které se porovnávají s teorií založenou na Sandově rovnici. Ta umožňuje odhadnout množství mikroheterogenit membrány, což je podíl membrány, která aktivně nepřispívá k vlastnímu odsolení. Tento příspěvek bude zaměřen na prezentaci experimentálních dat a diskuzi získaných výsledků.

Manufacturability of core-shell particles made by alginate encapsulation

Ondřej Navrátil (B3)

Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Moderní lékové formy s cíleným uvolňováním umožňují efektivnější využití účinné látky v organismu, kdy je látka uvolněna pouze v žádoucím místě účinku a tím jsou minimalizovány nežádoucí systémové účinky. Tyto formy výrazně snižují množství použitých materiálů, neboť minimalizují ztráty vzniklé ve vnitřních procesech organismu. Existuje široké spektrum lékových forem s tímto mechanismem, jako jsou tablety s retardovaným uvolňováním nebo rychle rozpadavé tablety. Zde navrhovaná forma umožňuje uložení API do alginátových mikrokapslí se strukturou jádro-slupka. Cílem této práce je výzkum produkce alginátových částic s následnou analýzou jejich vlastností. Částice byly vyráběny enkapsulátorem BÜCHI B-395 PRO, kdy vznikaly frekvenčním rozrušováním laminárního toku tekutiny proudícího skrze soustřednou soustavu vnější a vnitřní trysky variabilních rozměrů. Vytvořené částice byly následně polymerizovány v roztoku CaCl_2 procesem externí cross-polymerace. Byla provedena parametrická studie zkoumající vliv velikosti trysek, frekvence vibrací a její amplitudy nebo průtoku roztoků na tvarovou uniformitu částic a efektivitu procesu. Na výsledných částicích byly následně testovány různé způsoby sušení a zkoumána jejich použitelnost a skladovatelnost.

Příprava zlatých nanočástic a jejich agregátů

Petr Jelínek (B3)

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

Zlaté nanočástice jsou intenzivně zkoumány pro své optické a elektrické vlastnosti. Důležitou výhodou je též biokompatibilita, pro kterou je možné použít nanočástice zlata v lékařské diagnostice nebo k cílenému transportu léčiv, kterému napomáhá i snadná modifikace jejich povrchu. Unikátní vlastnosti lze využít i v některých analytických metodách, jako je například povrchově zesílená Ramanova spektroskopie, jejíž princip je založen na jevu povrchové plasmonové rezonance. Turkevichova metoda přípravy zlatých nanočástic je výchozí metodou této práce. Úpravou iontové síly roztoku během syntézy lze dosáhnout cíleného shlukování vznikajících nanočástic, a připravit tak zlaté agregáty. Cílem této práce je příprava a optimalizace podmínek přípravy agregátů požadovaných velikostí a tvarů. Byly připraveny fraktální a kulové agregáty v závislosti na množství přidané soli. Primární nanočástice byly charakterizovány metodou dynamického rozptylu světla (DLS), agregáty pomocí rastrovacího elektronového mikroskopu (SEM).

Metodika stanovení složení elektrolytu vanadové průtočné baterie

Michaela Mikešová (B3)

Školitel: Ing. Jaromír Pocedič, Ph.D.

Elektrická energie je neodmyslitelnou součástí našich každodenních aktivit, a proto je nutné ji nejen efektivně vyrábět, ale zároveň i uchovávat. K ukládání velkého množství elektrické energie je za potřebí specifických řešení. Vanadová redoxní průtočná baterie patří mezi perspektivní typy stacionárních úložišť, dokladem budiž instalace řady pilotních systémů tohoto typu. Energie je zde uchovávána v elektrolytech tvořených vanadovými ionty rozpuštěnými ve vodném roztoku kyseliny sírové. Složení elektrolytů zásadním způsobem ovlivňuje technické a ekonomické parametry baterie, jako je hustota energie, účinnost provozu, životnost a v neposlední řadě i cena. Analýza složení elektrolytů je proto esenciální pro vývoj účinných, bezpečných a životných baterií. Cílem této práce je vyvinout jednoduchou, levnou a zároveň robustní metodiku stanovení obsahu jednotlivých složek v elektrolytu. Stanovení obsahu jednotlivých vanadových iontů bylo prováděno potenciometrickou titrací. Jako titrační činidlo byl použit manganistan draselný. Vyvinutá metodika je důležitá nejen pro studium procesů uvnitř vanadové baterie, ale i pro následnou průmyslovou aplikaci těchto baterií, kdy je třeba myslet na likvidaci a recyklaci technologie po ukončení provozu.

Vliv elektrického pole na rovnovážné koeficienty v systémech dvou nemísitelných vodných fází

Ondřej Dupal (B3)

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

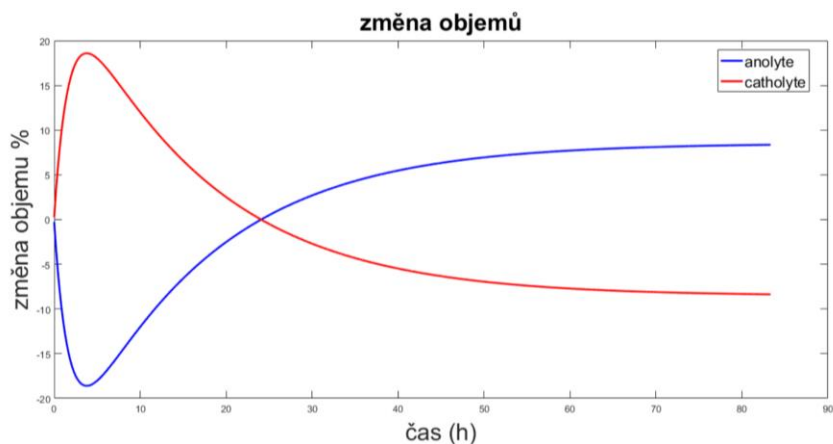
Tato práce je věnována stanovení rovnovážných rozdělovacích koeficientů reakčních složek v systémech dvou nemísitelných vodných fází v závislosti na intenzitě vloženého stejnosměrného elektrického pole. Zvoleným systémem dvou nemísitelných vodných fází je směs polyethylenglykolu 4000, fosforečnanových solí a vody. Pro stanovení rovnovážných rozdělovacích koeficientů bylo sestaveno zařízení z plexiskla obsahující dvě elektrodové komory pro zdrojové elektrody, které jsou po stranách, a dvě měřicí komůrky opatřené měřicími elektrodami. Měřicí komůrky jsou od sebe odděleny dialyzační membránou. Mezi měřicími komůrkami a elektrodovými komorami jsou umístěny iontově-výměnné membrány. V systému dvou nemísitelných vodných fází je rozpuštěna kyselina fenyloctová. Po ustavení rovnováhy jsou vzorky obou fází odpipetovány do měřicích komůrek. Systematicky je zkoumán vliv intenzity vloženého elektrického pole a doby působení elektrického pole na změny koncentrace kyseliny fenyloctové v obou fázích. Koncentrace kyseliny fenyloctové je určována pomocí kapalinové chromatografie. Získané výsledky budou použity k vývoji integrovaných mikrobioreaktorů-mikroseparátorů pro přípravu antibiotik nebo jejich prekurzorů.

Modelování transportních procesů v kation- výměnných membránách pro vanadové redoxní průtočné baterie

Martin Bureš (B3)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Jednou z alternativ k uskladnění energie jsou vanadové průtočné redoxní baterie pracující na principu přečerpávání elektrolytů oddělených membránou skrz elektrody. Membrány musí být propustné pro vodíkové ionty, které přenáší náboj. Zároveň však jsou propustné i pro vanadové kationty, což je velmi nežádoucí a snižuje účinnost baterie. Dalším nežádoucím jevem je vznik osmotického tlaku a transport vody skrz membránu. V této práci se snažíme tyto jevy popsat a pomocí matematického modelu simulovat. Vycházíme ze dvou základních představ o tocích membránou. První předpokládá membránu jako homogenní prostředí, kde ionty a voda difundují skrz. Druhou je představa membrány jako porézního prostředí s rovnými kanálky, kterými tečou ionty s rozpouštědlem. V modelu zahrnujeme jak dynamiku, tak prostorové rozlišení membrány, což vede k lepšímu vhledu do mechanismu transportu. Z výsledků jsme schopni predikovat směr a intenzitu toků. Díky této predikci jsme schopni určit změny v koncentracích a objemech zásobníků elektrolytů. S pomocí parametrických studií jsme popsali vliv důležitých parametrů systému, např. tloušťky a transportních vlastností membrány. Dalším vývojem modelu hodláme zlepšit jeho prediktivní vlastnosti a zlepšit výkonnost reálných baterií.



Příprava a charakterizace nových mikrocelulárních polymerních pěn

Patrik Bouřa (B3)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Současným trendem výroby syntetických materiálů je snaha o snížení spotřeby materiálu a úsporu energie. V tomto ohledu jsou zajímavé polymerní pěny, které jsou vhodným materiálem pro široké množství aplikací. Jsou využívány jako tepelné či zvukové izolanty, membrány v separačních procesech, nebo jako materiály se skvělými mechanickými vlastnostmi (vzhledem k jejich hustotě). Tato práce se zabývá přípravou a charakterizací mikrocelulárních polymerních pěn s mnohem lepšími vlastnostmi než mají běžné polymerní pěny. Pro vypěňování byla použita netradiční metoda spinodální dekompozice. V první části práce se zabývám porovnáním vlastností (porozita, tepelná vodivost, charakter pórů) mikrocelulárních polystyrenových pěn připravených v systémech *polystyren/cyklohexan* a *polystyren/cyklohexanol*. V práci jsou srovnány vlastnosti pěn (*polystyren/cyklohexan*) vyrobených při různých způsobech odstraňování rozpouštědla (extrakčním činidlem nebo lyofilizací). V druhé části práce se zabývám zcela unikátním vypěňováním *polymethylmetakrylátu* v *2-oktanonu*, přičemž bylo potřeba nejdříve prozkoumat chování tohoto systému a stanovit vhodné podmínky pro vypěňování. Pro výslednou kvalitu produktu je vhodnější PMMA s delšími řetězci.



Chemické inženýrství 2

MÍSTO: B03

KOMISE

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

Ing. Mária Zedníková, Ph.D.

Ing. Matěj Novák

Ing. Pavel Kupka

Ing. Jan Nájemník, CSc. (Synthomer)

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:40 [Adrián Žák](#) (B3, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Porovnanie kinetiky vzniku povrchových oxidov na automobilových katalyzátoroch Pt/Al₂O₃ a Pd/Al₂O₃.

09:00 [Kateřina Wodwudová](#) (B3, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Charakterizace porézních katalytických vrstev

09:20 [Jakub Smutek](#) (B3, Ing. Martin Isoz)

Numerical simulation of flow in the Super-pak packing family

09:40 [Přemysl Richtř](#) (B3, Ing. Jaromír Pociďč, Ph.D.)

Laboratorní zinko-vzduchová průtočná baterie

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

Studie reakční kinetiky oxidace CO a C₃H₆ na katalyzátoru automobilových výfukových plynů



10:40 [Lenka Kolářová](#) (B3, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)

Elektrostatické nabíjení komerčních plastů za účelem jejich separace

11:00 [Jakub Klimošek](#) (B3, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)

Optimalizace procesu měření difuze v polymerech metodou "pressure-decay"

11:20 [Martin Šourek](#) (B3, Ing. Martin Isoz)

DEM-CFD

study of flow in a random packed bed

vyhlášení výsledků

Porovnanie kinetiky vzniku povrchových oxidov na automobilových katalyzátoroch Pt/Al₂O₃ a Pd/Al₂O₃.

Adrián Žák (B3)

Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

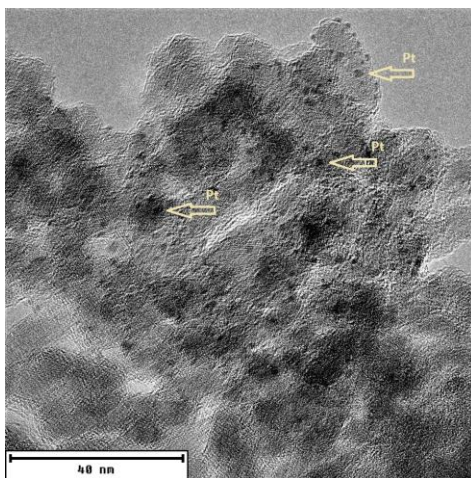
V dnešnom svete sa stále kladie väčší dôraz na kvalitu životného prostredia. Dôsledkom toho je neustále sprísňovanie emisných limitov cestných motorových vozidiel so spaľovacími motormi. Z tohoto dôvodu sme nútení vylepšovať zariadenia a technológie, ktoré slúžia k riadeniu spaľovania zmesi v motore a následnému čisteniu spalín a redukcií škodlivín. K takýmto technológiám patria automobilové katalyzátory. V tejto práci sú zvlášť porovnané dva typy katalytických kovov, využívaných v oxidačných katalyzátoroch za rovnakých pracovných podmienok (plynná zmes, veľkosť častíc, teplota,...). S pozornosťou venovanou vzniku oxidov daných kovov. Tento dej je sledovaný pomocou konverzie oxidu dusnatého v plynnej zmesi, keďže pri vzniku oxidov platiny a oxidov paládia dochádza k zníženiu aktivity katalyzátoru, čo je príčinou zníženia konverzie oxidu dusnatého na oxid dusičitý.

