



FAKULTA  
CHEMICKO-INŽENÝRSKÁ  
VŠCHT PRAHA

# Studentská Vědecká Konference

21. 11. 2016

# 2016

SBORNÍK ANOTACÍ

DĚKUJEME ZA PODPORU VŠEM NAŠIM SPONZORŮM

**ZENTIVA**  
SPOLEČNOST SKUPINY SANOFI



**ŠKODA**



# Organizační tým

## FAKULTNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Jitka Čejková, Ph.D. (jitka.Cejkova@vscht.cz)

## ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOŘI

- 402 Ústav analytické chemie  
Ing. Martin Člupek, Ph.D. (Martin.Clupek@vscht.cz)
- 403 Ústav fyzikální chemie  
Ing. Ondřej Vopička, Ph.D. (Ondrej.Vopicka@vscht.cz)
- 409 Ústav chemického inženýrství  
Dr. Ing. Pavlína Basařová (Pavlina.Basarova@vscht.cz)
- 444 Ústav fyziky a měřicí techniky  
Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D. (Vladimir.Scholtz@vscht.cz)
- 445 Ústav počítačové a řídicí techniky  
Ing. Iva Nachtigalová, Ph.D. (Iva.Nachtigalova@vscht.cz)
- 837 Katedra ekonomiky a managementu  
Mgr. Ing. Marek Botek, Ph.D. (Marek.Botek@vscht.cz)

## Program jednotlivých sekcí a složení hodnotících komisí

|                                  |    |
|----------------------------------|----|
| Analytická chemie I              | 4  |
| Analytická chemie II             | 5  |
| Fyzikální chemie I               | 6  |
| Fyzikální chemie II              | 7  |
| Chemical Engineering I           | 8  |
| Chemical Engineering II          | 10 |
| Chemické inženýrství I           | 12 |
| Chemické inženýrství II          | 14 |
| Chemické inženýrství III         | 16 |
| Chemické inženýrství IV          | 18 |
| Chemické inženýrství V           | 20 |
| Fyzika a měřicí technika         | 22 |
| Analýza a zpracování dat         | 23 |
| Modelování a řízení              | 24 |
| Podniková ekonomika a management | 25 |

# Analytická chemie I

BUDOVA A, MÍSTNOST A105

## KOMISE

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

Ing. Vadym Prokopec, Ph.D.

Ing. Antonín Kaňa, Ph.D.

Ing. Ladislav Tenkl (Nicolet CZ)

## PROGRAM

- 8:30 [Bc. Judita Arnoštová](#) (M1, doc. Ing. Kamil Záruba, Ph.D.)  
*Studium interakcí konjugátů obsahujících crownetherový kruh s vybranými aminokyselinami v roztoku o konstantní iontové síle*
- 8:45 [Bc. Jana Burianová](#) (M1, prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka)  
*Exploring the polymorphic landscape of Omarigliptin using various analytical techniques*
- 9:00 [Bc. Patrik Fagan](#) (M2, doc. Ing. Vladimír Setnička, Ph.D.)  
*Studium struktury heroinu v roztoku spektroskopickými metodami.*
- 9:15 [Bc. Lucie Grafová](#) (M2, Mgr. Iryna Goncharová, Ph.D.)  
*Studium agregovaných a oxidovaných bílkovin krevního séra: snížení vazebné kapacity následkem interakcí s produkty oxidace lipidů*
- 9:30 **přestávka**
- 9:45 [Bc. Karolína Kučáková](#) (M2, doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.)  
*Studium změny relaxačních časů signálů  $^1\text{H}$  NMR při komplexaci Trögerovy báze s  $\beta$ -cyklodextrinem*
- 10:00 [Bc. Martin Loula](#) (M2, prof. Ing. Oto Mestek, CSc.)  
*Analýza nanočástic metodou ICP-MS*
- 10:15 [Bc. Dita Spálovská](#) (M1, doc. Ing. Vladimír Setnička, Ph.D.)  
*Studium struktury nových syntetických drog v roztoku*

# Analytická chemie II

## BUDOVA, POSLUCHÁRNA A21

### KOMISE

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

Ing. Veronika Škeříková, Ph.D.

Ing. Patrik Kania, Ph.D.

Ing. Jan Neuman, Ph.D. (Optik Instruments)

### PROGRAM

- 8:30 [Bc. Jitka Bartnická](#) (M1, Mgr. Tereza Uhlíková, Ph.D.)  
*Ambroxol versus Ambroxol hydrochlorid*
- 8:45 [Bc. Jana Gallíková](#) (M1, doc. Ing. Kamil Záruba, Ph.D.)  
*Testování křemenných kapilár pokrytých polyanilinem pro elektrochromatografickou separaci profenových kyselin*
- 9:00 [Bc. Veronika Kohutová](#) (M2, prof. RNDr. Štěpán Urban, CSc.)  
*Srovnání citlivosti FID a MS detektorů v plynové chromatografii*
- 9:15 [Bc. Jakub Petřík](#) (M2, doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.)  
*Vývoj HPLC metody pro stanovení degradačních nečistot u léčivé látky*
- 9:30 **přestávka**
- 9:45 [Bc. Veronika Pivoňková](#) (M2, doc. Dr. RNDr. David Sýkora)  
*Vývoj a validace HILIC metody pro stanovení memantinu v tabletách*
- 10:00 [Bc. Jakub Trnka](#) (M2, Mgr. Ondřej Votava, Ph.D.)  
*Vysoce rozlišená overtonová spektroskopie methylaminu*
- 10:15 [Bc. Jana Hercíková](#) (M2, doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.)  
*Charakterizace nových stacionárních fází pro HPLC*

# Fyzikální chemie I

BUDOVA A, ZASEDACÍ MÍSTNOST A402

## KOMISE

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

RNDr. Eva Muchová, Ph.D.

Ing. Jiří Šebek, Ph.D.

## PROGRAM

- 9:00 [Ondrej Dvořák](#) (B3, doc. RNDr. Petr Slaviček, Ph.D.)  
*EUV litografie z pohledu teoretické chemie*
- 9:20 [Bc. Veronika Jurásková](#) (M2, prof. RNDr. Petr Slaviček, Ph.D.)  
*Modelování fotoemisních spekter cytosinu a cytidinu ve vodném roztoku*
- 9:40 [Bc. Markéta Pilneyová](#) (M2, prof. RNDr. Petr Slaviček, Ph.D.)  
*Teoretické studium solvatovaného peroxidu vodíku*
- 10:00 [Jan Poštulka](#) (B2, prof. RNDr. Petr Slaviček, Ph.D.)  
*Radiační chemie halouracilů studovaná metodami ab initio molekulové dynamiky*
- 10:20 [Jaroslav Sita](#) (B3, prof. RNDr. Petr Slaviček, Ph.D.)  
*Necondonovské efekty v absorpčním spektru azobenzenu*
- 10:40 [Bc. Daniela Šmídová](#) (M2, doc. Mgr. Michal Fárník, Ph.D., DSc.)  
*Studium atmosféricky významných klastrů pomocí molekulových paprsků a různých metod hmotnostní spektrometrie*
- 11:00 [Bc. Štěpán Sršeň](#) (M2, prof. RNDr. Petr Slaviček, Ph.D.)  
*Pokročilé simulace spektroskopických a fotodynamických vlastností Criegeeho intermediátů*
- 11:20 [Bc. Jiří Suchan](#) (M1, prof. RNDr. et Bc. Petr Slaviček, Ph.D.)  
*Akcelerovaná dynamika v molekulové spektroskopii*

# Fyzikální chemie II

BUDOVA A, MÍSTNOST A125

## KOMISE

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

Ing. Štěpán Hovorka, Ph.D.

Dr. Ing. Pavel Vrbka

Ing. Martin Růžička (Unipetrol)

## PROGRAM

- 9:00 [Tereza-Markéta Durdáková](#) (B3, Ing. Ondřej Vopička, Ph.D.)  
*Optické měření zbotnění polymerní membrány z PDMS v organických parách a kapalinách*
- 9:20 [Bc. Markéta Havlová](#) (M2, doc. Ing. Vladimír Dohnal, CSc.)  
*Termodynamika systému voda + iontová kapalina 1-butyl-1-methylpyrrolidinium dikyanamid*
- 9:40 [Adam Kovalčík](#) (B3, Ing. Daniel Ondo, Ph.D.)  
*Kalorimetrická studie interakcí sodných solí s termoresponzivním poly-N-isopropylakrylamidem ve vodných roztocích*
- 10:00 [David Palounek](#) (B3, Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.)  
*Studium pigmentů na bázi flavonoidů pomocí SERS spektroskopie*
- 10:20 [Yauheniya Piliptsevich](#) (B3, Ing. Daniel Ondo, Ph.D.)  
*Aplikace titrační kalorimetrie pro stanovení fázového diagramu API + co-former + rozpouštědlo*
- 10:40 [Bc. Radek Točík](#) (M1, prof. Ing. Květoslav Růžička, CSc.)  
*Kalorimetrická studie vybraných chalkogenidů india a gallia*
- 11:00 [Bc. Václav Pokorný](#) (M2, prof. Ing. Květoslav Růžička, CSc.)  
*Experimental and computational study of properties of selected oxygenated compounds*
- 11:20 [Markéta Tomandlová](#) (B3, RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.)  
*Kofein ve vodných roztocích (trochu netradiční termodynamický popis)*

# Chemical Engineering I

BUDOVA B, POSLUCHÁRNA B139

## KOMISE

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

Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D.

Ing. Anna Pittermannová

Ing. Martin Kroupa

Ing. Simon Jantač

Ing. Petr Matuška (MSD IT Global Innovation Center)

Ing. Martin Klejch (Crytur s.r.o.)

## PROGRAM

8:00 **zahájení**

8:15 [Sarah Akhlasová](#) (B3, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

*Personalised medicine dosing via API printing on porous placebo tablets*

8:30 [Mauricio Arrastúa](#) (M2, Ing. František Muzika, Ph.D.)

*Influence of the coupling strength on the chimera states and transitions between its regimes*

8:45 [Andre Haiek](#) (B3, doc. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.)

*Formulation of hydrophobic drugs in the form of nano-suspensions with tunable release kinetics*

9:00 [Bc. Anna Hubatová-Vacková](#) (M1, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

*Surface modification of alginate microparticles prepared by microfluidic technique*

9:15 [Bc. Marek Michalko](#) (M1, doc. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.)