Charakterizace porézních katalytických vrstev

Kateřina Wodwudová (B3)

Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Katalytické konvertory výfukových plynů jsou ve formě keramických monolitů s mnoha rovnoběžnými kanálky, na jejichž povrch je nanesena porézní katalytická vrstva. Tato vrstva je tvořena částicemi $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$, mezi kterými se nacházejí makropóry. Částice $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ obsahují mesopóry, ve kterých jsou rozmístěny nanočástice vzácných kovů, na kterých probíhají reakce. Jak porézní struktura, tak velikost nanočástic kovů zásadně ovlivňují účinnost konvertoru, při jeho vývoji je proto nutné obojí detailně popsat, což platí nejen pro automobilové, ale také naprostou většinu heterogenních katalyzátorů. Cílem této práce je charakterizace vrstev $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ a $\text{Pt}/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ pomocí sorpce plynů, rastrovacího a transmisního elektronového mikroskopu. Důležitými parametry pro zvolení vhodného postupu nanášení vrstvy do kanálků monolitu je její tloušťka, makroporozita a rovnoměrnost. Tyto parametry jsme vyhodnotili pomocí obrazové analýzy snímků z rastrovacího elektronového mikroskopu (SEM). V transmisním elektronovém mikroskopu (TEM) jsme zkoumali nanokrystalky Pt v mesopórech částic $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ "(viz obrázek)" a z pořízených snímků jsme obrazovou analýzou vyhodnotili průměrnou velikost krystalků. Velikost mesopórů a měrný povrch vzorku byly změřeny pomocí fyzisorpce dusíku.



Numerical simulation of flow in the Super-pak packing family

Jakub Smutek (B3)

Školitel: Ing. Martin Isoz

The distillation is currently the most energy-intensive technology of the chemical industry. Commonly, the distillation is performed in the columns filled with a structured packing. Structured packings are complex structures used to increase the size of the interface available for the mass transfer. Because of the complexity of the packings and of the physical phenomena occurring during the distillation, the design of the distillation columns is based mostly on empirical data. In this work, we focus on modeling the gas flow in the SuperPak family of structured packings. First, we propose an algorithm for generation of the packing geometry. Next, we construct and validate a three-dimensional computational fluid dynamics (CFD) model of gas flow through SuperPak 250.Y and SuperPak 350.Y packings. The model validation is done by comparing experimental data of dry pressure loss to the values computed by our model. The obtained difference between the CFD estimates and experiments is below 10%. Finally, we present a parametric study of the SuperPak 250.Y packing geometry. The devised modeling approach may be used for optimization of the SuperPak type packing geometry with respect to the gas flow. Furthermore, the proposed CFD model may be extended to account for the multiphase flow.

Laboratorní zinko-vzduchová průtočná baterie

Přemysl Richtr (B3)

Školitel: Ing. Jaromír Pocedič, Ph.D.

V dnešní době je elektrická energie nedílnou součástí každé minuty našeho života. Jelikož spotřeba elektřiny bude stále růst, je třeba hledat nové zdroje na její výrobu a možnosti její akumulace. S ukládáním elektrické energie se nejčastěji skloňují technologie jako Li-iontové baterie, vanadové redoxní průtočné baterie či vodíková energetika. Avšak masové uplatnění zmíněných technologií bude čelit problémům s nedostatečným nerostným bohatstvím či nedostatečnou energetickou účinností technologií, a proto je potřeba se poohlížet po alternativních redoxních párech. Jednou z možností je chemie zinek-vzduch, která poskytuje kompromis mezi energetickou účinností a nerostnými zásobami základní surovin, což ovlivňuje výslednou cenu baterií. Nevýhodou je ovšem nízký počet nabíjecích a vybíjecích cyklů způsobený změnou tvaru zinkové elektrody a růstu zinkových dendritů. Jednou z možností, jak vyřešit zmíněné nevýhody, je depozice zinku za kontrolovaných podmínek, čehož lze dosáhnout v průtočných bateriích. Jelikož je chování chemie zinek-vzduch v průtočných bateriích málo prozkoumanou oblastí, nelze spoléhat na komerční řešení. Proto si dává tato práce za cíl vývoj laboratorní sekundární průtočné zinko-vzduchové baterie, která umožní následný výzkum v této oblasti.

Studie reakční kinetiky oxidace CO a C₃H₆ na katalyzátoru automobilových výfukových plynů

Tomáš Pachtl (B3)

Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

V současnosti se kladou stále větší nároky na složení výfukových plynů u automobilů, a proto je nutné porozumět chování katalyzátorů a správně jej předvídat. Tato studie se zabývá deaktivací katalyzátoru při oxidaci propenu v široké škále reakčních podmínek typických pro trojcestný (TWC) a dieselový oxidační (DOC) katalyzátor obsahující platinu a/nebo palladium. Deaktivace je způsobena částečnou oxidací propenu na meziprodukty, které se akumulují na povrchu, blokují aktivní centra a snižují tak jeho efektivnost zejména při oxidaci CO. To má za následek v úzkém teplotním pásmu pokles konverze CO s rostoucí teplotou. Za vyšších teplot a relativně vyššího obsahu O₂ vůči redukujícím složkám (chudé podmínky) se meziprodukty stačí oxidovat a nehromadí se na povrchu. Tento efekt byl nejmarkantnější na Pt katalyzátoru v přítomnosti NO za stechiometrických a mírně chudých podmínek. Experimentálně pozorované jevy byly zohledněny v počítačových simulacích. Do kinetického modelu byly zahrnuty rovnice popisující částečnou oxidaci propenu na povrchové meziprodukty, které blokují katalytická centra a inhibují reakce, jejich oxidace a dále částečná oxidace propenu na CO, přispívající k dočasnému nárůstu koncentrace CO. Vyvinutý model umožňuje preciznější předpověď konverze klíčových složek.

Elektrostatické nabíjení komerčních plastů za účelem jejich separace

Lenka Kolářová (B3)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Demands for plastic are still increasing, especially in car industry, packaging, construction or electronics. Hundreds of megatons of plastic waste is produced each year. Recycling is limited due to the lack of effective and efficient separation method. Thus, majority of plastic waste is burned in furnaces instead of being recycled. Our long-term vision is to develop a cost-efficient plastic separator based on the principle of tribocharging. The goal of this work was to determine parameters affecting the charging of common plastic materials (PP, HDPE, PS, PET and PMMA) and to find conditions leading to the different charging of each material. First, we charged grinded plastics by corona charging unit to see particle performance, especially what is the saturation charge for studied materials. Then, we constructed an apparatus for triboelectric charging of powders with a possibility to control stress applied on our samples. Bigger applied stress led to bigger charge on the powder. This is mostly because the rough particle surface is flattening and consequently the total particle area available for charging is increasing. We showed that colorants are important additives affecting the charging of plastic.

Optimalizace procesu měření difuze v polymerech metodou "pressure-decay"

Jakub Klimošek (B3)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

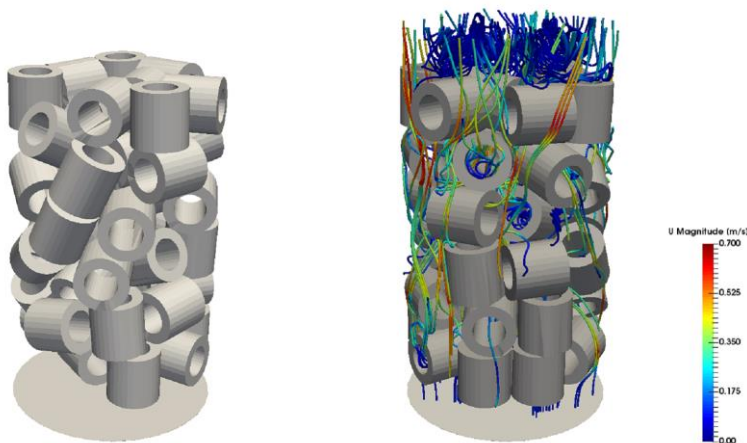
Dynamika transportu plyných složek v polymerních materiálech je jednou z důležitých charakteristik, které je nutno znát pro celou řadu aplikací v polymerním průmyslu. V této práci je kladen důraz na optimalizaci dosavadní metody měření difuzních koeficientů pomocí dynamiky tlakové odezvy a rozšíření knihovny difuzních dat. Byla studována difuze pro různé penetranty v rozdílných polymerních vzorcích při odlišných teplotách. Díky optimalizacím stávající aparatury, metody měření a zpracování naměřených dat můžeme měřit difuzní koeficienty i u uhlovodíků, které mají nízké hodnoty tlaku nasycených par při studovaných teplotách, jako jsou n-hexan, 1-hexen, iso-heptan či cyklopentan. Výsledná data byla porovnávána s gravimetrickým měřením rozpustnosti, což vede k dalšímu zkvalitnění výsledných difuzivit a porozumění probíhajícím dějům. Stávající proces měření je ale stále časově náročný a proto jsme se rozhodli celý proces automatizovat. Díky automatizaci budeme schopni naměřit velké množství experimentů v kratším čase a získat tak statisticky přesnější hodnoty difuzivit. Přispějeme tak k systematickému mapování difúzního transportu v průmyslově relevantních vzorcích polyethylenu s hustotou 900 až 970 kg/m³.

DEM-CFD study of flow in a random packed bed

Martin Šourek (B3)

Školitel: Ing. Martin Isoz

Most catalytic surface reactions as well as other industrial applications take advantage of fixed packed bed reactors. Designers of these reactors rely mostly on empirical formulas derived for various simplifying assumptions, e.g. uniformly distributed porosity. The made simplifications and especially the assumption of uniformly distributed porosity fail if the tube to particle diameter ratio goes under 10 and the „wall effect“ becomes more significant. Thus, the complete three-dimensional structure of the packed bed has to be considered. Thanks to ongoing improvements in numerical mathematics and computational power, the methods of computational fluid dynamics (CFD) have become a great tool for comprehensive description of these problematic packed beds. Three-dimensional simulations of the flow through two fixed beds differing in the type of the used particle are presented and compared with available experimental and empirical results. To generate the random fixed beds, we propose a custom method based on DEM code implemented in open-source software Blender. Thereafter, OpenFOAM tools (snappyHexMesh, simpleFoam) are used for creation of the computational mesh and solution of the governing equations describing a single-phase flow in the packed bed.



Chemické inženýrství 3

MÍSTO: B09

KOMISE

doc. Dr. Ing. Milan Jahoda (předseda)

doc. Ing. Tomáš Weidlich, Ph.D.

Ing. Ladislav Konopka

Ing. Marie Plachá

Ing. Václav Babuka (Synthos)

PROGRAM

08:30 **zahájení**

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

Disipace energie při kolizích částic nepravidelných tvarů: experimenty a modelování

09:00 [Bc. Kateřina Kholyavytská](#) (M1, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)

AFM charakterizace morfologie a mechanických vlastností houževnatého polypropylenu

09:20 [Bc. Tomáš Havlín](#) (M1, prof. Ing. Michal Přibyl, Ph.D.)

Vývoj čipu pro separaci produktů enzymové reakce pomocí dvoufázového vodného systému

09:40 [Bc. Vojtěch Šálek](#) (M2, doc. Dr. Ing. Milan Jahoda)

Tepelné charakteristiky pevných materiálů pro modelování šíření požáru

10:20 [Bc. Dominik Švára](#) (M2, Ing. Jitka Čejková, Ph.D.)

Vliv elektrického pole na systém dekanol-dekanoát



10:40 [Bc. Anna Čížinská](#) (M2, doc. Dr. Ing. Milan Jahoda)

Experimentální měření vlivu požáru na zásobník CNG

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

Objemový koeficient přestupu hmoty v probublávaných fermentorech

11:20 [Bc. Rudolf Pečinka](#) (M2, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Porovnání kinetiky oxidace CO a propenu na automobilových katalyzátorech obsahujících platinu a palladium

11:40 [Bc. Iveta Kršková](#) (M2, prof. Dr. Ing. Juraj Kosek)

Modelovanie vplyvu reologických vlastností na tvorbu morfológie polymérnych pien

vyhlášení výsledků

Disipace energie při kolizích částic nepravidelných tvarů: experimenty a modelování

Bc. Jarmila Kučerová (M1)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

The description of energy dissipation during particle collisions is necessary for prediction of behaviour of systems involving manufacture or transport of granular materials (polymers, drugs etc.). However, the knowledge of dissipative parameters is limited and extends mostly just on the case of ideal (spherical) particles. Our work focuses on PE particles. As a measure of dissipated energy, we use restitution coefficient (the ratio of velocity after and before impact). First, we determined the coefficient experimentally, then we developed DEM based model that enabled us to predict restitution coefficient of particles of various shapes. We recorded particles impacting a metal plate and by image analysis obtained their velocities pre- and post-impact. We used this data to fit dissipative force parameter in one element model. Then, we developed a model that represents the particle as an aggregate of elements and thus determined the behaviour of differently shaped particles. Our results provide information about energy dissipation during collisions of PE particles and show that their behaviour depends significantly on their shape. It is crucial to take particle shape into consideration in models of particulate systems; especially in those regarding particle agglomeration or fouling.

AFM charakterizace morfologie a mechanických vlastností houževnatého polypropylenu

Bc. Kateřina Kholyavytská (M1)

Školitel: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

Houževnatý polypropylen (hiPP) je typickým produktem moderního polymerního průmyslu. Díky svým unikátním vlastnostem, tj. vysoké pevnosti, houževnatosti a odolnosti nachází své využití především v automobilovém průmyslu. HiPP je heterofázový kopolymer skládající se ze dvou nemísitelných fází – z pevné izotaktické polypropylenové matrice (iPP) a z měkkých ethylen-propylenových kaučukových domén (EPR). Právě tato heterofázová morfologie poskytuje houževnatému polypropylenu jeho jedinečné vlastnosti. Tato práce představuje systematický výzkum hiPP za pomoci mikroskopie atomárních sil (AFM). Je představena morfologická studie houževnatého polypropylenu s ohledem na distribuci ethylen-propylenových kaučukových domén uvnitř polypropylenové matrice. Nově je v této práci představeno mapování adhezních vlastností jednotlivých fází hiPP pomocí silové spektroskopie. Kombinace morfologického mapování se silovou spektroskopií přináší přesnější pohled na mechanické chování daného polymeru na mikroměřítku a napomáhá celistvému porozumění heterofázové struktury houževnatého polypropylenu. Ukazujeme, že naše práce může posloužit jako klíč k syntéze nových houževnatých polymerních materiálů s nadstandardními mechanickými vlastnostmi.