*Control of electrospinning processes using image analysis*

9:30 **přestávka**

10:00 [Bc. Gabriele Pancaldi](#) (M2, doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha)

*Measurements of Power Input and Gas Hold-Up in a Three-Phase system*



- 10:15 [Bc. Jan Šmidrkal](#) (M1, doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha)  
*Effect of aeration and stirring on the 2,3-butanediol production using non-pathogenic bacteria*
- 10:30 [Bc. Otakar Vinklář](#) (M1, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)  
*Study of nanoparticle interaction with plasma proteins*
- 10:45 [Bc. Marie Vyhlídková](#) (M2, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)  
*Development of Lattice Boltzmann model for flow in porous filters*
- 11:00 [Bc. Boleslav Zahradník](#) (M1, doc. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.)  
*Investigation of properties of porous materials created by physical locking*
- 11:30 **přestávka**
- 11:45 **představení sponzorů, vyhlášení výsledků**

# Chemical Engineering II

BUDOVA B, MÍSTNOST B141B

## KOMISE

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

Sandra Kordač Orvalho Ph.D. (ÚCHP AV ČR)

prof. Ing. Igor Schreiber, CSc.

MSc. Edith Mawunya Kutorglo

Ing. Ladislav Konopka

PharmDr. Petr Doležel, PhD. (Zentiva, k.s.)

Ing. Zuzana Kremláčková (JSP s.r.o.)

## PROGRAM

8:00 **zahájení**

8:15 [Martin Balouch](#) (B3, prof. Ing. Štěpánek František, Ph.D.)  
*Preparation of silica nanoparticles encapsulated in liposomes*

8:30 [Luna Azul Cantillo](#) (B3, Ing. Matěj Novák)  
*Analysis and optimization of 3D printed pharmaceutical tablets*

8:45 [Bc. Viktorie Čermochová](#) (M2, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.)  
*Fabrication and Characterization of Magnetic Core-shell Nanofibers*

9:00 [Sara Patricia Ferreira Da Silva](#) (M1, Ing. Jitka Čejková, Ph.D.)  
*Artificial chemotaxis of droplet groups*

9:15 [Bc. Jan Haša](#) (M1, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)  
*Magnetic Multi-Compartment Nano Carriers for Active Release*

9:30 [Bc. Tomáš Kracík](#) (M1, doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha)  
*The experimental study of oscillation dynamics of free vortex surface in the uncovered unbaffled stirred vessel*

9:45 **přestávka**

10:15 [Ing. Anna Krejčí](#) (M2, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)  
*3D tissue model for specific adhesion studies of modified nanoparticles to cancer cells*



- 10:30 [Joana Pereira](#) (M1, Ing. Jan Tomas)  
*Parametric Characterization of Microencapsulation Process*
- 10:45 [Bc. Zuzana Ruberová](#) (M1, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.)  
*Experimental validation of the models to predict the transport of nanoparticles in in vitro cell cultures*
- 11:00 [Bc. Kateřina Soušková](#) (M2, Dr. Ing. Pavlína Basařová)  
*Bubble adhesion onto solid surface during plastics flotation*
- 11:15 [Adam Tywoniak](#) (B3, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)  
*In-situ production of garlic-based antibacterial agents using encapsulated alliinase*
- 11:30 **přestávka**
- 12:00 **představení sponzorů, vyhlášení výsledků**

# Chemické inženýrství I

## BUDOVA B, POSLUCHÁRNA BIII

### KOMISE

doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D. (předseda)

Ing. Jiří Vejražka, Ph.D. (ÚCHP AV ČR)

prof. RNDr. Drahoslava Janovská, CSc.

Ing. Jan Březina

Ing. Denisa Lizoňová

Ing. Juraj Kilián, Ph.D. (Mondi Štětí, a.s.)

Ing. Jiří Maršálek (Membrain, s.r.o.)

Ing. Michaela Vránová (HPST, s.r.o.)

### PROGRAM

8:00 **zahájení**

8:15 [Bc. Mosir Aboeldahab](#) (M1, doc. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.)

*Preparation of drug forms using emulsification*

8:30 [Bc. Jiří Charvát](#) (M1, Ing. Jaromír Pocedič, Ph.D.)

*Influence of membrane properties on vanadium redox flow battery operating parameters*

8:45 [Bc. Lukáš Chroust](#) (M1, Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.)

*Charakterizace iontově-výměnných částic používaných v heterogenních iontově-výměnných membránách*

9:00 [Bc. Wilhelm Feigl](#) (M1, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.)

*Kinetika smáčení porézních vícesložkových materiálů*

9:15 [Bc. Jakub Fiala](#) (M1, Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.)

*Fluidní čipy pro elektrochemickou charakterizaci nanostrukturovaných materiálů*

9:30 [Bc. Radovan Jurašek](#) (M1, Ing. František Muzika, Ph.D.)

*Experimentálne štúdium enzýmového rozkladu peroxidu vodíka v membránovom reaktore*

9:45 **přestávka**



- 10:15 [Kateřina Kholavytská](#) (B3, doc. Dr. Ing. Juraj Kosek)  
*Vliv blokových kopolymerů na morfologii houževnatého polypropylenu.*
- 10:30 [Bc. Vojtěch Klimša](#) (M1, Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.)  
*Vývoj zařízení pro kombinatorickou přípravu polymerních částic*
- 10:45 [Bc. Dominik Kralík](#) (M1, Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.)  
*Iontově-výměnné systémy pro zakoncentrování nabitých molekul a biomolekul*
- 11:00 [Bc. Filip Králík](#) (M1, Ing. Jan Haidl, Ph.D.)  
*Návrh a konstrukce aparatury pro identifikaci azeotropických vícesložkových směsí*
- 11:15 [Bc. Iveta Kršková](#) (M1, doc. Dr. Ing. Juraj Kosek)  
*Modelovanie utvárania morfológie polyuretánových pien*
- 11:30 [Michal Říha](#) (B2, Dr. Ing. Pavlína Basařová)  
*Výpočet zpětné difuze, osmotického toku a transferu vody v solvatačním obalu solí pro iontovýměnné membrány v průběhu eletrodialýzy*
- 11:30 **přestávka**
- 12:15 **představení sponzorů, vyhlášení výsledků**

# Chemické inženýrství II

## BUDOVA B, POSLUCHÁRNA B03

### KOMISE

doc. Dr. Ing. Milan Jahoda (předseda)

Ing. Petr Stanovský, Ph.D. (ÚCHP AV ČR)

Ing. Jonáš Rejl, PhD.

Ing. Alexandr Romanov

Ing. Pavel Ferkl

Ing. Marek Bobák, PhD. (Membrain, s.r.o.)

Ing. Jan Nájemník, CSc. (Synthomer, a.s.)

### PROGRAM

8:00 **zahájení**

8:15 [Bc. Nazerke Kurospayeva](#) (M1, Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.)

*Chování iontově-výměnných membrán v nadlimitní oblasti*

8:30 [Bc. Ondřej Libánský](#) (M1, Ing. Jaromír Pocedič, Ph.D.)

*Studie elektrolytů založených na alkalických hydroxidech pro použití v zinko-vzduchových palivových článcích*

8:45 [Bc. Eliška Lyko Vachková](#) (M1, Ing. František Rejl, Ph.D.)

*Transportní charakteristiky strukturované výplně Mellapak 452Y změřené při destilaci systému cyklohexan/n-heptan v koloně o průměru 300 mm*

9:00 [Bc. Karel Mařík](#) (M1, Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.)

*Separace směsi barviv pomocí gelové elektroforézy na mikrofluidním čipu*

9:15 [Bc. Maria Minichová](#) (M1, doc. Dr. Ing. Juraj Kosek)

*Morphology evolution of microcellular polymeric foams*

9:30 [Bc. Jan Mokry](#) (M1, Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D.)

*Kvantitativní porovnání metod pro stanovení rozložení velikosti nanočástic*

9:45 **přestávka**

- 10:15 [Bc. Jindřich Mrlík](#) (M1, Ing. Petr Mazúr, Ph.D.)  
*Reactions in vanadium redox flow batteries – carbon felt electrodes*
- 10:30 [Bc. Jakub Mužík](#) (M1, Ing. Aleš Zdražil, Ph.D.)  
*In situ amorphization of active pharmaceutical ingredients using microwave irradiation*
- 10:45 [Bc. Martin Pecha](#) (M1, Ing. Petr Mazúr, Ph.D.)  
*Kompozity na bázi uhlík-polymer pro redoxní průtočné baterie*
- 11:00 [Bc. Rudolf Pečinka](#) (M1, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)  
*Dvojité zapálení katalytické oxidace CO na automobilovém katalyzátoru*
- 11:15 [Bc. Vojtěch Šálek](#) (M1, doc. Dr. Ing. Milan Jahoda)  
*Modelování hoření pevných materiálů*
- 11:30 [Bc. Jana Sklenářová](#) (M1, doc. Dr. Ing. Juraj Kosek)  
*Optimization of parameters affecting electrospraying - how to obtain homogeneous layers of nanoparticles?*
- 11:45 **přestávka**
- 12:15 **představení sponzorů, vyhlášení výsledků**

# Chemické inženýrství III

## BUDOVA B, POSLUCHÁRNA B34

### KOMISE

doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha (předseda)

Ing. Vladislav Nevoral, Ph.D.

Ing. Eliška Skořepová, Ph.D.

Ing. Radim Petříček

Ing. Martin Jakubec

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

Ing. Václav Juříček (Chemoprojekt Nitrogen, a.s.)

### PROGRAM

8:00 **zahájení**

8:15 [Bc. Jiří Štěrbá](#) (M1, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)

*Hystereze při zapálení a zhasnutí katalytických reakcí CO, NOx a propenu*

8:30 [Bc. Dominik Švára](#) (M1, Ing. Jitka Čejková, Ph.D.)

*Využití robotického zařízení EvoBot pro experimentální studium kapek*

8:45 [Bc. Danylo Trunov](#) (M1, doc. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.)

*Preparation tunable porous materials by modifying silica aggregation*

9:00 [Bc. Jitka Urbánková](#) (M1, Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D.)

*Mechanismus průchodu lipozomů a látky jimi nesené přes kožní bariéru*

9:15 [Bc. Matej Vrzáček](#) (M1, doc. Dr. Ing. Juraj Kosek)

*Evaluation of parameters involved in contact charging of polyethylene powders: experimental study*

9:30 [Bc. Tereza Čmelíková](#) (M2, doc. Dr. Ing. Milan Jahoda)

*Matematické modelování hasení vodní mlhou*

9:45 **přestávka**

10:15 [Bc. Daniil Denisov](#) (M2, prof. Ing. Igor Schreiber, CSc.)

*Modelování dynamiky enzymového rozkladu peroxidu vodíku v membránovém reaktoru*



- 10:30 [Bc. Tereza Herinková](#) (M2, Ing. Zdeněk Grof, Ph.D.)  
*Matematické modelování rozpouštění farmaceutických tablet*
- 10:45 [Bc. Michal Janda](#) (M2, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)  
*Vliv ceru na funkci trojcestného automobilového katalyzátoru*
- 11:00 [Bc. Petra Janská](#) (M2, Ing. Jitka Čejková, Ph.D.)  
*Studie vlastností slunečních krémů v závislosti na přidaných přírodních brazilských olejích*
- 11:15 [Bc. Martina Ježková](#) (M2, doc. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.)  
*Controlled Assembling of Gold Nanoparticles*
- 11:30 **přestávka**
- 12:00 **představení sponzorů, vyhlášení výsledků**

# Chemické inženýrství IV

## BUDOVA B, POSLUCHÁRNA BS4

### KOMISE

doc. Dr. Ing. Juraj Kosek (předseda)

Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D.