Vývoj čipu pro separaci produktů enzymové reakce pomocí dvoufázového vodného systému

Bc. Tomáš Havlín (M1)

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

Práce je věnována vývoji a testování mikrofluidního čipu sloužícího k separaci produktů enzymové reakce pomocí dvoufázového vodného systému. V našem případě se jedná o dvoufázový tok tvořený vodným roztokem anorganické soli a vodným roztokem polyetylenglykolu (PEG). Daný mikrofluidní čip obsahuje polopropustnou dialyzační membránu, která plní dvě funkce: (i) zajišťuje stabilní kontaktování dvou vodných fází umožňující provádět separace v souproudém i protiproudém uspořádání a (ii) zlepšuje selektivitu vlastní separace. V prvních pokusech je čip testován pomocí lehce detekovatelného fluoresceinu, který je do čipu dávkován v solné fázi a přes membránu prochází do vodného roztoku PEG4000. Hlavními studovanými parametry ovlivňujícími vlastní separaci jsou především průtoky fází (doba kontaktu fází) a jejich vzájemné uspořádání (souproud a protiproud). V dané práci budou představeny budou dva prototypy čipu. Budou diskutovány výsledky kvantitativního měření přechodu fluoresceinu mezi fázemi. Bude nastíněn další vývoj pokusu a prezentováno budoucí praktické využití metody – separace produktů enzymatické reakce od vlastního enzymu.

Tepelné charakteristiky pevných materiálů pro modelování šíření požáru

Bc. Vojtěch Šálek (M2)

Školitel: doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

Práce se zabývá měřením tepelných charakteristik pevných materiálů pro účely matematického modelování šíření tepla a požáru. Matematické modelování, jakožto rozvíjející se nástroj požárního inženýrství, vede ke snížení počtu finančně nákladných požárních zkoušek a zefektivnění volby požárně bezpečnostních systémů. Předpokladem k vytvoření kvalitního modelu šíření požáru je zadání velkého počtu vstupních materiálových parametrů, které jsou často nedohledatelné v literatuře, ve formátu nevhodném pro model, nebo zcela nedostupné a jedinou možností k jejich získání je provedení experimentálních měření. V rámci práce byly provedeny měření metodou termogravimetrické analýzy (TGA) za účelem stanovení kinetických parametrů pevných materiálů při různých podmínkách tepelného rozkladu. Měření jsou běžně komerčně dostupné dřevěné velkoplošné materiály (OSB, dřevovláknité a překližkové desky), tedy zástupci nejhojněji používaných materiálů používaných např. pro výstavbu dřevostaveb, tepelné izolace nebo nábytkovou výbavu interiérů včetně chemických laboratoří.

Vliv elektrického pole na systém dekanol-dekanoát

Bc. Dominik Švára (M2)

Školitel: Ing. Jitka Čejková, Ph.D.

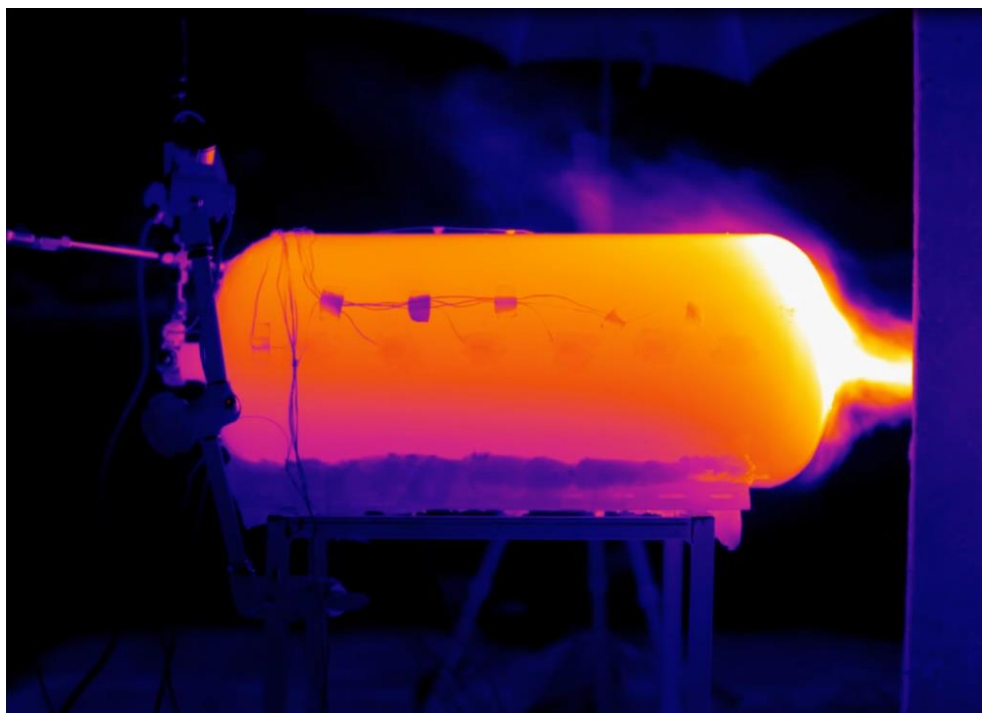
Existuje velké množství systémů, které jsou schopny za určitých podmínek vytvářet obrazce a větví se dendritické struktury. Příkladem neživého systému je Bělousova-Žabotinského reakce nebo tvorba sněhových vloček. V živých systémech se tyto struktury vyskytují například v lidském dýchacím systému nebo v kořenových systémech rostlin. V nedávné době jsme pozorovali tvorbu dendritických struktur v systému, kdy je kapka dekanolu umístěna na tenké vrstvě vodného roztoku dekanoátu sodného. V tomto systému má vliv na samotný tvar obrazce jednak rychlost odpařování a pak i přítomnost anorganických solí a její přidané množství. Na tvorbu obrazců ve výše zmíněných příkladech jiných systémů může mít také vliv přítomnost elektrického pole. Proto jsme se v této práci rozhodli zkoumat možný vliv stejnosměrného elektrického pole na systém dekanol-dekanoát. Pro zkoumání vlivu jsme si museli vytvořit experimentální zařízení. Při jeho konstrukci jsme prošli několika verzemi. Jednotlivé verze jsme otestovali a výsledky jsme použili pro zlepšení konstrukce další verze. Poslední verzi zařízení jsme pak použili ke studiu vlivu stejnosměrného pole na systém dekanol-dekanoát. Experimenty jsme prováděli pro různé hodnoty napětí, které bylo nastaveno na elektrodách.

Experimentální měření vlivu požáru na zásobník CNG

Bc. Anna Čížinská (M2)

Školitel: doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

S rostoucí poptávkou po automobilech na stlačený zemní plyn jsou diskutovány otázky bezpečnosti. Zásobníky na CNG jsou opatřeny bezpečnostním ventilem, který se otevírá při teplotě 110°C. Při lokálním ohřevu zásobníku, například při požáru, a současném chlazení ventilu, například při hašení, může dojít k nárůstu tlaku nad kritickou hodnotu a roztržení tlakové láhve. Příspěvek je zaměřen na popis a vyhodnocení experimentů, kde dochází k lokálnímu zahřívání tlakového zásobníku propanbutanovým hořákem. Hlavním cílem bylo zjistit, za jakých podmínek dojde k otevření bezpečnostního ventilu. Během experimentu byla sledována povrchová teplota, teplota bezpečnostní pojistky a tlak uvnitř zásobníku. Bylo ověřeno, že bezpečnostní pojistka se otevře při dosažení požadované teploty, avšak následný průběh a doba výtoku jsou ovlivněny okolními podmínkami v blízkosti bezpečnostní pojistky.

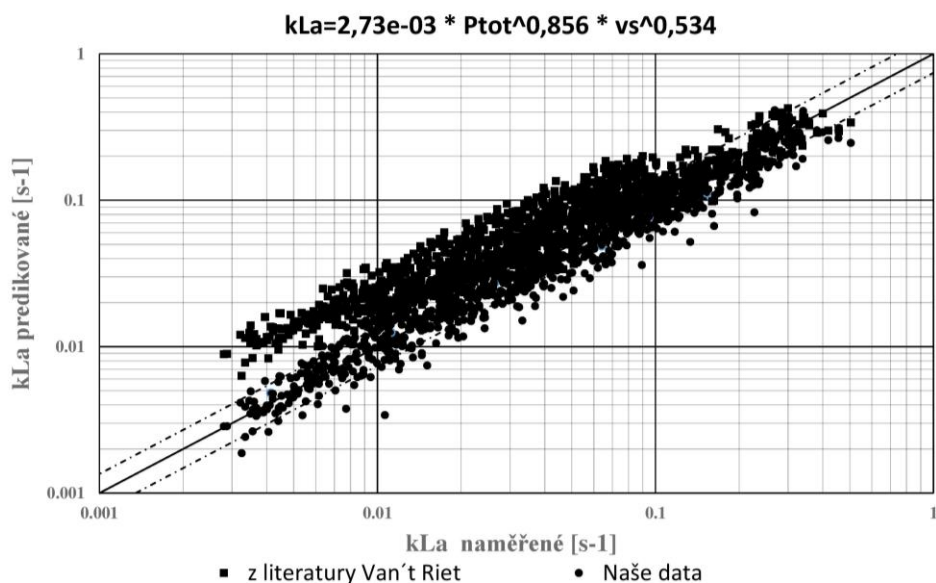


Objemový koeficient přestupu hmoty v probublávaných fermentorech

Bc. Daniela Tamašková (M1)

Školitel: doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha

Při konstrukci mechanicky míchaných fermentorů se koeficient přestupu hmoty k_La často stává klíčovým parametrem. V průmyslových fermentačních procesech je většina kapalin nekoalescentní a často vykazují zvýšenou viskozitu. V případě viskózních kapalin je k_La , předpověděné na základě literárních korelací, zatíženo širokou distribucí hodnot. Cílem této práce je poskytnout spolehlivé korelace pro k_La založené na velkém množství experimentálních dat získaných tlakovou dynamickou metodou (DPM). Experimentální uspořádání bylo upraveno pro měření ve viskózních kapalinách. Byly použity dva fermentory, jeden v laboratorní a druhý v poloproduční velikosti. Měření bylo provedeno pro různé typy míchadel s různými průměry. V této práci budou korelace získané z odborné literatury porovnány s námi vytvořenými korelacemi [Graf.1]. Budou diskutovány výsledky získaných nejistot měření a bude nastíněn další vývoj pokusů. Graf.1: Srovnání naměřených a predikovaných hodnot k_La .



Porovnání kinetiky oxidace CO a propenu na automobilových katalyzátorech obsahujících platinu a palladium

Bc. Rudolf Pečinka (M2)

Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Zvyšující se nároky na kvalitu životního prostředí vedou ke zpřísnování legislativy týkající se škodlivých látek vypouštěných do ovzduší. V Evropě je pro automobily platný systém emisních norem EURO, jehož snižující se limity vedou k vývoji účinnějších katalytických konvertorů a ke snaze o potlačení dalších nežádoucích jevů vyskytujících se při čištění spalin. Tato studie porovnává kinetiku katalytické oxidace, CO a C_3H_6 při ohřevu automobilových katalyzátorů typu Pt/ γ - Al_2O_3 a Pd/ γ - Al_2O_3 . Bylo zjištěno, že s rostoucí teplotou může dojít, paradoxně, k dočasnému snížení konverze CO. K tomuto nežádoucímu jevu dochází na počátku konverze propenu, kdy vznikají meziprodukty jeho neúplné oxidace jako etylén, octany a mravenčany, které obsazují a blokují centra katalyticky aktivních kovů. K oxidaci meziproduktů dochází až při vyšších teplotách, což vede k uvolnění katalytických center a postupně k úplné konverzi CO. Z porovnávaných výsledků experimentů je patrné, že paladium má významný vliv na potlačení dočasného snížení konverze, CO při souběžné oxidaci C_3H_6 . U vzorku Pd/ γ - Al_2O_3 k tomuto nechtěnému jevu dochází pouze minimálně.

Modelovanie vplyvu reologických vlastností na tvorbu morfológie polymérnych pien

Bc. Iveta Kršková (M2)

Školiteľ: prof. Dr. Ing. Juraj Kosek

S polymérnymi penami prichádzame do styku každý deň. V modernom svete majú využitie ako tepelné izolanty, odľahčené plasty pre automobily, posteľové matrace, baliace materiály, atď. Použitie v takto širokej škále aplikácii je možné predovšetkým vďaka ich výborným vlastnostiam. Polymérne peny získavajú svoje vlastnosti vhodnou voľbou polymérneho materiálu a vnútornej štruktúry. V závislosti na vypěňovacích podmienkach potom peny majú veľmi nízku hustotu, nízku tepelnú vodivosť alebo sú veľmi elastické. Polymérne peny zohrajú významnú rolu aj v budúcnosti a preto sa snažíme pripraviť model, ktorý bude popisovať vznik morfológie pien a dovoľí nám študovať fyzikálne javy prebiehajúce pri vypěňovaní. Presný matematický model nám potom pomôže objasniť odlišnosti v štruktúre medzi polystyrénovými (PS) a polyuretánovými (PU) penami, prípadne predikovať zmenu morfológie v závislosti na podmienkach vypěňovacieho procesu. Vyvinutý model sa skladá z dvoch častí. Prvá časť popisuje rast ciel spôsobený difúziou a vyparovaním vypěňovacieho činidla. Druhá časť potom popisuje utváranie stien a strutov, ktoré vychádza z lubrikačnej teórie toku tekutín. Do modelu sme zakompovali vývoj reologických vlastností pri raste cely a vplyv gradientu povrchového napätia pri utváraní stien.

Chemické inženýrství 4

MÍSTO: BIII

KOMISE

prof. Dr. Ing. Juraj Kosek (předseda)

Ing. Martin Isoz

Ing. Ondřej Rychecký

Ing. Alexandr Romanov

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

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:40 [Bc. Jakub Kovačovič](#) (M1, doc. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.)

Impact of process conditions on the conductivity of PANI copolymers

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

Vliv vzniku PtO_x a PdO_x na oxidaci NO na automobilovém katalyzátoru

09:20 [Bc. Daniel Götz](#) (M1, Ing. Petr Mazúr, Ph.D.)

Experimentální studium transportních jevů v membráně vanadové redoxní průtočné baterie

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

Vylepšení postupu nanášení porézních katalytických vrstev do kanálků monolitického reaktoru.

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

Nastavení komunikace a kalibrace dálkově ovládaného zdroje pro regulaci topného okruhu reaktoru



11:00 [Bc. Zuzana Ruberová](#) (M2, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.)

Synthesis of hydrogel microparticles for specific adhesion

11:20 [Bc. Jindřich Mrlík](#) (M2, Ing. Petr Mazúr, Ph.D.)

Elektrokatalytické vlastnosti záporné elektrody vanadové redoxní průtočné baterie

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

Porovnávání chování suspenzí mikročástic Al_2O_3 a $\text{Pt}/\text{Al}_2\text{O}_3$ při nanášení katalytických vrstev do kanálků monolitického reaktoru

vyhlášení výsledků

Impact of process conditions on the conductivity of PANI copolymers

Bc. Jakub Kovačovič (M1)

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

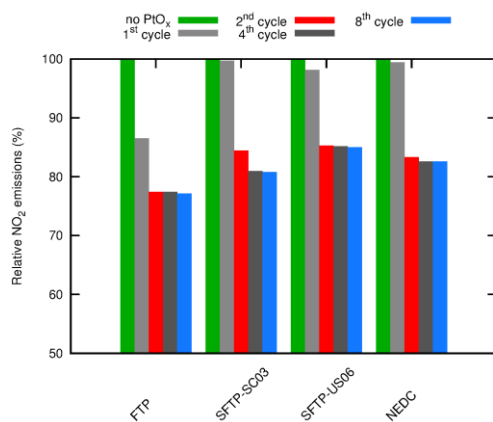
Polyaniline (PANI) is the oldest known conductive polymer, first time used as a cotton dye over century ago. Nowadays, it is the most investigated conductive polymers, thanks to its valuable electronic properties, low cost, good stability and processability. In this work, impact of process conditions on the conductivity of PANI copolymers was studied. The size of synthesized aggregates was measured by static light scattering, while the thickness of conductive polymer shell and morphology of formed aggregates were characterized by scanning electron microscope. The goal of this study was to compare freeze-drying with drying in vacuum oven and their influence on porosity and conductive properties of prepared copolymer. Achieved knowledge could help us to have better understanding and optimize the production process of PANI composites.

Vliv vzniku PtO_x a PdO_x na oxidaci NO na automobilovém katalyzátoru

Bc. Anna Hnátková (M1)

Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

U dieselových automobilů je pro splnění aktuálně platné emisní normy EURO 6 součástí výfukového potrubí vedle dieselového oxidačního katalyzátoru (DOC) a filtru pevných částic katalyzátor pro selektivní katalytickou redukci (SCR) využívající močovinu jako externí zdroj redukčního činidla NH_3 , neboť povaha výfukového plynu vycházejícího z naftového motoru je silně oxidační. Pro dosažení maximální účinnosti odstranění NO_x (rychlá SCR reakce) je zapotřebí zajistit poměr $NO_2:NO_x$ 1:2 pomocí oxidace části NO na NO_2 . Oxidační katalyzátor obsahuje drahé kovy ze skupiny platiny, nejčastěji Pt a/nebo Pd. V přítomnosti O_2 a NO_2 dochází ke vzniku oxidů těchto kovů (PtO_x a PdO_x) a tím ke značnému poklesu aktivity pro oxidaci NO. Deaktivace je vratná, avšak výrazně ovlivňuje účinnost katalyzátoru. Tento jev byl zakomponován do kinetického modelu DOC, který byl následně testován při simulaci jízdních cyklů používaných pro určení spotřeby paliva a emisí v EU a USA. Byl sledován pokles výtěžku NO_2 v důsledku vzniku oxidů Pt a Pd při opakování cyklů. Platinový katalyzátor vykazoval výrazně vyšší aktivitu pro oxidaci NO, ale zároveň podléhal více deaktivaci. Z výsledků je patrná důležitost zohlednění deaktivace v modelu pro přesnou predikci účinnosti DOC a následné řízení SCR katalyzátoru.



Obrázek 1: Emise NO_2 na výstupu z DOC při opakovaných jízdních cyklech vztahených k maximálnímu výtěžku NO_2 dosaženému na plně vyredukovaném katalyzátoru bez uvažování vzniku PtO_x .

Experimentální studium transportních jevů v membráně vanadové redoxní průtočné baterie

Bc. Daniel Götz (M1)

Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

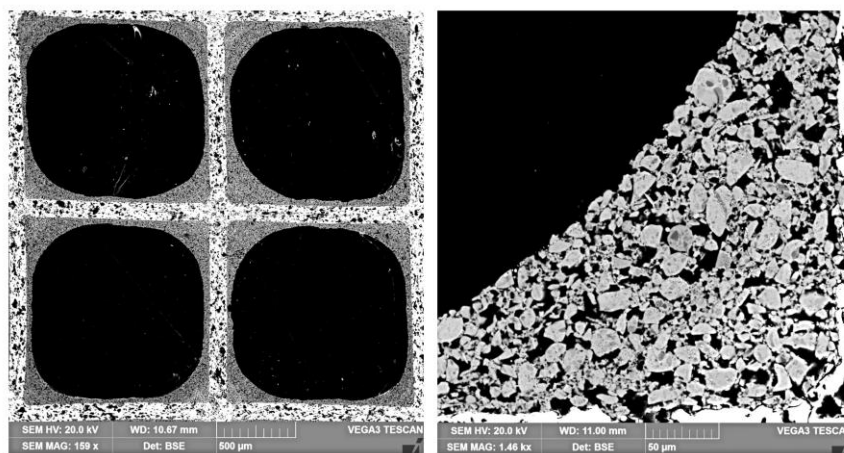
Dlouhodobý trend zvyšování časově nerovnoměrné poptávky po elektrické energii s sebou nese potřebu stabilizovat síť pomocí stacionárních uložišť, kupř. ve formě akumulátorů. Na ty jsou ale v této funkci kladené specifické požadavky zejména dlouhodobé výdrže, spolehlivosti a v neposlední řadě také nízké ceny. Právě tyto vlastnosti nabízejí vanadové redoxní průtočné baterie. Jednou z klíčových komponent, která 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 transportních jevů probíhajících v membráně při provozu baterie. Pro experimenty jsem zkonstruoval aparaturu umožňující základní charakterizaci laboratorního monočlánku a průběžné monitorování změn objemu a složení elektrolytu. Aparatura byla využita k charakterizaci několika zástupců anion a kation výměnných membrán a porézních separátorů. Byl sledován významný vliv vlastností membrány (náboj, tloušťka, iontovýměnná kapacita) na transport jednotlivých složek elektrolytu membránou a pokles kapacity v průběhu nabíjecích a vybíjecích cyklů. Tato data pak mohou sloužit k individuálnímu výběru membrány daných parametrů pro jednotlivé aplikace.

Vylepšení postupu nanášení porézních katalytických vrstev do kanálků monolitického reaktoru.

Bc. Miroslav Blažek (M1)

Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Monolitické reaktory jsou tvořeny nosičem z keramiky nebo kovu, jenž se skládá ze soustavy mnoha kanálků pokrytých tenkou porézní vrstvou katalyzátoru. Toto uspořádání umožňuje současně dosáhnout vysokého povrchu katalyzátoru a nízké tlakové ztráty, monolitické reaktory jsou proto využívány jak v chemických výrobcích, tak pro snižování množství škodlivin ve výfukových plynech automobilů. Konverze škodlivin v automobilovém katalyzátoru závisí na tloušťce a porositě nanesené vrstvy – silná vrstva znamená větší množství katalyzátoru, ten ale nemusí být zcela využit kvůli transportním omezením. Cílem prováděného výzkumu je tedy vylepšení postupu nanášení katalytické vrstvy do monolitu namáčením (dip-coating). Na tloušťku a rovnoměrnost vrstev má vliv pH suspenze katalyzátoru a její viskozita, rychlost a počet opakování namáčení monolitu a tlak použitý při profukování kanálků pro odstranění přebytečné suspenze. Tato práce se zaměřuje na úpravu postupu nanášení s důrazem na rovnoměrnost vrstev. Vhodný postup přípravy byl nalezen pro vrstvu $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ bez katalytických center. Na základě této studie budou připraveny vzorky s vrstvou katalyzátoru $\text{Pt/CeO}_2/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ s dobře definovanou tloušťkou a makroporozitou, které budou použity pro studium kinetiky chemických reakcí a transportních omezení.



Nastavení komunikace a kalibrace dálkově ovládaného zdroje pro regulaci topného okruhu reaktoru

Bc. Dominik Čapkovič (M1)

Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

LabVIEW (akronym ze slova Laboratory Virtual Instrumentation Engineering Workbench) je prostředí založené na grafickém programování, jež bylo vyvinuto firmou National Instruments. Výhoda tohoto grafického prostředí tkví v intuitivním programování komunikace mezi zařízeními, výměnou, vyhodnocováním a ukládáním dat v řídicím počítači. Zařízení mohou být připojena k počítači například pomocí DAQ (Data Acquisition) modulu, který poskytuje analogovou komunikaci 0 – 10 V. Takto připojená zařízení lze dálkově řídit, což usnadňuje práci. Měření experimentu se tak stává přesnějším a rychlejším. V této práci je naprogramováno dálkové řízení zdroje elektrické energie pro vytápění experimentálního reaktoru. Zdroj topného okruhu je připojen k DAQ kartě a pro jeho nastavení musela být změřena kalibrační křivka závislosti ovládacího napětí 0 – 10 V na napětí poskytovaného zdrojem. Takto změřená kalibrační křivka byla implementována do virtuálního prostředí LabVIEW. Tímto je umožněno ovládat výkon topení reaktoru z řídicího počítače, čímž je přesněji řízena teplota v průběhu experimentu, což vede k vyšší opakovatelnosti výsledků.

Synthesis of hydrogel microparticles for specific adhesion

Bc. Zuzana Ruberová (M2)

Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Biocompatible materials are widely used in a field of targeted drug delivery, as microparticle carriers of active pharmaceutical ingredients (API). Cancer cells are known to produce specific molecules that can be used for targeted adhesion, one example of such molecule is transmembrane antigen carbonic anhydrase IX. Microparticles functionalised by complementary antibody (IgG-M75) to this antigen are consequently specifically attached to the cancer cells. In this work, sodium alginate was used for fabrication of microparticles acting as API carrier. Iron oxide nanoparticles were incorporated into microparticles for easier separation using magnetic field and to enable their visualization in a living body. The microparticles were prepared by external gelation of microdroplets formed by encapsulator Buchi B-395 and their stability was increased by curing with chitosan. Chitosan also acts as a binder for glutaraldehyde that reacts with the specific monoclonal antibody. Therefore, surface coverage of alginate microparticles by chitosan is an important parameter that was also investigated in this work. Both chitosan and antibody were fluorescently labelled to determine surface modification of the microparticles by using scanning confocal microscopy.

Elektrokatalytické vlastnosti záporné elektrody vanadové redoxní průtočné baterie

Bc. Jindřich Mrlík (M2)

Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

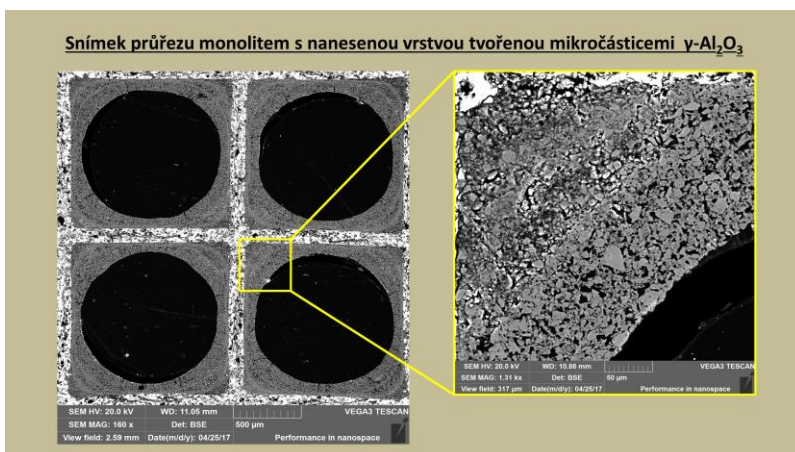
Vanadové redoxní průtočné baterie skýtají možnost efektivního stacionárního ukládání elektrické energie. To je v současné době zásadní pro další rozvoj nestabilních obnovitelných zdrojů energie. Hlavní výhodou je zde nezávislost mezi výkonem a kapacitou, vysoká účinnost a téměř neomezená životnost. Baterii tvoří bateriový svazek a externě uložené elektrolyty s ionty vanadu ve čtyřech oxidačních stavech. Elektrolyty se čerpají skrz svazek a na inertních elektrodách zde dochází ke konverzi energie. Jako elektrod se používá uhlíkových plstí pro jejich velký povrch, stabilitu a nízký elektrický i hydrodynamický odpor. Elektrody jsou odděleny membránou a spojeny do série pomocí kompozitních desek. Elektrokatalytické vlastnosti plstí je obvyklé vylepšovat tepelnou úpravou, jejíž optimální teplota se liší. V předchozím výzkumu jsme při hledání optimální teploty zjistili, že tato úprava má významný přínos pouze pro kinetiku záporné elektrodové reakce. Aktivace je souhrou oxidace a zvětšení povrchu plstí. Cílem této práce je vysvětlení těchto vlivů na vlastnosti záporné elektrody pomocí komplexní analýzy plstí upravených při různých teplotách.