Ing. Martin Isoz

Ing. Tomáš Barczy

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

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

Bc. Kateřina Podroužková a Ing. Martin Šponar (CB&I)

### PROGRAM

8:00 **zahájení**

8:15 [Bc. Jiří Kolář](#) (M2, doc. Dr. Ing. Juraj Kosek)  
*Modelování a analýza struktury anizotropních pěn*

8:30 [Bc. Lenka Krajáková](#) (M2, doc. Dr. Ing. Juraj Kosek)  
*Semikrystalické polymery: Bobtnání a sorpce v kapalných penetrantech a jejich směsích*

8:45 [Bc. Pavel Kupka](#) (M2, doc. Dr. Ing. Juraj Kosek)  
*Studium reologie emulzí pomocí optimalizovaného modelu Disipativní částicové dynamiky*

9:00 [Bc. Patrik Labík](#) (M2, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)  
*Katalyzátor se zeolitickou membránou pro přednostní oxidaci CO v přítomnosti propanu*

9:15 [Bc. Petr Polezhaev](#) (M2, Ing. Jiří Lindner, Ph.D.)  
*Odhad hydrodynamických parametrů segmentovaného toku pomocí impedanční spektroskopie*

9:30 [Bc. Ksenia Ponomareva](#) (M2, Ing. Lenka Schreiberová, CSc.)  
*Křivka zapálení a zhášení biochemické reakce v enzymovém palivovém článku*

9:45 **přestávka**



- 10:15 [Bc. Patrik Schneider](#) (M2, doc. Dr. Ing. Juraj Kosek)  
*Low-field NMR for analysing polymer phases and dynamic sorption processes*
- 10:30 [Bc. Matěj Slavíček](#) (M2, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)  
*Příprava katalyzátoru Ni/NiO/SiO<sub>2</sub> pro parní reforming*
- 10:45 [Bc. Lucie Štiková](#) (M2, Dr. Ing. Pavlína Basařová)  
*The influence of surfactants on bubble coalescence*
- 11:00 [Bc. Ekaterina Volova](#) (M2, doc. RNDr. Tomáš Vaněk, CSc.)  
*Dynamická simulace C3/C4 splitteru*
- 11:15 [Bc. Anna Zítková](#) (M2, doc. Dr. Ing. Juraj Kosek)  
*Elektrosprejování nanočástic: model depozice a vybíjení vrstev*
- 11:30 **přestávka**
- 12:00 **představení sponzorů, vyhlášení výsledků**

# Chemické inženýrství V

## BUDOVA B, POSLUCHÁRNA BS9

### KOMISE

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

Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.

Ing. Jaroslav Tihon (ÚCHP AV ČR)

Ing. Jiří Vrána

Ing. Jakub Dvořák

Ing. Jan Hronza, Ph.D. (Ricardo Praha, s.r.o.)

Ing. Jiří Zagora, Ph.D. (Lonza Biotec, s.r.o.)

### PROGRAM

8:00 **zahájení**

8:15 [Jakub Klimošek](#) (B2, doc. Dr. Ing. Juraj Kosek)  
*Studium difuze v polyolefinech metodou "pressure-decay"*

8:30 [Jakub Smutek](#) (B2, Ing. Martin Isoz)  
*Vliv diskretizace konvekčních členů VoF-Navier-Stokesových rovnic při simulaci kapilaritou řízených dějů*

8:45 [Martin Šourek](#) (B2, Ing. Martin Isoz)  
*CFD simulace vícefázového proudění na nakloněné desce: porovnání smáčivosti různých kapalin*

9:00 [Lukáš Bláha](#) (B3, doc. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.)  
*Preparation of polymeric nano- and micro-fiber suspensions*

9:15 [Miroslav Blažek](#) (B3, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)  
*Nanášení katalytické vrstvy do kanálku monolitického reaktoru*

9:30 [Štěpán Halada](#) (B3, Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.)  
*Litografie a pokovování pro výrobu mikrofluidních systémů.*

9:45 **přestávka**



- 10:15 [Jakub Kovačovič](#) (B3, doc. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.)  
*Synthesis of conductive porous materials based on polyaniline by controlled assembly of nanoparticles*
- 10:30 [Jarmila Kučerová](#) (B3, doc. Dr. Ing. Juraj Kosek)  
*Study of Collision Behaviour of Polyethylene Particles: Experimental and Modeling Study*
- 10:45 [Jan Němec](#) (B3, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)  
*Tlakové ztráty v katalytických filtrech pevných částic*
- 11:00 [Adam Sklenář](#) (B3, doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.)  
*Vliv podmínek sušení na velikost nanočástic niklu při přípravě katalyzátoru*
- 11:15 [Erik Sonntag](#) (B3, Mgr. Róbert Lehocký)  
*Vývoj disoluční metody pro depotní suspenze*
- 11:30 **přestávka**
- 12:00 **představení sponzorů, vyhlášení výsledků**

# Fyzika a měřicí technika

## BUDOVA B, B220 (ZASEDACÍ MÍSTNOST ÚFMT)

### KOMISE

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

Ing. Ondřej Ekrt, Ph.D.

Mgr. Tomáš Kotrba

Ing. Martin Straka, Ph.D. (ÚJV Řež)

### PROGRAM

- 8:30 [Aleksandra Atanasova](#) (B2, Ing. Hana Soušková, Ph. D.)  
*Test aparatury generující nízkoteplotní plazma pro veterinární účely*
- 8:45 [Bc. Lucie Kujalová](#) (M1, doc. Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.)  
*Porovnání mikrobicidního působení dostupných zdrojů nízkoteplotního plazmatu referenční metodou*
- 9:00 [Matej Černý](#) (B3, RNDr. Galář Pavel, Ph.D.)  
*Separace zlatých a křemíkových nanočástic dle velikosti a náboje*
- 9:15 [Bc. Jan Herbst](#) (M2, Ing. Ladislav Fišer, Ph.D.)  
*Studium vlastností senzorové platformy KBI2*
- 9:30 [Petr Holánek](#) (B3, Dr. Mgr. Jana Jirešová)  
*Příprava samoorganizovaných vrstev ITO pro chemické senzory*
- 9:45 [Bc. Dominika Mertová](#) (M2, doc. Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.)  
*Analytické metody pro analýzu mrtvé vody*
- 10:00 [Anna Petrová](#) (B3, Ing. Dušan Kopecký, Ph.D.)  
*Elektronová mikroanalýza kosterních pozůstatků*
- 10:15 [Stanislav Valtera](#) (B3, Ing. Kopecká Jitka, Ph.D.)  
*Příprava a charakterizace 3D struktur polypyrrolu*
- 10:30 [Lenka Voltrová](#) (B3, Ing. Dušan Kopecký, Ph.D.)  
*Analýza prvkového složení temperových barev pomocí energiově disperzní spektrometrie*
- 10:45 [Bc. Lenka Wiesnerová](#) (M2, doc. Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.)  
*Impedanční spektroskopie medů*

# Analýza a zpracování dat

BUDOVA A, POSLUCHÁRNA A335

## KOMISE

Ing. Hana Soušková, Ph.D. (předseda)

Ing. Jana Finkeová, CSc.

Ing. Martin Schätz

Ing. Ondřej Ťupa

## PROGRAM

- 9:00 [Bc. Klára Zuntová](#) (M1, prof. Ing. Aleš Procházka, CSc.)  
*Využití metod Matching Pursuit a Singular Spectrum Analysis pro zpracování spánkových dat*
- 9:20 [Bc. Kristýna Dánová](#) (M1, prof. Ing. Aleš Procházka, CSc.)  
*Klasifikační a vizualizační metody pro detekci spánkových stádií*
- 9:40 [Bc. Vojtěch Sedlák](#) (M2, prof. Ing. Aleš Procházka, CSc.)  
*Vyhodnocování obličejové symetrie pomocí MS Kinect*
- 10:00 [Bc. Jakub Jůzl](#) (M1, Ing. Iva Nachtigalová, Ph.D.)  
*Webová aplikace monitorující změny obsahu webových stránek*
- 10:40 [Bc. Tomáš Matonoha](#) (M2, RNDr. Pavel Cejnar)  
*Multiplatformní testování výkonnosti hardware implementované v jazyku Java*
- 11:00 [Bc. Jakub Kubík](#) (M2, RNDr. Pavel Cejnar)  
*Návrh a implementace aplikací v jazyku C# za použití moderních vývojových prostředků a programovacích technik*

# Modelování a řízení

## BUDOVA A, MÍSTNOST A40

### KOMISE

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

Ing. Pavel Hrnčířík, Ph.D.

Ing. Jan Vrba

Ing. Jan Crha

### PROGRAM

- 9:00 [Martin Vejvar](#) (B3, Ing. Jan Mareš, Ph.D.)  
*Vývoj laboratorní úlohy regulace laserového zaměření*
- 9:20 [Bc. Marek Šíman](#) (M2, Ing. Jan Mareš, Ph.D.)  
*Regulace hydraulické soustavy*
- 9:40 [Bc. Michal Šíma](#) (M2, Ing. Jan Mareš, Ph.D.)  
*Vývoj prototypu automatického bodotávku*
- 10:00 [Bc. Tomáš Rychetský](#) (M1, Ing. Jan Mareš, Ph.D.)  
*Průmyslová regulace systému modelu nádrže*
- 10:40 [Bc. Denisa Pauerová](#) (M2, Ing. Jan Mareš, Ph.D.)  
*Řízení modelu chemického reaktoru*
- 11:00 [Bc. Ema Hrbková](#) (M2, Ing. Jan Mareš, Ph.D.)  
*Vývoj klasifikátoru vybraných spektrálních dat*

# Podniková ekonomika a management

## BUDOVA C, MÍSTNOST C11

### KOMISE

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

Ing. Jiří Klečka, Ph.D.

Ing. Olga Kutnohorská, Ph.D.