Porovnávání chování suspenzí mikročástic Al_2O_3 a $\text{Pt}/\text{Al}_2\text{O}_3$ při nanášení katalytických vrstev do kanálků monolitického reaktoru

Bc. Patrik Labík (M2)

Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

V důsledku stále se zpřísnujících emisních norem musí být dnes každé vozidlo vybaveno katalytickým konvertorem, který snižuje množství škodlivin ve výfukových plynech. Automobilové katalyzátory sestávají z keramického nebo kovového nosiče s velkým množstvím souběžných kanálků, na který je nanесena porézní katalytická vrstva obsahující nanočástice vzácných kovů (Pt, Pd, Rh), které zajišťují chemickou přeměnu škodlivin. Tato práce navazuje na předchozí studii zabývající se nanášením tenkých vrstev tvořených pouze mikročásticemi $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ do kanálků monolitického reaktoru, ve které byl zkoumán vliv parametrů přípravy (např. viskozita a pH suspenze nebo velikost mikročástic) na konečnou tloušťku, porozitu a rovnoměrnost nanесené vrstvy. Cílem této práce bylo porovnání chování suspenze obsahující pouze mikročástice Al_2O_3 a stejné částice naimpregnované platinou (1% hm.), tak aby bylo možné využít poznatky z předchozí studie při nanášení vrstev $\text{Pt}/\text{Al}_2\text{O}_3$ s definovanou tloušťkou a makroporozitou. Připravené monolity s vrstvou $\text{Pt}/\text{Al}_2\text{O}_3$ pak mohou být otestovány v laboratorním reaktoru. Získané výsledky v budoucnu poslouží k přípravě katalyzátorů se složitější formulací a také pro ověření a vývoj matematického modelu reakcí a transportu v porézních katalyzátorech.



Chemické inženýrství 5

MÍSTO: BS4

KOMISE

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

Ing. Petr Stanovský, Ph.D.

Ing. Simon Jantač

Ing. Tereza Čmelíková

Ing. Jan Hronza, Ph.D. (Ricardo)

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:40 [Bc. Jan Němec](#) (M1, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

Analýza a modelování automobilových filtrů pevných částic

09:00 [Bc. David Minx](#) (M1, doc. Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.)

Chování heterogenních iontově-výměnných membrán v přítomnosti DNA

09:20 [Bc. Štěpán Halada](#) (M1, doc. Ing., Zdeněk Slouka, Ph.D.)

Výroba mikrofluidních systémů

09:40 [Bc. Lukáš Bláha](#) (M1, doc. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.)

Impact of particles shape on their aggregation behaviour

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

Vznik PtO_x v automobilovém oxidačním katalyzátoru a jeho vliv na konverzi NO

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

Senzory s iontově-výměnnými membránami, určené k detekci nukleových kyselin



11:00 [Bc. Jiří Charvát](#) (M2, Ing. Jaromír Pociďč, Ph.D.)

Vliv tlakových ztrát na chování vanadové redoxní průtočné baterie

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

*Vývoj technologie ke sledování změn v průsakových vodách z oblastí uložišť
jaderného odpadu*

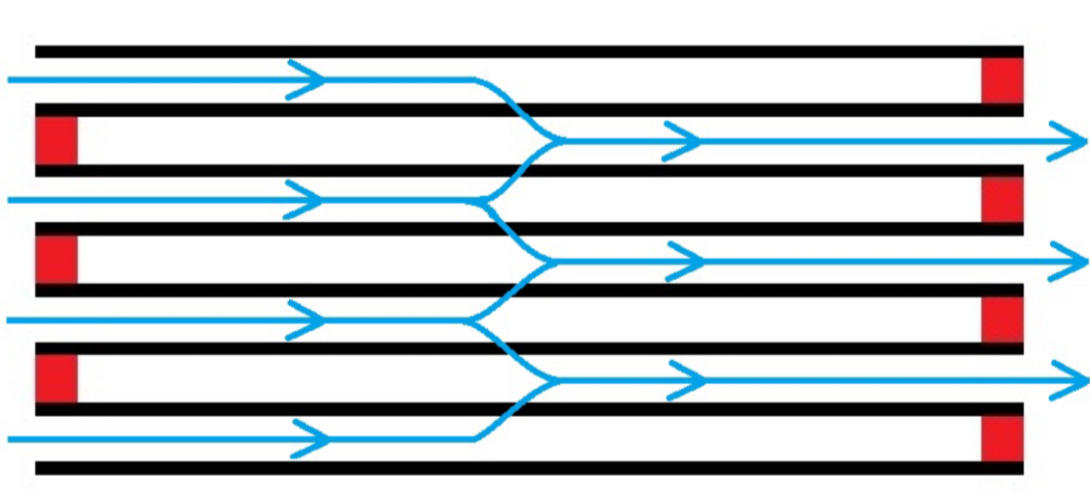
vyhlášení výsledků

Analýza a modelování automobilových filtrů pevných částic

Bc. Jan Němec (M1)

Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Výfukové plyny obsahují mikroskopické částice sazí, na jejichž povrchu mohou být navázány další škodlivé látky. Množství sazí je proto regulováno emisními normami. Filtry pevných částic jsou dnes nepostradatelnou součástí všech automobilů s dieslovými motory a nově jsou řazeny také za některé 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, konkrétně z kontrakce/expanze plynu na vstupu/výstupu z filtru, jeho proudění kanálkem a průchodu skrz porézní stěnu. V této práci je diskutován význam jednotlivých příspěvků. Jejich velikost je stanovena porovnáním tlakových ztrát naměřených pro filtry o různé délce a výsledků matematického modelu filtru pevných částic. Zkoumán byl také vliv přítomnosti katalyzátoru v pórech filtru na efektivní permeabilitu stěny.



Chování heterogenních iontově-výměnných membrán v přítomnosti DNA

Bc. David Minx (M1)

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

Iontově-výměnné membrány (IVM) se používají napříč celým spektrem elektromembránových procesů. Typickými příklady jsou elektrodialýza či elektrodeionizace. Během těchto procesů může v závislosti na složitosti odsolovaného vzorku docházet k usazování anorganických a organických částic na IVM. Kromě toho, že toto znečištění zvyšuje odpor membrán, může též za určitých podmínek dojít ke vzniku neočekávaných jevů, které mohou výrazně snížit účinnost elektromembránových procesů. Jedním z takových jevů může být štěpení vody. Tato práce je věnována zanášení IVM molekulami nukleových kyselin (DNA). Především na aniontové heterogenní výměnné membráně je toto zanášení podpořeno elektrostatickými přitažlivými silami, které vedou k intenzivní adsorbci molekul DNA na membránu. Tenká vrstvička naadsorbované DNA společně s aniontovou IVM obsahující kladné funkční skupiny tvoří bipolární spojení, na kterém po aplikaci vnějšího elektrického pole běžně dochází ke štěpení vody. V této práci se zaměřuji na interakce mezi IVM a molekulami DNA. Tyto interakce jsou studovány pomocí měření chronoampérometrických a napět proudových křivek na mikročipech pro různé koncentrace DNA v 10 mM roztocích KCl. Zároveň pomocí trasovacích částic je sledována intenzita vírů vznikajících na diluátové straně IVM.

Výroba mikrofluidních systémů

Bc. Štěpán Halada (M1)

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

Mikrofluidní systémy s integrovaným polem kovových elektrod nalézají mnoho zajímavých aplikací jak v oblasti základního (např. měření prostorového rozložení elektrického potenciálu) tak aplikovaného výzkumu (elektrochemické a elektrokinetické biosenzory). Tato práce popisuje souhrnný postup pro výrobu epoxidových mikrofluidních čipů se zlatým polem mikroelektrod, který kombinuje techniky fotolitografie, galvanického pokovování a odlévání. Fotolitografie se provádí do speciálního fotorezistu SU-8, který umožňuje dosahovat velmi vysokých poměrů výška ku šířce struktur. V rámci této práce jsme provedli studii týkající se nanášení vrstev fotorezistů SU-8 pro dosažení různých výšek vrstvy a následně optimalizovali proudové hustoty během elektrodepozice zlata do strukturovaného fotorezistu naneseného na elektricky vodivém substrátu. Díky vlastnostem fotorezistu a kombinací těchto dvou technologií lze dosáhnout vyšších elektrod než u známé technologie obětovaného substrátu. Dále byl vyvinut postup pro celkovou kompletaci čipů a jejich uvedení do provozu. Čipy vyrobené pomocí SU-8 fotorezistu jsme porovnali s čipy vyrobenými pomocí tradiční technologie obětovaného substrátu a vyhodnotili výhody a nevýhody z hlediska jejich výroby.

Impact of particles shape on their aggregation behaviour

Bc. Lukáš Bláha (M1)

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

Porous materials have great usage in many engineering applications. There are several ways how to create porous materials with suitable properties. One of the ways is to use nanoparticles followed by their assembly into 3D structure. In the present study we are using aggregation of nanoparticles to create bulk material. To optimize properties of porous material in this work we investigate the aggregation process, where nanoparticles of various shapes will be used as building blocks. Experimental investigation is done for both diluted but also concentrated suspension of particles under stagnant conditions. It was found that presence of fibers significantly influence the aggregation phenomena. Gained knowledge will be used in the future to optimize porous material mechanical properties.

Vznik PtO_x v automobilovém oxidačním katalyzátoru a jeho vliv na konverzi NO

Bc. Jiří Štěrba (M2)

Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

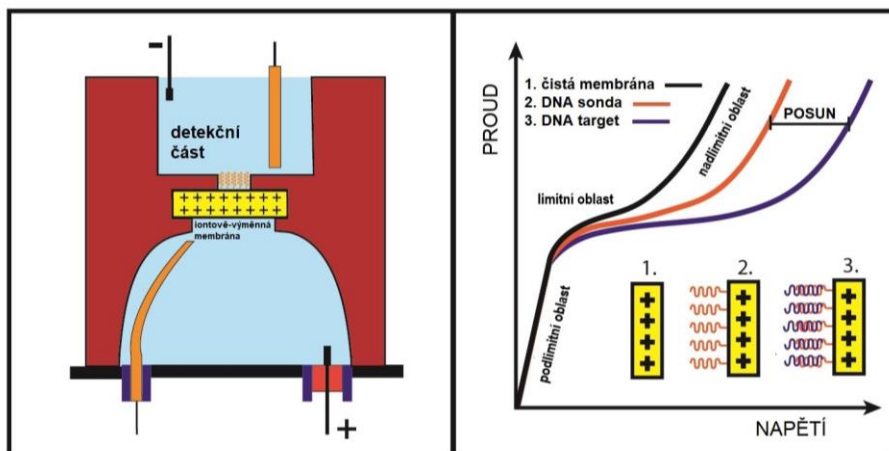
Emise produkované spalovacími motory automobilů přispívají ke znečištění životního prostředí. Za účelem snížení těchto emisí jsou do výfukového systému zařazeny automobilové katalyzátory, které pomocí chemických reakcí přeměňují nespálené zbytky uhlovodíků, oxidy dusíku a oxid uhelnatý na dusík, oxid uhličitý a vodu. Cílem této práce je posoudit vliv vratné deaktivace platinových aktivních center na povrchu dieselového oxidačního katalyzátoru typu Pt/Al_2O_3 . Byla provedena série izotermních experimentů při teplotách 150 °C a 200 °C s pulzy oxidu uhličitého a propenu. Při těchto experimentech byla sledována nejen deaktivace katalytických center (vznik PtO_x) v chudých podmínkách, ale i zpětná aktivace částic platiny způsobená pulzy CO a C_3H_6 . Dále byla provedena série experimentů v podobě teplotních ramp se vstupní teplotou rostoucí od 80°C do 400°C a následně klesající zpět od 400°C do 80°C. U těchto experimentů byla sledována hystereze, neboli rozdíl mezi teplotou zapálení a zhasnutí oxidace NO. Tato hystereze je způsobena citlivostí reakce na stav katalytických center (Pt versus PtO_x), který se v průběhu experimentů měnil.

Senzory s iontově-výměnnými membránami, určené k detekci nukleových kyselin

Bc. Petr Kovář (M2)

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

Mikrozařízení se zabudovanou iontově-výměnnou membránou nabízí celou řadu aplikací zaměřených např. na čerpání tekutin, úpravu pH roztoků, či separaci, zakoncentrování a detekci určitých (bio-)molekul. Tato práce pojednává o poslední ze zmíněných aplikací. Cílem je vyvinout sensor detekující přítomnost DNA/RNA molekul o dané sekvenci nukleotidů a stanovit jejich koncentraci. Tento sensor bude v budoucnu součástí zařízení detekující nukleové kyseliny ve vzorku krve, které jsou potencionálními biomarkery různých typů rakovin. Princip zařízení je založen na skutečnosti, že jednovláknová, záporně nabitá DNA/RNA významně ovlivňuje tok iontů aniontově-výměnnou membránou. Na povrchu takovéto membrány je nejdříve kovalentně navázána jednovláknová DNA sonda, která zajišťuje specifitu vůči hledané komplementární molekule DNA/RNA. Při úspěšné hybridizaci dochází ke zvýšení koncentrace záporného náboje neseného nukleovými kyselinami na membráně, jež obsahuje kladný fixovaný náboj. Vzniká systém podobný bipolární membráně, která zapříčiňuje přechod z elektrokonvektivně řízeného transportu iontů na transport řízený štěpením vody. Tento příspěvek bude zaměřen na vysvětlení principu fungování senzoru a prezentaci vybraných výsledků týkajících se specifické detekce nukleových kyselin.



Vliv tlakových ztrát na chování vanadové redoxní průtočné baterie

Bc. Jiří Charvát (M2)

Školitel: Ing. Jaromír Pocedič, Ph.D.

Produkce elektřiny z časově proměnlivých obnovitelných zdrojů strmě roste. Tento trend však vyžaduje budování nových stacionárních uložišť energie, které mohou pomoci stabilizovat tuto energii a zefektivnit její využití. Vanadová redoxní průtočná baterie se jeví jako ideální stacionární úložiště vzhledem ke snadno modifikovatelné kapacitě (kWh), vysoké účinnosti a velmi dobré životnosti. Klíčovou komponentou baterie je inertní elektroda, v tomto případě uhlíková plst, na níž dochází ke konverzi energie prostřednictvím elektrochemických reakcí. Použití uhlíkové plsti je motivováno její výbornou chemickou stabilitou, vysokou elektrickou vodivostí a nízkou cenou. Účinnost baterie velkou měrou závisí na odporu a elektrokatalytických vlastnostech plsti, současně je však třeba uvažovat energii potřebnou k čerpání elektrolytů skrz bateriový svazek. Cílem této práce je tedy nalézt optimum mezi tlakovou ztrátou, která se zvyšuje s kompresí plsti a elektrickým odporem, který se naopak se zvyšující se kompresí snižuje. K tomuto účelu byly navrženy dvě aparatury. Jedna, která umožňuje sledovat elektrický odpor plsti v závislosti na stlačení a druhá, která umožňuje sledovat tlakovou ztrátu v experimentální cele v závislosti na stlačení plsti, průtoku elektrolytu a vnitřní geometrii cely.

Vývoj technologie ke sledování změn v průsakových vodách z oblastí uložišť jaderného odpadu

Bc. Dominik Kralík (M2)

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

I přesto, že se místa pro trvalá uložišť jaderného odpadu vybírají s největší pečlivostí, stále existuje riziko kontaminace okolní půdy nebo podzemní či průsakové vody. V současné době se pro analýzu průsakových vod využívají klasické analytické metody, které jsou sice přesné, ale samotná analýza trvá příliš dlouho. Cílem vědců je vyvinout senzor, který by byl integrován na místě uložště a poskytoval by data v reálném čase pro včasný zásah proti případné kontaminaci. Tato práce se věnuje vývoji průtočného elektrochemického senzoru, který by umožňoval kontinuální sledování změn v impedanci průsakových vod v místě jaderného uložště, např. v prasklinách skal. V současné době testujeme tento přístup na modelovém systému skládajícího se zjednoduchého fluidního kanálku a tyčové měřicí elektrody. Zatímco kanálek má za úkol imitovat reálnou štěrbinu, tyčová elektroda je prvním prototypem měřidla, jenž by se později do reálných uložšť montoval. Tento systém se testuje pomocí měření elektrochemické impedanční spektroskopie na kanálcích naplněných různě koncentrovanými roztoky KCl za různých podmínek měření v různých režimech. V příspěvku budou prodiskutovány experimenty s vodnými roztoky KCl o přesně daných vodivostech (koncentracích) jak v ustáleném stavu, tak v průtočném systému.

Ústav ekonomiky a managementu (837)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Mgr. Ing. Marek Boteck, Ph.D.

SPONZOŘI ÚSTAVU EKONOMIKY A MANAGEMENTU



Ekonomika a management

MÍSTO: C11

KOMISE

prof. Ing. Ivan Gros, CSc. (předseda)

Ing. Jakub Dyntar, Ph.D.

Ing. Olga Kutnohorská, Ph.D.

Ing. Petra Zemanová, Ph.D.

PROGRAM

08:00 **zahájení**

08:15 [Bc. Jakub Ottenschläger](#) (M2, Ing. Petra Zemanová, Ph.D.)

Optimalizace produktového portfolia

08:35 [Bc. Alena Krausová](#) (M2, Ing. Dana Strachotová, Ph.D.)

Optimalizace práce v chemické laboratoři

08:55 [Bc. Michal Špalek](#) (M2, Ing. Olga Kutnohorská, Ph.D.)

Trendová Analýza

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

Chléb včera, dnes a zítra - analýza spotřeby v souvislostech

09:35 [Bc. Kristýna Kamlarová](#) (M2, Ing. Dana Strachotová, Ph.D.)

Analýza trhu s pekárenskými produkty

10:00 [Bc. Ondřej Knop](#) (M2, Ing. Dana Strachotová, Ph.D.)

Reorganizace logistických toků a činností ve skladu L1

10:20 [Bc. Veronika Šímová](#) (M2, Ing. Dana Strachotová, Ph.D.; Ing. Petra Zemanová, Ph.D.)

Časová studie práce v chemické laboratoři



10:40 [Bc. Jakub Rosák](#) (M2, Ing. Olga Kutnohorská, Ph.D.)

Získávání nových retailových zákazníků v Linde Gas

11:00 [Bc. Leoš Kořený](#) (M2, Ing. Dana Strachotová, Ph.D.)

Analýza DP pro MITAS/Optimalizace analytického testování v gumárenské výrobě

vyhlášení výsledků

Optimalizace produktového portfolia

Bc. Jakub Ottenschläger (M2)

Školitel: Ing. Petra Zemanová, Ph.D.

Práce se zabývá optimalizací produktového portfolia firmy s cílem snížení kapitálu vázaného ve skladových zásobách. Jedná se o projekt zpracovaný v rámci stáže ve firmě Logio s.r.o., využívající pokročilého reportingového programu MS Power BI desktop. Tento nástroj Business Intelligence umožňuje sestavení relační databáze všech podstatných dat, analytické zpracování obsahu a interaktivní vizualizaci výsledků. Na základě multikriteriální Paretovy analýzy jsou roztříděny produkty a navržena optimalizace, která je předána jednotlivým obchodním vedoucím k odbornému posouzení.

Optimalizace práce v chemické laboratoři

Bc. Alena Krausová (M2)

Školitel: Ing. Dana Strachotová, Ph.D.

Práce se zaměřuje na optimalizaci práce v chemické laboratoři. Obsah je tedy zaměřen na možné metody identifikace plýtvání, zvolení vhodné metodiky sběru dat, analýze zjištěných dat a následné optimalizaci vedoucí k efektivnímu využití pracovního času. Cílem práce je tedy identifikace plýtvání při práci v laboratoři a zefektivnění využívaného času práce.

Trendová Analýza

Bc. Michal Špalek (M2)

Školitel: Ing. Olga Kutnohorská, Ph.D.

Statistická regulace (ve farmacii trendová analýza) patří mezi hlavní statistické metody, které se uplatňují v podnikové praxi. Pomocí statistické regulace se dá zjistit, zda je výrobní proces pod statistickou kontrolou, což bylo i hlavním úkolem práce. Jedním z úkolů práce bylo zjistit, zda se jednotlivé výtěžky uvedeného meziprojektu pohybují uvnitř regulačních mezí. V teoretické části práce je popsána statistická regulace výrobního procesu, její princip, dále jsou v této práci uvedeny jednotlivé typy regulačních diagramů, které se mohou využívat, kde hlavní část této kapitoly je věnována Shewhartovým diagramům. Poslední kapitola teoretické části práce popisuje princip testu odlehlých hodnot, který bude proveden v praktické části práce. V praktické části práce je znázorněn rovněž regulační diagram, který by měl potvrdit, že je výrobní proces pod statistickou kontrolou a v pořádku. Dílčím úkolem, jehož výsledek bude na konferenci prezentován, je znázornění výrobního schématu jednotlivých meziprojektů, které podnik, kde prezentující působil v rámci letní praxe, vyrábí. Práce zahrnuje i Shewhartovy diagramy, a v neposlední řadě byl proveden test odlehlosti hodnot, aby bylo zjištěno, zda je možné nesouhlasnou hodnotu z výběrového souboru naměřených hodnot výtěžků vyloučit.

Chléb včera, dnes a zítra - analýza spotřeby v souvislostech

Bc. Martina Holá (M2)

Školitel: Ing. Dana Strachotová, Ph.D.

Tato práce se zaměřuje na současný stav pekárenského odvětví u nás, popis současných trendů a problémů, s kterými se pekárenské podniky musí vypořádat. Podkladem pro tuto práci byla statistická data a rozhovory s odborníky ve svém oboru. Teoretická část práce obecně popisuje historii pekárenství a technologií používaných v oboru. V praktické části je analyzována spotřeba chleba a testovány metody pro předpověď poptávky.

Analýza trhu s pekárenskými produkty

Bc. Kristýna Kamlarová (M2)

Školitel: Ing. Dana Strachotová, Ph.D.

Prezentovaná práce popisuje současný stav pekárenského odvětví a přítomné trendy manifestované zejména klesající spotřebou chleba. Analyzovány byly jak přítomný pokles spotřeby, tak možné příčiny tohoto jevy. K tomuto bylo využito dotazování odborníků, analýza s pomocí software a dotazníkového šetření mezi spotřebiteli. Kvalitní popsání problému umožní v budoucnu podnikům v odvětví adekvátně reagovat na vzniklou situaci na trhu, což bude mít pozitivní dopad na situaci v odvětví, tak i na konečného spotřebitele.

Reorganizace logistických toků a činností ve skladu L1

Bc. Ondřej Knop (M2)

Školitel: Ing. Dana Strachotová, Ph.D.

Předložená práce se zaměřuje na regionalizaci logistických toků a činností na skladu L1 ve firmě Knorr-Bremse v Liberci. Tato firma je světovým výrobcem brzdných systémů pro kolejová a užitková vozidla. Firma měla celkem dva sklady, sklad H5 a L1. Ve stávajícím procesu probíhala výroba a skladování v budově H5. V novém projektu došlo k přesunu skladování na L1 a mou náplní práce bylo zmapování procesů souvisejících s novým systémem skladování a tvorba SOS návodek. Cílem mé práce bylo zmapování nových procesů a vypracování SOS návodek především pro nově příchozí pracovníky z důvodu rychlého zaškolení do procesu, mapování a vizualizace procesu.

Časová studie práce v chemické laboratoři

Bc. Veronika Šímová (M2)

Školitel: Ing. Dana Strachotová, Ph.D.; Ing. Petra Zemanová, Ph.D.

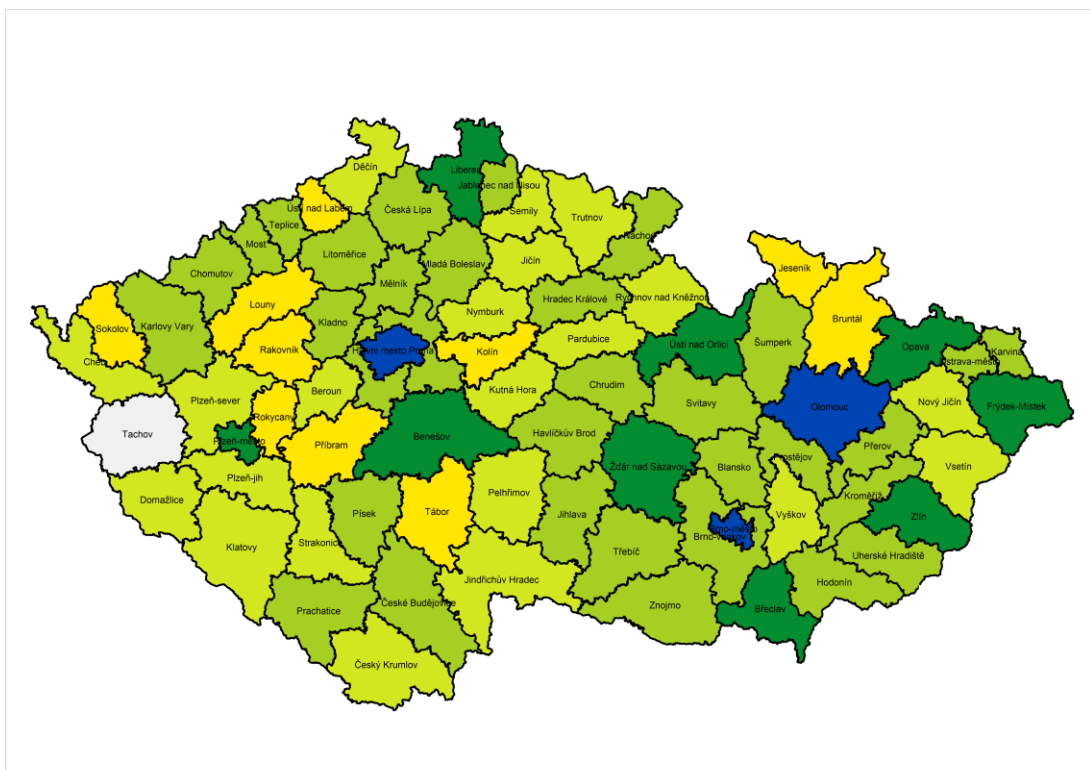
Chemická laboratoř není typickým místem, kde se provádí měření práce pomocí sledování času potřebného k odvedení zadaných pracovních úkolů. Časové studie se ovšem využívají v mnoha oblastech průmyslu, kde přinášejí velké efekty, a proto bylo rozhodnuto pokusit se vybrané techniky aplikovat i v chemické laboratoři. Konkrétně se jednalo o časový snímek dne. Byla jsem součástí týmu, který vytvořil komplexní výstup z těchto měření. Tento výstup je bohužel utajován a nemůže být veřejně prezentován, a proto budu v rámci Studentské vědecké konference prezentovat především to, jakým způsobem byl časový snímek dne zaimplementován do prostředí chemické laboratoře, jaká to přináší úskalí, čeho se vyvarovat a jaké jsou přínosy. Byla provedena dvě měření dvou různých směn v dubnu a květnu roku 2017. Získaná data byla využita pro zvýšení efektivity práce v laboratoři.