### PROGRAM

8:30 **zahájení**

8:40 [Bc. Anna Menčíková](#) (M2, Ing. Jakub Dyntar, Ph.D.)  
*Lokalizace skladových prostor společnosti VERKON s.r.o.*

9:00 [Bc. Hana Vacková](#) (M2, prof. Ing. Dušan Baran, Ph.D.)  
*Analýza zpoždování dodávek přírodního kaučuku pro firmu Mitas a.s.*

9:20 [Bc. Filip Šimáček](#) (M2, doc. Ing. Jan Rančák, CSc.)  
*Strategické řízení podniku*

9:40 [Bc. Jaroslav Novotný](#) (M2, prof. Ing. Dušan Baran, Ph.D.)  
*Zvýšení efektivity gumárenské technologie*

10:00 [Bc. Eliška Gálová](#) (M2, Ing. Dana Strachotová, Ph.D.)  
*Zakladatelský projekt*

10:20 **přestávka**

10:30 [Bc. Jana Golianová](#) (M1, Mgr. Ing. Marek Botek, Ph.D.)  
*Využitie Kirkpatrickovho modelu pre hodnotenie efektivity vysokoškolského vzdelávania*

10:50 [Bc. Ivan Getta](#) (M2, Ing. Dana Strachotová, Ph.D.)  
*Optimalizace zkušebny, expedice a příjmu v nkt cables s.r.o.*

11:10 [Bc. Viera Kováčová](#) (M2, Ing. Ivan Souček, Ph.D.)  
*Aplikace metod Business a Competitive Intelligence ke sledování konkurence a hledání nových obchodních vazeb*

11:40 **vyhlášení výsledků**

## Anotace soutěžních prací

rozděleny podle ústavů a řazeny abecedně podle jména autora

|                                                  |     |
|--------------------------------------------------|-----|
| <a href="#">Analytická chemie I, II</a>          | 27  |
| <a href="#">Fyzikální chemie I, II</a>           | 42  |
| <a href="#">Chemical Engineering I, II</a>       | 59  |
| <a href="#">Chemické inženýrství I-V</a>         | 81  |
| <a href="#">Fyzika a měřicí technika</a>         | 139 |
| <a href="#">Počítačová a řídicí technika</a>     | 150 |
| <a href="#">Podniková ekonomika a management</a> | 163 |

SPONZOŘI ÚSTAVU ANALYTICKÉ CHEMIE



## Studium interakcí konjugátů obsahujících crownetherový kruh s vybranými aminokyselinami v roztoku o konstantní iontové síle

Bc. Judita Arnoštová (M1)

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

Byly studovány interakce konjugátu methiniové soli s crownetherem (TBMS-521) s vybranými aminokyselinami L-lysinem, Z-D-Lysinem-OH, Leucinem, Z-D,L-Leucinem a D,L-Tryptofanem v roztoku o konstantní iontové síle, v prostředí fosfátového pufru ( $\text{pH} = 7,25 \pm 0,02$ ). Ve VIS oblasti absorbují pouze TBMS a aminokyseliny nikoli, průběh experimentů (UV/VIS titrací) byl tedy sledován a posuzován dle změn absorbančních maxim TBMS.

## Ambroxol versus Ambroxol hydrochlorid

Bc. Jitka Bartnická (M1)

školitel: Mgr. Tereza Uhlíková, Ph.D.

Tato práce je zaměřena na strukturní rozdíly Ambroxolu a jeho soli Ambroxol hydrochloridu na základě jejich teoretických výpočtů a následně získaných spekter v rozmezí 0-4000  $\text{cm}^{-1}$ . Ambroxol hydrochlorid je účinnou léčivou látkou v mnoha léčivých přípravcích pro léčbu kašle nebo bronchiálního onemocnění. Pro simulaci spekter je využita DFT metoda s funkcíonálem B3LYP a bází 6-311++g v rámci programového balíku Gaussian09. Z optimalizované geometrie a analytických druhých derivací jsou vypočtené spektroskopické konstanty sloužící k vytvoření vibračně rotačního spektra. Výpočet je proveden v plynné i kondenzované fázi. V této studii jsou provedeny první kroky k prozkoumání celkové struktury studované molekuly. Z teoretického hlediska výpočet jedné neinteragující molekuly Ambroxolu a jeho soli. Z experimentálního hlediska jsou naměřena spektra pevné látky Ambroxol hydrochloridu a jeho roztoku v terahertzové oblasti přístrojem TPS Flextra 4000. Vypočtená geometrie molekuly i spektra Ambroxolu a jeho soli jsou první svého druhu a nebyla doposud v literatuře publikována.

## Exploring the polymorphic landscape of Omarigliptin using various analytical techniques

Bc. Jana Burianová (M1)

školitel: prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka

Omarigliptin exists in anhydrous forms I, II, III and IV. The aim of the study was to explore the relationships of these individual crystal modifications, using various analytical techniques. Process-induced transformations occur very frequently in pharmaceutical development and the crucial knowledge is represented by the stability boundaries of every considered form. FT-Raman spectroscopy, one of the most common techniques utilized for polymorphic studies, was used to analyse the obtained samples; all acquired spectra were compared with the reference spectra of pure individual forms. Both hot-stage optical microscopy and hot-stage Raman spectroscopy, supplemented by DSC cycles, were applied to observe the melting range and polymorphic transformations during the heating ramp. Further research, including slurry experiments, was performed to investigate the relative stability in suspension, depending on the solvent properties. According to our results, form I and II are related enantiotropically, whereas form I and III monotropically, based on the Burger Ramberger's thermodynamic rules.

## Studium struktury heroinu v roztoku spektroskopickými metodami.

Bc. Patrik Fagan (M2)

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

Zneužívání drog je v dnešním světě značným problémem, který má často fatální důsledky. Jednou z tvrdých drog, které jsou v České republice často zneužívány, je heroin. Čistota zadržených vzorků se podle statistik z roku 2013 pohybuje nejčastěji v rozmezí 13–23 %. Znalost struktury a chování této molekuly v roztoku, nejlépe za podmínek blízkých *in vivo*, je klíčová z hlediska detailního pochopení jeho účinku a metabolismu v organismu. Jelikož heroin patří mezi opticky aktivní látky, lze pro jeho detailní strukturní analýzu využít chiroptických metod. V této práci bylo využito vibračního (VCD) a elektronového cirkulárního dichroismu (ECD). Tyto metody byly doplněny o konvenční infračervenou (IR) spektroskopii. Experimentální výsledky byly interpretovány na základě kvantově chemických simulací se zahrnutím vlivu rozpouštědla, pomocí nichž byly nalezeny 3 stabilní konformery. Na základě Maxwellova-Boltzmannova rozdělení bylo jejich rovnovážné zastoupení 77, 22 a 1 %. Pro jednotlivé konformery byla simulována příslušná spektra, která byla následně porovnána s experimentem. Na základě velmi dobré shody simulací s experimentem byla detailně, na úrovni atomárního rozlišení, popsána struktura molekuly heroinu v roztoku.

## Testování křemenných kapilár pokrytých polyanilinem pro elektrochromatografickou separaci profenových kyselin

Bc. Jana Galliková (M1)

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

Výzkum se zabývá testováním křemenných kapilár a jejich vnitřních modifikací pomocí kapilární elektrochromatografie. Experimenty byly prováděny při různých pH v prostředí fosfátového pufru, s vnitřními modifikací polyanilinu a pro porovnání i na kapiláře nemodifikované. Polyanilinem modifikovaná kapilára i kapilára nemodifikovaná byla testována při pH 2-8 a byla především zjišťována rychlost elektroosmotického toku. Výsledky byly porovnány a došlo se k závěru, že polyanilinová modifikace má zřetelně lepší vlastnosti, než kapilára nemodifikovaná. V dalších experimentech byla testována separace profenových kyselin ibuprofenu, ketoprofenu a indoprofenu na polyanilinem modifikované kapiláře i na kapiláře nemodifikované při pH 6, 7 a 8. Bylo zjištěno, že modifikovaná kapilára separuje profenové kyseliny výrazně lépe, než kapilára nemodifikovaná. Polyanilinem modifikovaná kapilára bude otestována při kyselém pH v následujících týdnech.

## Studium agregovaných a oxidovaných bílkovin krevního séra: snížení vazebné kapacity následkem interakcí s produkty oxidace lipidů

Bc. Lucie Grafová (M2)

školitel: Mgr. Iryna Goncharová, Ph.D.

Bílkoviny krevního séra plní v organismu důležité funkce - hlavně antioxidační a transportní. V důsledku oxidačních reakcí v organismu dochází ke změnám ve struktuře těchto bílkovin a velmi často také k jejich agregaci. Oxidační změny jsou často spojovány s propuknutím vážných onemocnění – například Alzheimerovy choroby či diabetes. Díky moderním analytickým metodám jsme schopni pozměněnou strukturu a omezené transportní funkce bílkovin detekovat (jako změny vazebných konstant pro různé ligandy). V budoucnu tak můžeme získat spolehlivý nástroj pro určení míry modifikovaných bílkovin v organismu a diagnostikovat případné onemocnění ještě v raném stádiu, kdy je léčba zpravidla snazší. V představené práci byly monitorovány změny struktury a funkce hovězího a lidského albuminu, hlavní složky krevního séra, v přítomnosti malondialdehydu (MDA), hlavního produktu oxidace lipidů. Pro studium strukturních změn bylo využito metod elektronového cirkulárního dichroismu (ECD) a fluorescenční spektroskopie. Transportní funkce byla sledována změnou intenzity spektrální odezvy komplexu albumin - ligand, kde ligandem jsou dříve prostudovaná léčiva, která se vážají na určité místo v molekule albuminu.

## Charakterizace nových stacionárních fází pro HPLC

Bc. Jana Herciková (M2)

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

Tato práce je věnována přípravě a charakterizaci stacionárních fází na bázi silných katexů, které mají využití v chirálních separacích metodou HPLC. Na připravených stacionárních fázích je možné separovat jednotlivé enantiomery chirálních analytů, především z řad polárních aminů. První z charakterizovaných stacionárních fází je již známá experimentální stacionární fáze na bázi substituovaného naftalenu. Druhou stacionární fází je analogicky substituovaný naftalen v jiných polohách. Tento rozdíl by měl vést k lepší separaci díky menšímu sterickému efektu. Srovnání těchto stacionárních fází proběhlo při 20 °C na základě měření ve třech různých mobilních fázích (acetonitril:methanol v poměrech 9:1, 1:1 a čistý methanol) vždy s přidavkem kyseliny mravenčí a diethylaminu. Analyzována byla léčiva a drogy ze skupiny katecholaminů.

## Srovnání citlivosti FID a MS detektorů v plynové chromatografii

Bc. Veronika Kohutová (M2)

školitel: prof. RNDr. Štěpán Urban, CSc.

Cílem této práce je porovnání rozsahu a citlivosti dvou detektorů používaných v plynové chromatografii. Jedná se o plamenově ionizační detektor (FID) a hmotnostní detektor (MS). Oba detektory jsou používány k detekci látek obsažených v lidském pachu po jejich rozdělení metodou plynové chromatografie. Přesto, že je pach velmi složitá směs organických látek, podařilo se charakterizovat a identifikovat řadu látek, které jsou pro pach typické. Jedná se zejména o látky lipofilního charakteru, které jsou málo těkavé a málo rozpustné ve vodě. V rámci této práce byla vytvořena modelová směs látek vyskytujících se v lidském pachu. Součástí této směsi jsou aldehydy, ketony, n-alkany, mastné kyseliny a jejich estery. Z modelové směsi byla vytvořena řada kalibračních roztoků, které byly dávkovány do plynového chromatografu. Na základě experimentálně získaných hodnot ploch píků byly zjištěny lineární rozsahy jednotlivých detektorů, jejich meze stanovitelnosti a meze detekce. Přes obecná tvrzení, že hmotnostní detektor vykazuje vyšší citlivost a plamenově ionizační detektor má lepší dynamický rozsah, je zřejmé, že každá molekula vykazuje při použití jednotlivých detektorů odlišné chování.

## Studium změny relaxačních časů signálů $^1\text{H}$ NMR při komplexaci Trögerovy báze s $\beta$ -cyklodextrinem

Bc. Karolína Kučáková (M2)

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

Molekulární komplexy vznikají interakcí molekul, přičemž v místech interakce dochází ke změně chemického okolí těchto atomů. Jednou z nejlepších analytických metod pro studium struktury molekulárních komplexů organických látek je NMR spektroskopie, kde změna chemického okolí jader ovlivňuje všechny jejich NMR charakteristiky. Nejčastěji jsou studovány změny chemických posunů, které jsou snadno měřitelné a přímo odráží změny v okolí jader atomů molekul. Chemické okolí ovlivňuje také relaxační děje, jejichž charakteristikou jsou zejména relaxační časy  $T_1$  a  $T_2$ . Relaxační časy charakterizují rychlost návratu jaderných spinů do rovnováhy po jejich excitaci radiofrekvenčním pulsem. Experimenty poskytující hodnoty relaxačních časů jsou časově náročné, a to i přes vysokou citlivost a automatizaci měření soudobých NMR spektroskopů. Tato práce se zabývá studiem relaxačních časů  $\beta$ -cyklodextrinu a jeho komplexu s Trögerovou bází. Cílem bylo získat charakteristiky jejich komplexu a vypracování postupu měření a zpracování spekter pomocí současných počítačových programů.

## Analýza nanočástic metodou ICP-MS

Bc. Martin Loula (M2)

školitel: prof. Ing. Oto Mestek, CSc.

S rozvojem využití nanočástic v mnoha oblastech průmyslu i každodenního života je spojena potřeba stanovení a charakterizace nanočástic v nejrůznějších typech vzorků. Nadějnou metodou pro tento úkol je metoda analýzy jednotlivých částic pomocí ICP-MS (single particle ICP-MS). Tato metoda dokáže charakterizovat nanočástice z hlediska jejich složení, velikosti i distribuce velikostí a zároveň dokáže stanovit číselnou koncentraci nanočástic ve vzorku. Předmětem této práce je optimalizace parametrů vnášecího systému hmotnostního spektrometru vzhledem k maximální transportní účinnosti a intenzitě signálu nanočástic, dvou veličin, jejichž znalost a vysoká hodnota jsou pro úspěšné analýzy reálných vzorků obsahujících nanočástice nezbytné. Studovány jsou rovněž další faktory, které transportní účinnost a intenzitu signálu nanočástic ovlivňují. V průběhu měření bylo pozorováno nežádoucí rozpouštění nanočástic, další část práce se proto zabývá stabilitou stříbrných nanočástic v různých médiích.

## Vývoj HPLC metody pro stanovení degradačních nečistot u léčivé látky

Bc. Jakub Petřík (M2)

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

Tato práce se zabývá vývojem metody pro stanovení degradačních a procesních nečistot u léčiva sofosbuvir pomocí vysokoúčinné kapalinové chromatografie. Byla vyvinuta a optimalizována základní metoda, která je vhodná k separaci a stanovení všech sledovaných nečistot a tato metoda bude následně dále optimalizována s využitím „Design of experiments“. V rámci vývoje metody se podařilo úspěšně stanovit koncentraci zásobního roztoku nečistoty označené jako Des-Phenyl (hydrolytický produkt vzniklý odštěpením fenolu z molekuly sofosbuviru), která nebyla známa, a stanovit odezvové faktory všech sledovaných nečistot.

## Vývoj a validace HILIC metody pro stanovení memantinu v tabletách

Bc. Veronika Pivoňková (M2)

školitel: doc. Dr. RNDr. David Sýkora

Ke stanovení memantinu v lékových formách byla vyvinuta řada nejrůznějších metod pro separační techniky jako je HPLC nebo GC a byly publikovány i některé spektrofotometrické metody. Nevýhodou dostupných metod je hlavně časová náročnost předkolonové derivatizace memantinu, která může být navíc potenciálním zdrojem různorodých chyb a z hlediska spektrofotometrického stanovení může představovat problém nízká selektivita metod. Postkolonová derivatizace spojená obecně s předchozí separací polárních aminů pomocí hydrofilní interakční chromatografie se jeví jako vhodná alternativa k předkolonové derivatizaci a následné separaci na reverzní fázi. Žádná metoda HILIC pro separaci memantinu doposud nebyla popsána. Vyvinutá metoda s aplikací hydrofilní interakční chromatografie a fluorescenční detekce, se vyhýbá časově náročné předkolonové derivatizaci a umožňuje rychlou přípravu vzorku. Metoda byla validována z hlediska linearit, přesnosti, preciznosti a selektivity podle ICH směrnic a byla rovněž úspěšně použita při analýze komerčně dostupných tablet.

## Studium struktury nových syntetických drog v roztoku

Bc. Dita Spálovská (M1)

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

Nové psychoaktivní látky (NPS) jsou stále větším celosvětovým problémem. Výrobci drog se snaží obejít zákon tím, že chemicky modifikují již zakázanou látku a vzniklý derivát pak nepodléhá některým legislativním omezením, přestože má podobné účinky jako látka výchozí. Tímto způsobem vznikají desítky nových syntetických drog ročně. Z tohoto důvodu je třeba zabavené látky neustále analyzovat a taktéž detailně studovat jejich vlastnosti. Cílem této práce bylo studium struktury šesti různých NPS v roztoku pomocí infračervené spektroskopie v kombinaci s kvantově chemickými simulacemi. Nejprve byly nalezeny stabilní konformery jednotlivých látek, následovala reoptimalizace geometrií pomocí Hartreeho-Fockovy a poté DFT metody s použitím vhodných bází, přičemž byl zahrnut i vliv rozpouštědla (voda). Cílem bylo také pro jednotlivé konformery dle Maxwellova-Boltzmannova rozdělení odhadnout jejich relativní zastoupení a popsat molekulární strukturu na úrovni atomárního rozlišení, což může do budoucna umožnit detailní studium vazebných vlastností, možnosti metabolismu, transportu či distribuce v organismu. Poté proběhlo porovnání experimentálních spekter standardů látek ve vodném roztoku se spektry simulovanými, přičemž shoda byla velmi dobrá.

## Vysoce rozlišená overtonová spektroskopie methyaminu

Bc. Jakub Trnka (M2)

školitel: Mgr. Ondřej Votava, Ph.D.

Tato práce pojednává o overtonové spektroskopii amoniaku a methyaminu. V klasické infračervené spektroskopii analyzujeme vibrační stavy molekul v rámci ideálního harmonického přiblížení. V tomto modelu jsou povoleny pouze přechody, kde se vibrační kvantové číslo mění o 1. My však půjdeme za rámec této aproximace a budou zkoumány overtonové přechody, kde změna vibračního kvantového čísla je větší než 1. Měření těchto přechodů je však obtížné, protože reálné molekuly mají velmi nízké absorpce a vibrační pásy se skládají z velkého množství rotačně-vibračních přechodů, jejichž absorpční linie se mnohdy překrývají a činí výsledná spektra značně komplikovaná. Z těchto důvodů je výhodné provádět měření za nízkých teplot, aby bylo obsazeno co nejméně rotačních hladin a linie byly dostatečně úzké. Požadovaného ochlazení plynného vzorku realizujeme expanzí plynné směsi supersonickou tryskou do vakua. Dosaženou teplotu je možné měnit variací poměru nosného plynu a vzorku a lze ji určit na základě šířky absorpčních čar. Integrované intenzity čar při různých teplotách lze použít pro klasifikaci daného přechodu.

SPONZOŘI ÚSTAVU FYZIKÁLNÍ CHEMIE



Authorized Distributor



## Optické měření zbotnění polymerní membrány z PDMS v organických parách a kapalinách

Tereza-Markéta Durdáková (B3)

školitel: Ing. Ondřej Vopička, Ph.D.

Polymery jsou charakteristické tím, že sorbují nízkomolekulární látky, se kterými jsou v kontaktu. Důsledkem je zvětšení jejich objemu, které bývá označováno jako botnění. Proto i polymerní membrány, hojně používané při separačních procesech, typicky botnají. Cílem práce je kvantifikace zbotnění polymerní membrány z polydimethyl-siloxanu (PDMS) v závislosti na aktivitě nízkomolekulární organické látky v parní fázi a zbotnění v čisté kapalině, tedy v celém koncentračním intervalu. Studovanými organickými látkami byly dimethylkarbonát (DMC) a methanol (MeOH). Optickým měřením pomocí dvou nezávislých mikroskopů byly pozorovány změny v tloušťce a ve dvou navzájem kolmých rozměrech v ploše vzorku membrány. Jejich srovnáním byla zkoumána izotropie botnění polymeru. Ze závislosti objemové změny na koncentraci organické látky v polymeru je v práci posouzena idealita chování směsi ve smyslu Amagatova zákona.

## EUV litografie z pohledu teoretické chemie

Ondrej Dvořák (B3)

školitel: doc. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.

V této práci studuji metodami kvantové chemie potenciálně vhodný materiál pro EUV litografii. Litografie v extrémní ultrafialové oblasti spektra (EUV) je technologie, která umožňuje vytvářet nanostruktury o rozlišení až 10 nm. Využívá k tomu tzv. fotorezisty, tj. materiály citlivé na EUV záření. Tyto jsou látky schopné měnit po ozáření svou rozpustnost v určitém rozpouštědle. V současnosti jsou pro EUV litografii hledány nové materiály, které by vedly k minimalizaci struktur (např. integrovaných obvodů) na rozlišení až 5 nm. Jako slibné se ukazují struktury organicky vázaného cínu ve formě „tin-oxo cages“ (Sn-O klecí), jež se experimentálně ukázaly jako vhodné EUV fotorezisty. Tato práce se zabývá teoretickým studiem modelového systému trimethyltin hydroxidu ( $\text{Sn}(\text{CH}_3)_3\text{OH}$ ). Pomocí kvantově chemických výpočtů jsem simuloval děje nastávající po vyražení jednoho či dvou valenčních elektronů. Výpočty jsou zaměřeny na popis energetiky disociace vazeb Sn-O a Sn-C v základním stavu i v excitovaných stavech obou ionů. Právě rozpad těchto vazeb by mohl vysvětlit změny rozpustnosti Sn-O klecí. Dále jsem provedl dynamické simulace těchto systémů metodou neadiabatické molekulové dynamiky. Výsledky simulací naznačují, že by ionizace trimethyltin hydroxidu mohla vést k jeho rozpadu.

## Termodynamika systému voda + iontová kapalina 1-butyl-1-methylpyrrolidinium dikyanamid

Bc. Markéta Havlová (M2)

školitel: doc. Ing. Vladimír Dohnal, CSc.