Získávání nových retailových zákazníků v Linde Gas

Bc. Jakub Rosák (M2)

Školitel: Ing. Olga Kutnohorská, Ph.D.

Práce popisuje přípravu, průběh a výsledky telemarketingové kampaně ve společnosti Linde Gas a.s., kde autor působí jako stážista. Vychází z teoretických poznatků v oblasti přímého marketingu a jeho nástrojů, dále na základě hospodářských výsledků podniku a makroekonomických dat analyzuje pozici sledované firmy v rámci českého trhu s technickými plyny a věnuje se také problematice segmentace zákazníků a trhu, a to jak teoreticky, tak z hlediska podnikové praxe. Na těchto základech pak zkoumá ve třech fázích (segmentace, cílení a umístování) proces tvorby konkrétní kampaně na získávání nových retailových zákazníků, rozebírá její výsledky z obchodního i marketingového hlediska a srovnává je s teoretickými východisky práce.



Analýza DP pro MITAS/Optimalizace analytického testování v gumárenské výrobě

Bc. Leoš Kořený (M2)

Školitel: Ing. Dana Strachotová, Ph.D.

Práce se zabývá analýzou vědeckých prací na VŠCHT Praha, jež byly za posledních 20 let řešeny ve spolupráci se společností MITAS a.s. Prvním východiskem této práce je revaluace stávajících řešených témat a nalezení nových pro dlouhodobou spolupráci. Zkoumané práce pocházejí z různých ústavů (ústav polymerů, ústav analytické chemie, ústav ekonomiky a managementu), a poukazují na široké portfolio projektů, jež jsou na škole zpracovávány. Součástí práce je i obsáhlá analýza technologického procesu výroby pneumatik se zaměřením na jednotlivé dílčí kroky a ekonomická analýza celého systému včetně podrobného rozboru.

Ústav fyziky a měřicí techniky (444)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

doc. Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.

SPONZOŘI ÚSTAVU FYZIKY A MĚŘICÍ TECHNIKY



Fyzika a měřicí technika

MÍSTO: ÚSTAV FYZIKY A MĚŘICÍ TECHNIKY B220

KOMISE

doc. Ing. Jaroslav Hofmann, CSc. (předseda)

Ing. Ondřej Ekrt, Ph.D.

Ing. Ladislav Fišer, Ph.D.

Ing. Martin Straka, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Kateřina Jarkovská](#) (B3, prof. Dr. Ing. Martin Vršata)

Nanostrukturované oxidy pro aktivní vrstvy chemirezistorů

09:15 [Bc. Jaroslav Otta](#) (M2, Ing. Přemysl Fitl, Ph.D.)

Příprava mikrosenzorů plynů pomocí přímého laserového psaní

09:30 [Bc. Jan Fara](#) (M2, Ing. Přemysl Fitl, Ph.D.)

Software pro měření a řízení senzorové pole se šestnácti vodivostními senzory

09:45 [Bc. Jakub Svoboda](#) (M1, Ing. Josef Khun, Ph.D.)

Příprava nanostrukturního křemíku a její optimalizace

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

Výsledky předběžné studie léčby onychomýkóz nízkoteplotním plazmatem

10:15 [Bc. Martin Hruška](#) (M1, Ing. Přemysl Fitl, Ph.D.)

Fotoregenerace chemických senzorů na bázi ftalocyaninů

10:30 [Bc. Lukáš Machek](#) (M1, RNDr. Pavel Galář, Ph.D.)

Studium povrchové modifikace nanostrukturního diamantu plazmatem



10:45 [Bc. Stanislav Valtera](#) (M1, Ing. Dušan Kopecký, Ph.D.)

Vliv pH prostředí na stabilitu elektrické vodivosti polypyrrolu

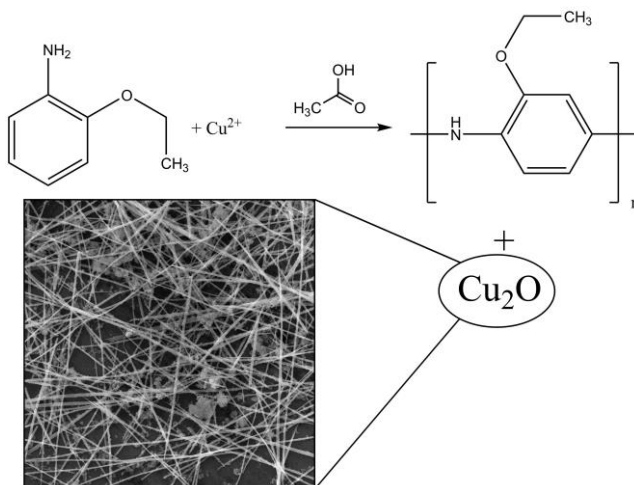
vyhlášení výsledků

Nanostrukturované oxidy pro aktivní vrstvy chemirezistorů

Kateřina Jarkovská (B3)

Školitel: prof. Dr. Ing. Martin Vrnáta

Nanostrukturované materiály jsou v současné době intenzivně studovány, především díky svým fyzikálně-chemickým vlastnostem, které se u běžných materiálů nevyskytují. Své uplatnění by mohly mimo jiné najít v odvětví chemických plynových senzorů. Důležitou součástí takových senzorů je aktivní vrstva, která interaguje s plynným analytem a mění své elektrofyzikální vlastnosti. Citlivost senzoru může být ovlivněna např. specifickým povrchem aktivní vrstvy, selektivita senzoru pak např. její morfologií. Nanostrukturováním aktivní vrstvy je možné zvýšit její specifický povrch a tím přímo ovlivnit citlivost senzoru. Selektivitu lze ovlivnit např. velikostí pórů či kanálků apod. Materiálem pro aktivní vrstvu chemických plynových senzorů jsou zpravidla anorganické nebo organické polovodiče. Z anorganických materiálů se jedná převážně o oxidy kovů. Tato práce se zabývá přípravou nanodrátů Cu_2O , které slouží jednak jako materiál pro aktivní vrstvu chemických senzorů a jednak jako výchozí materiál pro přípravu nanotrubelek SnO_2 , které budou v další části práce rovněž využity jako materiál aktivní vrstvy senzorů. V rámci experimentů byla studována morfologie připravených struktur pomocí SEM a TEM. Byly provedeny prvotní experimenty pro zjištění senzorických vlastností připravených materiálů.

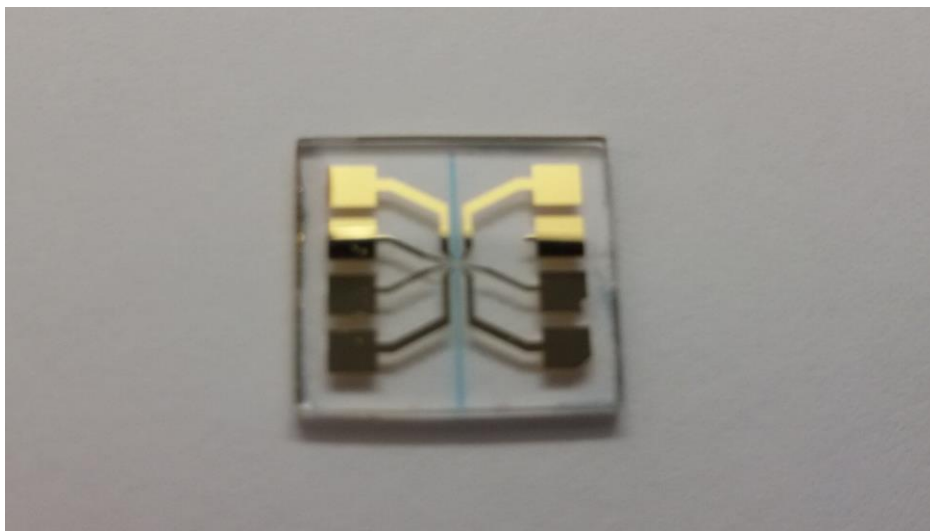


Příprava mikrosenzorů plynů pomocí přímého laserového psaní

Bc. Jaroslav Otta (M2)

Školitel: Ing. Přemysl Fitl, Ph.D.

Oblastí s uplatněním tenkovrstvých plynových senzorů je mnoho (zdravotnictví, ochrana životního prostředí...). S rostoucími požadavky je potřeba vyvíjet nové metody detekce a nové citlivé vrstvy, které vykazují nízkou mez detekce, vysokou citlivost a vysokou selektivitu. Tato práce se zabývá tvorbou senzorů plynů pomocí depozice citlivé vrstvy laserovým psaním s využitím kontinuálního polovodičového laseru s vlnovou délkou 405 nm. V práci se zabývám optimalizací technologie pro přípravu vodivostních senzorů (chemirezistorů) vyžívajících mikrostrukturu tvořenou citlivým materiálem (ftalocyaninem zinku) o šířce v rozmezí 3–10 μm která je nanesena na systém mikroelektrod. Dalším možným využitím je příprava mikrostruktur pro optické plynové senzory využívající difrakčních vlastností. V rámci optimalizace aparatury a litografie se zlepšila nejmenší litografická stopa laseru na 4 μm . Fokuse laseru a určení ohniska se optimalizovalo připojením kamery do okuláru a umístěním přísvitů k objektivu. Dalším krokem optimalizace bude sjednotit z-souřadnici ohniska laseru a fokus optiky pomocí dalších optických prvků (např. čoček), aby bylo možné povrchové jevy (krystalizace, odpařování, vytvrzování...) při laserování sledovat v reálném čase.



Software pro měření a řízení senzorové pole se šestnácti vodivostními senzory

Bc. Jan Fara (M2)

Školitel: Ing. Přemysl Fitl, Ph.D.

V rámci této práce je vyvíjen měřicí a řídicí software pro 16-senzorový elektronický nos v prostředí NI LabVIEW. Tento software zajišťuje komplexní automatizaci celého měření – měření elektrického odporu chemirezistivních vrstev, měření a řízení jejich teploty a ovládání plynového hospodářství. V současné době je hotova architektura celého softwaru a dva celé podprogramy. Jeden je určen pro kalibraci platinových topných meandrů jako teploměrů a druhý pro měření odezev 1 až 16 chemirezistorů při různých teplotách a působících plynech. Program pro komunikaci s hardwarem využívá ovladače DAQmx, NI-VISA a DAQNav.

Příprava nanostrukturního křemíku a její optimalizace

Bc. Jakub Svoboda (M1)

Školitel: Ing. Josef Khun, Ph.D.

Práce pojednává o přípravě nanoporézního křemíku elektrochemickým leptáním a o optimalizaci jeho přípravy na nově vyrobené aparatuře. Optimalizaci jsme prováděli změnou doby leptání a změnou proudu procházejícího elektrolytem. Leptání probíhalo v elektrolytu složeném z kyseliny fluorovodíkové a ethanolu při působení malých proudů. Vzorky vyrobeného porézního křemíku byly z hlediska morfologie povrchu charakterizovány na skenovacím elektronovém mikroskopu. Chemické složení bylo zkoumáno pomocí EDS sondy.



Výsledky předběžné studie léčby onychomýkóz nizkoteplotním plazmatem

Bc. Lucie Kujalová (M2)

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

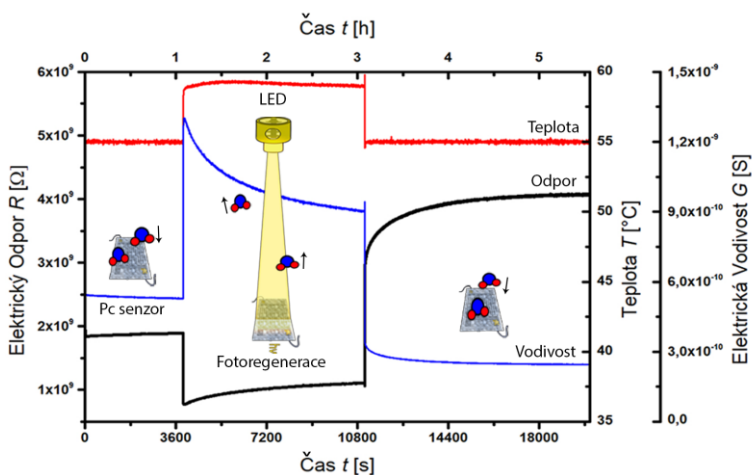
Práce se zabývá dekontaminačními účinky nizkoteplotního plazmatu generovaného korónovým výbojem na různé druhy mikroorganismů zahrnující plísně a bakterie. Účinky jsou testovány pro různé doby expozice v podmínkách *in vitro*, a také *in vivo*. V prvním případě byly mikroorganismy nanесeny na živné médium a zde exponovány, v druhém případě byly plazmatem ošetřovány prsty nohou napadené plísní u vybrané skupiny pacientů.

Fotoregenerace chemických senzorů na bázi ftalocyaninů

Bc. Martin Hruška (M1)

Školitel: Ing. Přemysl Fitl, Ph.D.

Tenké filmy makromolekulárních organických látek, jako jsou ftalocyaniny, či jiná analoga porfyrinového kruhu, jsou často využívány jako aktivní vrstvy pro chemické senzory. Tyto senzory vykazují změny elektrických vlastností při expozici elektrofilními plyny a díky tomu mohou sloužit jako jednoduché analytické prostředky pro detekci celé řady chemických látek, jejichž sledování je pro lidskou společnost významné. Pro správnou funkci těchto senzorů a možnost jejich opakovaného použití je však potřeba, aby interakce mezi analyzovanými látkami a aktivní vrstvou senzoru byly reverzibilní, a sensor určitým způsobem regeneroval. Nejčastěji se u vodivostních senzorů na bázi ftalocyaninů používá takzvaná teplotní regenerace, kterou však provází četná úskalí. Nedávné experimenty ukázaly, že se teplotní regeneraci můžeme vyhnout, pokud použijeme světelné záření o definované vlnové délce a intenzitě. Cílem této práce je blíže prozkoumat foto-indukované děje probíhající na aktivní vrstvě chemických senzorů a analyzovat proces fotoregenerace i z dlouhodobějšího hlediska. Nabyté poznatky by mohli přispět jak k lepšímu pochopení fyzikální podstaty interakce mezi ftalocyaninovým filmem a vázaným plynem, tak k nasazení jednoduše regenerovatelných ftalocyaninových senzorů do praktického použití.