Tato práce se zabývá studiem termodynamického chování vodných roztoků iontové kapaliny [BMPYR][DCA] (1-butyl-1-methylpyrrolidinium dikyanamid). Byla provedena systematická měření aktivity vody metodou chlazeného zrcátka, směšovací entalpie izotermní směšovací kalorimetrií a hustoty vibrační densimetrií, a to buď v celém rozsahu složení, nebo speciálně v oblasti vysokého zředění iontové kapaliny ( $x_w \rightarrow 0,995$ ), při několika teplotách od 288,15 K do 318,15 K. Získané informace o neideálním chování systému (aktivitní koeficient vody  $\gamma_w$ , dodatečná entalpie  $H^E$ , dodatečný objem  $V^E$ ) byly porovnány s dalšími relevantními daty z literatury naměřenými jinými metodami. Pro posouzení termodynamické konsistence s kalorimetrickými měřeními, byla data  $\gamma_w(x_w, T)$  vyhlazena ve dvou krocích: nejprve teplotní závislosti pro každou izopletu a následně pak koncentrační závislosti pro každou izotermu. Data  $\gamma_w(x_w, T)$  a  $H^E(x_w, T)$ , naměřená v této práci a vybraná z literatury, byla dále simultánně korelována rozšířeným NRTL modelem, který poskytl kompaktní a adekvátní popis celé energetiky systému. Složitá závislost  $V^E(x_w, T)$  byla úspěšně korelována Padé aproximantem s parametry lineárně závislými na teplotě. Termodynamické chování systému je krátce diskutováno z pohledu molekulárních interakcí a struktury.

## Modelování fotoemisních spekter cytosinu a cytidinu ve vodném roztoku

Bc. Veronika Jurásková (M2)

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

Ve své práci jsem se zaměřila na modelování fotoemisních spekter cytosinu a cytidinu ve vodném roztoku. Tato spektra poskytují důležité informace o elektronové struktuře látek, fotoelektronová spektroskopie v kapalně fázi se však začala rozvíjet až v nedávné době společně s vývojem metody kapalných mikrotrysek. Pro správnou interpretaci nově naměřených spekter je tak nezbytné využít teoretických výpočtů. Fotoemisní spektra cytosinu a cytidinu jsem modelovala s pomocí molekulově dynamických simulací. Mým cílem bylo vyvinout nový simulační protokol vhodný pro studium fotoionizace. Oba systémy jsem simulovala ve velkém vodném klastru čítajícím 500 molekul vody. Kromě jednoduchých klasických simulací jsem uvažovala i náročnější simulace zahrnující kvantové efekty. Pro modelování rozpouštědla jsem použila implicitní i explicitní popis solvatace a také jejich kombinaci v podobě *cluster-continuum* modelu. Důraz jsem kladla zejména na určení vertikální ionizační energie a reorganizační energie. Tyto veličiny nejsou důležité pouze pro popis fotoemisního spektra, poskytují také informace umožňující studium přenosu náboje prostřednictvím Marcusovy teorie. Přenos náboje u cytosinu a cytidinu je pak významný zejména ve spojitosti s oxidativním poškozením nukleových kyselin.

# Kalorimetrická studie interakcí sodných solí s termoresponzivním poly-N-isopropylakrylamidem ve vodných roztocích

Adam Kovalčík (B3)

školitel: Ing. Daniel Ondo, Ph.D.

Cílem této práce bylo získat hlubší povědomí o termodynamickém chování polymeru poly-*n*-isopropylakrylamidu (pNIPAM) ve vodném roztoku a za přítomnosti sodných solí v roztoku. Jelikož dolní kritická rozpouštěcí teplota binárního vodného roztoku tohoto polymeru je blízká teplotě lidského těla (306 K), je tento polymer díky svým termoresponzivním vlastnostem potenciální kandidát na přenašeče léčivých látek. Ke zkoumání chování těchto systémů (polymer-voda-sůl) byly použity techniky diferenční skenovací (DSC) a izotermní titrační kalorimetrie (ITC). Použitelnost kalorimetrických metod byla vymezena na základě předběžných měření teploty fázového přechodu zákalovou metodou pomocí bodotávku. Titrační křivky získané za izotermních podmínek byly modelovány pomocí dvoustavového chemického modelu mezi rozbaleným a sbaleným polymerem. Byly pozorovány tři různé trendy závislosti teploty a tepla fázového přechodu na molalitě a druhu aniontu, kde v roli aniontů byly zastoupeny anionty thiokyanátový, chloridový a síranový. Tyto trendy korespondují s mikroskopickým modelem z molekulárně-dynamických simulací.

## Studium pigmentů na bázi flavonoidů pomocí SERS spektroskopie

David Palounek (B3)

školitel: Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.

Pigmenty jsou barevné sloučeniny nerozpustné v pojivech. Obecně je lze rozdělit dle struktury, výskytu, barvy, atd. Tato práce se zaměřuje na žluté organické pigmenty na bázi flavonoidů. Vybraným zástupcem takových pigmentů je quercetin. Z důvodu častého výskytu pigmentů v nízkých koncentracích je třeba zvolit dostatečně citlivou techniku. Toto kritérium splňuje, kromě jiných, také spektroskopie povrchem zesíleného Ramanova rozptylu (z angl. SERS). SERS spektroskopie je založena na zesílení signálu pomocí vhodného plasmonického substrátu. Jako substrát byl využíván elektrochemicky pozlacený platinový plíšek, na který byl deponován quercetin ve formě filmu. Tento flavonoid se na zlatý povrch váže fyzikální adsorpcí přes heterocyklickou část molekuly. Výsledky ukazují, že SERS spektroskopie je vhodnou technikou pro studium flavonoidů a navíc, že vlnová délka excitačního záření má vliv na zesílení vibračních módů v různých částech spektra.

## Aplikace titrační kalorimetrie pro stanovení fázového diagramu API + co-former + rozpouštědlo

Yauheniya Piliptsevich (B3)

školitel: Ing. Daniel Ondo, Ph.D.

Jednou z existujících vlastností API (aktivní farmaceutická přísada), která negativně ovlivňuje její funkční a technologické využití pro aplikaci v lékové formulaci, je rozpustnost v rozpouštědle. Výběrem vhodného koformeru pro vytvoření kokrystalu API je jedna z možností pro zvýšení rozpustnosti API. Pro stanovení rozpustnosti a fázového diagramu API + koformer + rozpouštědlo se ve společnosti Zentiva používá technika DITA (diskontinuální isoperibolická termální analýza), pomocí které však nelze vyhodnotit rozpouštěcí teplo. Cílem předložené práce bylo ověření použitelnosti izotermní titrační kalorimetrie pro stanovení jak rozpustnosti tak i rozpouštěcích tepel kokrystalu a jeho jednotlivých komponent v systému API + koformer + rozpouštědlo. Porovnáním rozpustností a rozpouštěcích tepel získaných v rámci této práce s daty z literatury a z průběhu titračních experimentů se ukazuje, že aktuální experimentální uspořádání je vhodné jenom pro stanovení termodynamických dat v binárních systémech s rychle se rozpouštějící tuhou fází.

## Teoretické studium solvatovaného peroxidu vodíku

Bc. Markéta Pilneyová (M2)

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

Peroxid vodíku hraje důležitou roli v chemii atmosféry, kde patří k významným oxidačním činidlům, ale také v radiační chemii, průmyslových oxidacích a astrochemii. Ve všech těchto odvětvích je obvykle součástí vodných roztoků, popřípadě je adsorbován na ledových krystalcích. V této práci se zabývám studiem peroxidu vodíku v kapalných vodných roztocích. K věrohodnému popisu solvatovaného peroxidu vodíku je potřeba nalézt nejprve vhodné nástroje k popisu kapalné vody. Ty musí dobře odpovídat experimentu, ale zároveň je také nutné, aby nebyly příliš výpočetně náročné, neboť simulace bude nutné provádět s velkým počtem molekul vody v klastru okolo peroxidu vodíku k dosažení dobré shody s experimentem.

## Experimental and computational study of properties of selected oxygenated compounds

Bc. Václav Pokorný (M2)

školitel: prof. Ing. Květoslav Růžička, CSc.

In this work, recommended vapor pressures for 10 selected oxygenated compounds are presented. Compounds belong to 3 groups - dialkyl carbonates (dimethyl carbonate; diethyl carbonate; dipropyl carbonate), dimethoxyalkanes (dimethoxymethane; 1,2-dimethoxyethane; 1,2-dimethoxypropane; 2,2-dimethoxypropane) and heterocyclic oxygenated compounds (ethylene carbonate; propylene carbonate;  $\gamma$ -valerolactone). Recommendation is based on new calorimetric values of phase transition temperatures and enthalpies (DSC TA Q1000), heat capacities in condensed phase (SETARAM  $\mu$ DSCIIIa) combined with new vapor pressures obtained by static method (STAT6) and state of the art calculations of ideal gas heat capacities. All abovementioned quantities were treated simultaneously, which enabled rejection of some thermodynamically inconsistent literature data. Recommended data cover technologically important temperature range from 260 K to 320 K.

## Radiační chemie halouracilů studovaná metodami *ab initio* molekulové dynamiky

Jan Poštulka (B2)

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

Ve své práci se zaměřuji na studium energetiky elektronového záchytu na uracilu, 5-bromuracilu a 5-fluoruracilu pomocí metod *ab initio* molekulové dynamiky. Práce je inspirována experimenty v Laboratoři molekulových klastrů ÚFCH JH AV ČR, při kterých byla měřena hmotnostní spektra klastrů halouracilů a vody jednak po ionizaci, a dále po elektronovém záchytu. Má práce přispívá k vysvětlení experimentálních dat a zároveň má přesah do radioterapie, neboť halouracily jsou účinnými radiosenzibilizátory. Svými výpočty jsem zjistil, že elektronová afinita uracilu je nižší než u halouracilů. Reorganizační energie roste s počtem molekul vody v klastru. Studoval jsem samotné molekuly halouracilů a jejich klastry se třemi a pěti molekulami vody. Z výpočtů vertikální elektronové afinity jsem zjistil, že její hodnota podél trajektorie molekulové dynamiky je mnohdy výrazně vyšší než hodnoty pro optimální geometrie. Pro 5-fluoruracil dosahuje až 0,4 eV pro samostatnou molekulu, 0,5 eV pro klastr se třemi molekulami vody a 0,6 eV pro pět molekul vody. Pro 5-bromuracil jsou hodnoty vyšší a to 0,4 eV, 0,8 eV a 1,0 eV. Tyto výpočty mohou sloužit k odhadu počtu vypařených molekul vod v průběhu záchytu elektronu, což umožní rekonstruovat rozdělení velikostí klastrů v původním neutrálním paprsku.

## Necondonovské efekty v absorpčním spektru azobenzenu

Jaroslav Sita (B3)

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

V předkládané práci se zaměřuji na kvantitativní modelování absorpčních spekter *trans* a *cis* azobenzenu a jejich teplotní závislosti. Azobenzen jakožto fotochromní molekulární přepínač při ozáření světlem přechází mezi dvěma izomerními strukturami. Této jeho vlastnosti se využívá v mnoha odvětvích vědy a průmyslu, jako například ve farmakologii, úpravách vlastností povrchů materiálů či aktinometrii. Experimentální výsledky v posledně zmiňovaném využití ale kvantitativně neodpovídají teoretickým poznatkům. Mohlo by být absorpční spektrum azobenzenu naměřeno špatně? Skupina doktora Hegera z Brna toto spektrum přeměřila a navíc v něm našla zajímavou teplotní závislost. V mé práci se zaměřuji na modelování těchto spekter při různých teplotách pomocí kvantově-chemických metod. Rozdíl těchto spekter ukazuje, že u přechodu  $S_0 \rightarrow S_1$  intenzita s rostoucí teplotou roste, zatímco u přechodu  $S_0 \rightarrow S_2$  intenzita naopak s rostoucí teplotou klesá. Tomuto jevu odpovídá takzvané necondonovské chování molekuly. Z výsledků mé práce plyne, že vypočtená spektra korespondují s experimentem. Tato práce je výchozím bodem pro další studie, jejichž součástí bude například modelování spekter včetně vibračního rozlišení.

## Studium atmosféricky významných klastrů pomocí molekulových paprsků a různých metod hmotnostní spektrometrie

Bc. Daniela Šmídová (M2)

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

Na povrchu ledových částic polárních stratosférických mraků dochází k heterogenním reakcím, které přispívají k úbytku ozonu. Tyto procesy můžeme experimentálně sledovat na detailní úrovni a zároveň bez zanedbání vlivu okolního prostředí pomocí molekulových klastrů. V experimentu s molekulovými paprsky byly zkoumány jednak samotné vodní nanočástice ale především smíšené klastry složené z vody a dusíkatých molekul ( $\text{N}_2\text{O}$ ,  $\text{NO}$ ,  $\text{NO}_2$  aj.), které jsou významnými polutanty atmosféry. Ke studiu klastrů generovaných supersonickou expanzí byly použity různé metody time-of-flight hmotnostní spektrometrie: elektronová ionizace (EI) v pozitivním i negativním módu a fotoionizace po dopování sodíkem (NaPI). Tato unikátní kombinace uvedených metod představuje nový nástroj pro studium reaktivity hydratovaného elektronu v klastrech. Zatímco EI je univerzální a umožňuje ionizovat v principu všechny klastry, pomocí NaPI lze ionizovat pouze klastry s hydratovaným elektronem. Srovnání těchto dvou technik tedy umožňuje určit, zda se solvovaný elektron v klastru vytvořil nebo zda došlo k jeho reakci s molekulami v klastru.

# Pokročilé simulace spektroskopických a fotodynamických vlastností Criegeeho intermediátů

Bc. Štěpán Sršeň (M2)

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

Tato práce je zaměřena na teoretické studium Criegeeho intermediátů, které hrají klíčovou roli v troposférické chemii, především pak díky své schopnosti odbourávat těkavé organické látky z atmosféry. Hlavním cílem této práce je tak vývoj pokročilých postupů pro kvantitativní modelování absorpčních spekter dvou nejjednodušších Criegeeho intermediátů a charakterizace dějů následujících neprodleně po fotoexcitaci. Pro modelování spekter jsem použil molekulovou dynamiku ve spojení s reflexním principem. Vzhledem k výpočetní náročnosti metod potřebných pro kvantitativní popis Criegeeho intermediátů jsem přistoupil k pokročilé metodice zpracování dat, čímž bylo možné dosáhnout redukce celkového výpočetního času. Pro převod jednobodových výpočtů na hustotu pravděpodobnosti jsem použil neparametrickou jádrovou metodu Parzenových oken včetně implementace algoritmů pro automatické určení šíře vyhlazovacího okna. Dále jsem implementoval algoritmus pro výběr nejreprezentativnější podmnožiny geometrií, díky kterému lze na základě výpočtů jednodušší metodou zredukovat množství počítaných bodů metody exaktnější. Za použití fotodynamických simulací jsem dále zjistil, že po fotoexcitaci dochází k protažení vazby mezi atomy kyslíku až k odtržení krajního z nich.

## Akcelerovaná dynamika v molekulové spektroskopii

Bc. Jiří Suchan (M1)

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

V mé práci kombinuji přístupy mapování hyperploch volné energie v molekulových simulacích s výpočetními algoritmy pro modelování elektronových spekter. Cílem je návrh inovativní metody výpočtu spekter zahrnující příspěvky, které jsou běžnými molekulárně dynamickými výpočty opomíjeny. Využita je zde metoda metadynamiky a koncept reflexního principu. Výsledky mnou navržené metody porovnávám s experimentálními hodnotami fotoelektronových spekter pro systém vodných klastrů atomu sodíku, který je problematický přítomností hned několika energeticky významných minim. Do budoucna plánuji výpočetně zahrnout i kvantové efekty jader, které mají v systému značný vliv.

## Kalorimetrická studie vybraných chalkogenidů india a gallia

Bc. Radek Točík (M1)

školitel: prof. Ing. Květoslav Růžička, CSc.

V předložené práci jsou uvedeny nově naměřené hodnoty tepelných kapacit v pevném skupenství (kalorimetrem Setaram  $\mu$ DSC3a) pro vybrané vrstevnaté chalkogenidy gallia a india. Konkrétně se jedná o sulfid gallia (12024-10-1), tellurid gallia (12030-19-2), selenid gallia (12024-11-2), sulfid india (12030-14-7), tellurid india (12030-19-2) a selenid india (1312-42-1). Chalkogenidy gallia mají široké uplatnění jako polovodičové materiály, mají dobré luminiscenční vlastnosti a jsou často součástí termoelektrických konvertorů. Chalkogenidy india jsou dobré polovodiče a používají se v optice a při solární přeměně energie. Jsou součástí velmi citlivých infračervených detektorů a tenzometrů. Vybraná literární data tepelných kapacit byla v této práci srovnávána spolu s nově naměřenými hodnotami. Výsledkem jsou doporučené hodnoty tepelných kapacit v technologicky významném rozsahu teplot od 258 do 358 K.

## Kofein ve vodných roztocích (trochu netradiční termodynamický popis)

Markéta Tomandlová (B3)

školitel: RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.

Kofein je významnou látkou v potravinářství a farmacii. Cílem této práce bylo stanovit iontově-specifické efekty v binárním systému (voda/kofein) a v ternárních systémech (voda/kofein/sůl) pomocí měření hustoty a osmolality. U binárního systému byly určeny parciální molární objemy a chemické potenciály. Z těchto veličin byly pomocí maticového formalismu vypočteny Kirkwood-Buffovy integrály, které poskytují kompletní termodynamický popis interakcí v roztocích kofeinu. U ternárních systémů byl porovnán vliv tří sodných solí ( $\text{Na}_2\text{SO}_4$ ,  $\text{NaCl}$ ,  $\text{NaSCN}$ ) na chemický potenciál kofeinu. Pro tyto systémy byl určen preferenční koeficient, který lze chápat jako zobecnění vysolovací konstanty  $k_s$ . Vypočítané hodnoty jsou v souladu s Hofmeisterovou řadou aniontů stejně jako se současnými publikacemi, které se zabývají vlastnostmi kofeinu ve vodných roztocích.

SPONZOŘI SEKCE CHEMICAL ENGINEERING I, II



**ŠKODA**



**Lonza**



## Personalised medicine dosing via API printing on porous placebo tablets

Sarah Akhlasová (B3)

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

Today's medicine dosing is very limited – drugs are manufactured on a large scale and usually only in one variety of API (Active Pharmaceutical Ingredient) dosage strength in order to keep the cost of manufacturing low. A possible improvement of this inflexible state is personalised medicine dosing. With it every patient will have his or her own tailor-made medicaments. That means appropriate dosing of API or the possibility to combine more than one API into the substrate to reduce the overall number of pills the patient has to take. The goal of this work is to find a simple, automated and cost-effective method of preparing personalised medicaments, which could take place directly in the pharmacy shops or at people's homes. The method consists of precise dosing of API into an already prepared substrate. In the present work, the prepared tablets are characterized using XRPD, DSC and FT-IR spectroscopy to determine the API form and deposition uniformity, and then dissolution tests are conducted to confirm the API content and to study the release profile. So far, several BCS Class II APIs were successfully infused into the substrates using on-demand dosing. Later characterization revealed that no crystalline API was present, and the dissolution profiles were very satisfactory.

## Influence of the coupling strength on the chimera states and transitions between its regimes

Mauricio Arrastúa (M2)

školitel: Ing. František Muzika, Ph.D.

This paper is focused on the influence of time delayed coupling on the occurrence of discrete chimera states in coupled cells with glycolytic oscillatory reaction in a cyclic array. The experimental setup is constructed as two measured, stirred and thermostated cuvettes with continuous feed and outflow, which are coupled via peristaltic pump with reciprocal pumping of reaction solution. Each coupling tube works as a cascade of continuous stirred tank reactors. The time delay coupling simulates the length of a continuous stirred tank reactors cascade to substitute multicellular communication between two distant cells in neural network. By measuring absorbance levels of both reactors simultaneously, we can determine the constant concentration levels of adenosine metabolic pools and NAD metabolic pools. While the adenosines and NAD<sup>+</sup> are transmitted to 260nm, NADH concentration is transmitted separately to 340nm, indicating dynamic behavior of ATP and thus the whole glycolytic reaction chain. We report the occurrence of synchronized and desynchronized states of glycolytic oscillatory reaction providing basic steps on the study of animal neuronal behavior, because neurons run on glucose fuel and therefore glycolytic oscillations can also affect neuronal activity.

## Preparation of silica nanoparticles encapsulated in liposomes

Martin Balouch (B3)

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

Liposomes, lipid bilayer vesicles, are the subject of intensive research for many possible applications in drug delivery. Active pharmaceutical ingredients (APIs) are encapsulated directly in the lipid bilayer or in the aqueous solution inside the liposome capsule. The liposome prevents a premature release of API and also protects it from the environment. However, the loading capacity of liposomes is relatively small, thus a method of increasing the API content inside liposomes is desired. Silica nanoparticles are well known for their good sorption properties and various APIs can be easily loaded inside their small mesopores, which would increase the loading capacity of liposomes. The aim of this work is to prepare silica nanoparticles of sufficiently small size to be suitable for intravenous applications (below 50 nm), load them with API and then encapsulate them into liposomes. An extensive assay of various silica preparation methods was conducted to identify a suitable synthesis yielding nanoparticles fulfilling the specified requirements (diameter below 50 nm and being able to adsorb API). Silica nanoparticles with various surface chemistry in combination with liposomes made of variously charged lipids have been tested and suitable combinations have been identified.