Studium povrchové modifikace nanostrukturního diamantu plazmatem

Bc. Lukáš Machek (M1)

Školitel: RNDr. Pavel Galář, Ph.D.

Nanostrukturní diamanty s modifikovaným povrchem jsou v posledních desetiletích studovány především pro důležitá uplatnění v medicíně a mikroelektronice, také ale z dalších důvodů. Cílená změna povrchu totiž umožňuje snížit chemickou inertnost tohoto polovodiče a aplikačně využít mnoho jeho výjimečných vlastností. V rámci experimentů byl studován vliv nízkoteplotního plazmatu na povrchové vlastnosti nanodiamantových klastrů. Snahou bylo vzorky diamantu vhodnými metodami charakterizovat a dokázat účinnost ověřované modifikační metody založené na plazmatu a dále určit vliv chemického prostředí (vody, ethanolu a chloroformu) a energie generující plazma. Bylo prokázáno, že nízkoteplotní plazma je schopno již v rámci několika minut efektivního zakončení povrchu diamantu kyslíkem a chlorem. Modifikované vzorky také vykazovaly změny luminiscenčních vlastností, vodivosti a zeta potenciálu. Analýzou snímků z elektronového mikroskopu byl navíc vyvrácen destrukční vliv na klastry diamantu.

Vliv pH prostředí na stabilitu elektrické vodivosti polypyrrolu

Bc. Stanislav Valtera (M1)

Školitel: Ing. Dušan Kopecký, Ph.D.

Vodivé polymery vystavené alkalickým činidlům snadno podléhají tzv. deprotonaci, která se projevuje v řádovém poklesu jejich měrné elektrické vodivosti. Pomocí anorganických kyselin lze jejich elektrickou vodivost částečně obnovit – tj. polymer reprotonovat. Znalost mechanismu cyklu deprotonace/reprotonace je stěžejní pro využití vodivých polymerů zejména v oblasti skladování energie (např. v alkalických bateriích) či biokompatibilních povrchů (např. pro implantovatelné senzory, elektrody apod.). Práce se proto zabývá studiem stability měrné elektrické vodivosti vodivého polymeru polypyrrolu v zásaditém prostředí (vodný roztok NaOH a NH_4OH) a možnostmi jeho revitalizace pomocí anorganických kyselin (vodný roztok HCl a HBr).



Ústav počítačové a řídicí techniky (445)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Iva Nachtigalová, Ph.D.

SPONZOŘI ÚSTAVU POČÍTAČOVÉ A ŘÍDICÍ TECHNIKY



Řízení procesů a zpracování dat

MÍSTO: A335

KOMISE

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

Ing. Hana Soušková, Ph.D.

Ing. Ondřej Ťupa

Ing. Jan Vrba

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Jan Hajíček](#) (B3, Ing. Iva Nachtigalová, Ph.D.)

Automatické vyhodnocování přechodových charakteristik v Excelu

09:15 [Kristýna Žemlová](#) (B2, doc. Ing. Jan Mareš, Ph.D.)

Uživatelské rozhraní pro zpracování signálu Ramanovy optické aktivity

09:30 [Lukáš Mrazík](#) (B3, Ing. Jan Vrba)

Spektrální analýza signálu měření difuze nZVI

09:45 [Jan Vališ](#) (B2, doc. Ing. Jan Mareš, Ph.D.)

Zpracování signálu Ramanovy sondy pro in-vivo diagnostiku karcinomu plic

10:15 [Bc. Kristýna Dánová](#) (M2, prof. Ing. Aleš Procházka, CSc.)

Využití strojového učení při termoobrazové analýze

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

Možnosti programování nové stavebnice MINDSTORMS EV3

10:45 [Bc. Martin Vejvar](#) (M1, Ing. Jan Vrba)

Vývoj laboratorní úlohy regulace laserového zaměření



11:00 [Bc. Jaromír Mašek](#) (M1, doc. Ing. Jan Mareš, Ph.D.)

Nelineární model hydraulické soustavy

11:15 [Bc. Tomáš Rychetský](#) (M2, doc. Ing. Jan Mareš, Ph. D.)

Průmyslové řízení hydrodynamického systému

vyhlášení výsledků

Automatické vyhodnocování přechodových charakteristik v Excelu

Jan Hajíček (B3)

Školitel: Ing. Iva Nachtigalová, Ph.D.

Simulační program *Process Simulation and Control (PSIC)* je doplněk aplikace MS Excel vyvinutý na Ústavu počítačové a řídicí techniky. Tento program slouží jako učební pomůcka při výuce předmětu Laboratoř měřicí a řídicí techniky. Doplněk byl vytvořen, jakožto jednodušší nástroj na modelování, který budou moci ovládat i studenti neznalí složitějších simulačních programů (Matlab, Maple, ...). Cílem tohoto projektu je doplnění stávající verze PSIC o možnost automatického vyhodnocení přechodové charakteristiky a její zobrazení. Součástí také bude vykreslení skoku, na který tato odezva vznikla a zvýraznění důležitých vlastností, jako např. zesílení soustavy, pro snadnější pochopení a analýzu vyučované látky.

Uživatelské rozhraní pro zpracování signálu Ramanovy optické aktivity

Kristýna Žemlová (B2)

Školitel: doc. Ing. Jan Mareš, Ph.D.

Zpracování dat z Ramanova spektrometru probíhá v současné době převážně manuálně, což představuje rizika spojená s reprodukovatelností postupu. Cílem této práce je proto zjednodušení, zefektivnění a automatizace celého procesu vytvořením univerzální aplikace, včetně intuitivního uživatelského rozhraní, která v sobě zahrne maximum kroků zpracování signálu. Momentálně je kladen důraz na samotný pre-processing dat. V budoucnu bude ale aplikace umožňovat i klasifikaci spekter včetně jejich statistického vyhodnocování.

Spektrální analýza signálu měření difuze nZVI

Lukáš Mrazík (B3)

Školitel: Ing. Jan Vrba

K sanaci ložisek šestimocného chromu a chlorovaných uhlovodíků lze využít redukční potenciál koloidního roztoku nanočástic železa (nZVI). Za účelem popisu migrace částic nZVI různým typem půdy bylo vyvinuto prototypové měřicí zařízení detekující jednorozměrný průběh koncentrace nZVI skleněnou kolonou. Senzor detekuje změnu rezonanční frekvence LC obvodu s konstantní kapacitou, do jehož cívky je jako jádro umístěna měřená kolona. Přítomnost nZVI mění permeabilitu jádra, tedy i vlastní indukčnost cívky. Cílem práce je analýza a interpretace naměřených hodnot rezonanční frekvence za účelem získání průběhu koncentrace nZVI s použitím matematického modelu a referenčních měření o známém průběhu koncentrace. Přítomnost šumu v měření vynucuje použití Wienerovy dekonvoluce. Rozdílnost vzorkování referenčního měření odezvy na obdélníkový impuls od ostatních experimentů do modelu zavádí interpolační metody.

Zpracování signálu Ramanovy sondy pro in-vivo diagnostiku karcinomu plic

Jan Vališ (B2)

Školitel: doc. Ing. Jan Mareš, Ph.D.

Pro budoucí využití Ramanovy spektroskopie k *in vivo* diagnostice karcinomu plic v reálném čase je nezbytné zautomatizovat a zrychlit pre-processing a vyhodnocení naměřených spekter. Prvním krokem je eliminace vlivu pozadí překrývajícího sledované signály. Ústavem analytické chemie dosud užívaná semimanuální metodika zpracování spekter v programu Jasco Spectra Manager, je relativně zdlouhavá a neposkytuje reprodukovatelné výsledky, čímž je pro rutinní aplikaci nevyhovující. Z tohoto důvodu byly testovány nové automatizované postupy založené na použití filtračních algoritmů Savitzky-Golay a Finite Impulse Response (FIR). Výsledná navrhovaná metodika využívá Zero-phase FIR filtrace a jejího odečtení od původního spektra. Na základě srovnání navrhované metodiky s používanými a v literatuře popsány postupy lze konstatovat, že s využitím navrhované metodiky v podobě funkce v programovém prostředí MATLAB je možné Ramanova spektra zpracovat systematicky a bez zkreslení. Celý proces včetně vykreslení a uložení zpracovaných dat proběhne do 3 sekund od spuštění funkce, a to zcela reprodukovatelně a s vyložením minimálního úsilí.

Využití strojového učení při termoobrazové analýze

Bc. Kristýna Dánová (M2)

Školitel: prof. Ing. Aleš Procházka, CSc.

Zpracování snímků a videosekvencí pořízených termokamerou má v současné době široké uplatnění v různých inženýrských oblastech, ve stavebnictví i v biomedicině. Práce se zabývá popisem pořizování dat a dále návrhem výpočetního systému pro analýzu časového vývoje rozložení teplot na základě příslušných videosekvencí a na základě rozboru posloupností termosnímků vytvořených s danou periodou vzorkování. Navržený výpočetní algoritmus umožňuje detekci pozic údajů o limitních teplotách v každém termosnímku a rozpoznávání příslušných cifer s využitím metod strojového učení. Pro rozpoznávání těchto údajů je využita dvouvrstvá neuronová síť se sigmoidálními a pravděpodobnostními přenosovými funkcemi. Vstupními údaji jsou přitom odstíny šedi matice obsahující elementy šedi ve výřezech s jednotlivými číslicemi. Dosažená přesnost klasifikace se v dané aplikaci blíží 100% a umožňuje průběžnou detekci teplot na základě odstínů šedi dílčích obrazových elementů.

Možnosti programování nové stavebnice

MINDSTORMS EV3

Bc. Tomáš Matonoha (M2)

Školitel: doc. Ing. Jan Mareš, Ph. D.

Práce se zabývá různými možnostmi programování stavebnice Mindstorms EV3 od společnosti Lego. V rámci práce je tato stavebnice představena včetně programu, který je k této stavebnici dodáván Legem. Dále jsou uvedeny další možné programovací jazyky, ve kterých je možné stavebnici Lego Mindstorms programovat. Mezi tyto programovací jazyky patří Java, C# a Matlab. Cílem práce je tyto různé možnosti programování stavebnice Mindstorms EV3 vyzkoušet a porovnat z hlediska náročnosti na instalaci a dostupnosti. Dále je v rámci práce také praktická ukázka využití programovacího jazyka Java pro naprogramování balancujícího robota.

Vývoj laboratorní úlohy regulace laserového zaměření

Bc. Martin Vejvar (M1)

Školitel: Ing. Jan Vrba

Práce se zabývá vývojem laser zaměřujícího zařízení, určeného k výukovým a laboratorním účelům. Zařízení je schopno programově sledovat pozici řídicího laseru na ploše snímané kamerou a ovládat řízený laser tak, aby co nejpřesněji zaměřil jeho polohu několika vybranými přístupy, zejména pak za využití číslicového PID regulátoru, který lze díky své jednoduchosti stále považovat za nejpoužívanější typ regulace nejen v průmyslu. Správná činnost regulátoru a vliv nastavení jeho parametrů bylo otestováno za pomoci vybraných inženýrských metod (Ziegler-Nichols, Åström-Hägglund, Vyvážené nastavení). Zařízení je dále opatřeno možností manuálního pozicování obou laserů a případným automatizovaným pohybem řídicího laseru po několika zvolených trajektoriích pro umožnění reprodukovatelnosti experimentů. Průběh procesu zaměření a jeho parametry je možno sledovat, ovládat a zaznamenávat pomocí grafického uživatelského rozhraní (GUI) navrženého v prostředí MATLAB.

Nelineární model hydraulické soustavy

Bc. Jaromír Mašek (M1)

Školitel: doc. Ing. Jan Mareš, Ph.D.

Těžiště práce se nachází v oblasti matematického modelování, které je nedílnou součástí inženýrské praxe. Je využíváno zejména při návrhu nejrůznějších zařízení, či procesu a následně při jejich regulaci. Modelovaným objektem je v tomto případě hydraulicko-pneumatická soustava sloužící k didaktickým účelům. Fyzikální identifikace předlohy vede na soustavu nelineárních diferenciálních rovnic. Pro řešení a celkovou realizaci modelu by použit software MATLAB a to zejména prostředí Simulink. Při tvorbě bylo přirozeně přistoupeno k určitému stupni zjednodušení problému, součástí práce je tedy konfrontace modelu s realitou, ze které vycházejí další korekce a přiblížení výsledků modelované předloze.

Průmyslové řízení hydrodynamického systému

Bc. Tomáš Rychetský (M2)

Školitel: doc. Ing. Jan Mareš, Ph. D.

Projekt je zaměřen na průmyslovou regulaci soustavy nádrží. Regulace se provádí pomocí RaspberryPi a desky UniPi. První část je zaměřena na kalibraci vstupů, výstupů a filtraci dat. Obsahem druhé části je identifikace a regulace systému včetně analýzy přechodové charakteristiky. Součástí projektu je také porovnání navržených regulátorů.

DĚKUJEME ZA PODPORU VŠEM NAŠIM SPONZORŮM

ZeNTIVA



ŠKODA



Lonza





<http://fchi.vscht.cz/svk>

PŘÍPRAVA SBORNÍKU

Ing. Jitka Čejková, Ph.D.

Ing. Martin Mastný