## Analysis and optimization of 3D printed pharmaceutical tablets

Luna Azul Cantillo (B3)

školitel: Ing. Matěj Novák

This work is focused on development of biocompatible filaments fabricated by hot melt extrusion and used as feed material for Fused Deposition Modeling 3D printer in order to produce drug-containing tablets. The composition and mechanical properties of the filaments, which are objects of analysis of the research, have the key impact on 3D printability. Consequently, the excipient was modified by incorporating plasticizer and other additives or by changing ratios of used polymers. Homogeneity and content of API of filaments were also analyzed to modify properties of filaments to almost ideally printable ones. The aim of this project is automatize analytical methods appropriate for filaments and to create their composition permitting automatization and simple maintenance in future mass production of pharmaceutical companies. Advantages of tablets produced by 3D printing include their predefined porosity and possibility to make tablets out of sections with different solubility to incorporate multiple drugs in a single tablet or to create personalized pharmaceutical tablets with predefined drug dosage, optimized for a specific patient needs or with easily modified shapes making their appearance more attractive.

## Fabrication and Characterization of Magnetic Core-shell Nanofibers

Bc. Viktorie Čermochová (M2)

školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

The goal of this research is fabrication and characterization of magnetic biodegradable membrane consisting of composite core-shell nanofibers for tissue scaffold and membrane applications. In the presence of an alternating magnetic field, such membrane could provide mechanical stress and strain on cells cultured on its surface, and so enhance the cell growth. The membrane permeability can also be affected. In addition, nanofibrous structure adds number of other benefits to a bio applications, as, for instance, high specific surface area, high porosity, fast degradability or short diffusion length. Polyvinyl alcohol (PVA) and polycaprolactone (PCL) are chosen as two suitable polymers - materials commonly used in wound dressing and scaffold engineering. Electrospinning method is used to produce core-shell structured nanofibers, shell of the fiber from polymer and core from the polymer and iron oxide nanoparticles (hydrodynamic diameter of 30 nm). The successful fabrication of the nanofibers is verified with scanning electron microscopy (SEM) and the core-shell structure investigated with transmission electron microscopy (TEM) technique. The diffusion of small molecules through the membranes is investigated in Franz diffusion cells.

## Artificial chemotaxis of droplet groups

Sara Patricia Ferreira Da Silva (M1)

školitel: Ing. Jitka Čejková, Ph.D.

This project is focused on the directional movement of non-living objects in chemical gradients, in order to discover and to better understand some analogies between the behaviour of chemotactic liquid droplets groups and living systems, like tumour cells, or between the behaviour of chemotactic liquid droplets groups and liquid robots, comparing the movement, the self-division and the group dynamics. In order to achieve what was mentioned, some experiments were done adding a varied number of decanol droplets in one side of the glass slide and the salt solution in the opposite side of the glass slide, in order to create the concentration gradient to observe the chemotactic movement. In this paperwork, the discussion of the results will be about how the size and the number of droplets effects the induction time and speed of droplets.

## Formulation of hydrophobic drugs in the form of nano-suspensions with tunable release kinetics

Andre Haiek (B3)

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

The project is part of a large initiative to prepare active pharmaceutical ingredients (API), i.e. Ibuprofen in the form of nano-particle dispersion through several techniques. Bottom-up approach using emulsification and anti-solvent precipitation will be adopted, what allows to produce nanoparticles where API will be stabilized by suitable surfactant or polymer. To tune the release profile of the API and its duration, different polymers will be tested and a combination of techniques will be used to characterize the prepared nanoparticles, content and localization of API as well as its release kinetics.

## Magnetic Multi-Compartment Nano Carriers for Active Release

Bc. Jan Haša (M1)

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

This paper is addressing the challenge of targeted delivery of unstable active pharmaceutical ingredients that can be synthesized *in situ* from stable precursors. For such application, a multi-compartment carrier that would allow the encapsulation of the precursors needs to be prepared. In this work, one specific implementation of such multi-compartment carriers is discussed. It comprises of liposomes, which function as compartments for the encapsulation of active substances or their precursors, an oppositely charged polyelectrolyte (poly-L-lysine), which serves as a linker between liposomes and iron oxide nanoparticles, which allow magnetic navigation and radiofrequency heating induced release from the liposomes. The properties of these complex carriers and their stability in physiologically relevant fluids with respect to both size and the encapsulation of actives will be discussed. The magneto-tactic behaviour and stimuli-responsive release properties of the carriers will be demonstrated.

## Surface modification of alginate microparticles prepared by microfluidic technique

Bc. Anna Hubatová-Vacková (M1)

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

The main goal of the proposed work is to prepare composite alginate microparticles for use in targeted drug delivery systems. The aim of targeted drug delivery is to increase the concentration of a drug in a specific part of the body, and therefore improve its efficiency, decrease side-effects, avoid interaction with healthy tissue etc. Alginate microparticles were prepared by the extractive gelation technique in a microfluidic chip. Effects of the varying flow rates of continuous and disperse phase on the final size of the microparticles were evaluated. Their sizes varied between 5 and 10  $\mu\text{m}$  which is a size comparable to those of red blood cells. The modification of the microparticle's surface is important for their specific adhesion to the cancer cells. First methods of antibody immobilization on the surface of the microparticles were evaluated.

## The experimental study of oscillation dynamics of free vortex surface in the uncovered unbaffled stirred vessel

Bc. Tomáš Kracík (M1)

školitel: doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha

In chemical, biochemical and food processes, apparatuses for mixing are used, among which there are unbaffled stirred tank reactors. Often, a batch used in these apparatuses exhibits increased viscosity in the comparison with water. The knowledge of oscillation characteristics is essential for the determination of system resonances. The oscillation characteristic could be observed as a free vortex surface resonance which creates the oscillation waves. The case of small amount of oscillation waves with the high amplitude can lead to the hazardous situations. The oscillation characteristics depend on several input parameters. Commonly used equation for the natural oscillation frequency estimation does not reflect the effect of increased viscosity. In this work, experimental data and results for the natural oscillation frequencies in water and viscous batches are presented. Natural oscillation frequencies were measured on a laboratory vessel (with the diameter of 0.49 m) by collecting velocity time series with the Pitot tube system for various impeller configurations, impeller speed and two viscosities of the batch. Description and prediction of the sloshing behavior could lead to the more precise industrial design and to the better understanding of mixing overall.

## 3D tissue model for specific adhesion studies of modified nanoparticles to cancer cells

Ing. Anna Krejčí (M2)

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

This work is concerned with measuring of specific adhesion of nanoparticles modified by a monoclonal IgG M75 antibody to cancer cells expressing a specific transmembrane protein – carbonic anhydrase IX (CA IX). HT-29 (expression of CA IX) and DLD1 (negative control), both colon carcinoma cell lines, were used for the experiment. 3D model was printed by a 3D printer from biocompatible material poly-L-lactic acid (PLA). For the purpose of the experiment, the inner surface of the 3D tissue model had to be completely covered by cells. Since observing the inner surface of the complex scaffolds forming the 3D model with a microscope was difficult, kinetics of cell growth was studied on simplified structures with the same surface morphology in order to determine cell number in the model and time needed to get a fully covered surface. At first, the specific adhesion of silica nanoparticles modified by IgG M75 antibody to HT-29 cells was verified by flow cytometry. Silica nanoparticles with surface covered with HPMA were used as a negative control. To simulate physiologically relevant conditions, adhesion studies were conducted under laminar flow in the 3D tissue model. Preliminary studies confirmed the specific adhesion of the nanoparticles modified by IgG M75 antibody to HT-29 cells.

## Control of electrospinning processes using image analysis

Bc. Marek Michalko (M1)

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

Electrospinning process is difficult to control and to optimize because of the complicated control of final fibre quality during the process. Strong electric field and very precise requirement for air condition preclude usage of wide spectrum of measurement sensors. At the moment the only control of the process is restricted to measurement of air conditions at the beginning of the process and measurement of prepared nanofiber sample, which however, cannot be used for on-line control of the process. In this respect an application of imaging technique with its direct observation of the electrospinning process and consequent its control is very attractive alternative. This work will be focused on the application of the image analysis technique to monitor the behaviour of polymer solution during the electrospinning processes, determination of the key physical parameters as well as optimization of the electrospinning process based on on-line measurement using a digital camera.

## Measurements of Power Input and Gas Hold-Up in a Three-Phase system

Bc. Gabriele Pancaldi (M2)

školitel: doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha

Volumetric mass transfer coefficient plays a fundamental role in all those applications where the gas-liquid and gas-liquid-solid mass transfer occur. For decades many authors tried to find valid correlations to predict the  $k_La$  in order to use them in industrial scale; despite many applications, no one has managed to get a valid correlation for three-phase systems. Literature shows that power input and gas hold-up are fundamental parameters for the prediction of  $k_La$ . The aim of this work is to develop valid correlations for the prediction of power input and gas hold-up in a three-phase stirred vessel containing settling particles, under a wide range of experimental conditions. Measurements were conducted in a single-impeller and flat-bottomed vessel with a coalescent batch. Were developed several correlations both for the power input and gas hold-up, using Rushton Turbine, which represent well the experimental data. It is found out that solids affect more the behavior of gas hold-up than the power input one and that the power input values increase with increasing of solid concentration. Results from measurements carried out with the Pitched Blade Turbine are more difficult to understand and process due to the not homogeneity of the three-phase system.

## Parametric Characterization of Microencapsulation Process

Joana Pereira (M1)

školitel: Ing. Jan Tomas

Hydrogel beads are being used for encapsulation of active ingredients and for their protection. The sodium alginate beads represent one of the most widely used system for enzymes and proteins immobilization and their controlled release. In this paper the fabrication of calcium-alginate beads by Encapsulator (Buchi B-395) is presented. The encapsulator works on the principle of breaking up a laminar jet of a liquid stream into equally sized droplets by applying controlled vibrational frequency to the liquid stream (creating a dripping mode). The optimal process parameters of the encapsulator (flow rate, vibration frequency and applied voltage) with respect to the final shape, particle size distribution and quantity of the alginate beads were experimentally investigated. Image analysis (Quick Photo Camera software) was used to characterize the fabricated beads.

## Experimental validation of the models to predict the transport of nanoparticles in in vitro cell cultures

Bc. Zuzana Ruberová (M1)

školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Modern technologies use nanoparticles in several consumer products (cosmetics, clothing etc.) although their toxicity has not been exactly determined. Since behavior of nanoparticles and molecules in *in vitro* system is different, new approach to toxicity assays is required. Recently, mathematical models describing transport processes of nanoparticles in cell culture were developed. The aim of this work was to experimentally validate and provide an opinion on usability of 'In Vitro Sedimentation, Diffusion and Dosimetry' model. For the model validation the human cells were exposed to the gold nanoparticles for given time (3 or 24 hours). The exposure was stopped by removing the supernatant and detaching cells from the well. The amount of gold nanoparticles in both supernatant and cells was measured by ICP-AES method. It was shown that the deposited dose increases with increasing time (by comparing 3 and 24 hours' exposure) but in none of the cases, 100% initial dosage was deposited to the cells. Nevertheless, values obtained from mathematical model were in agreement to the experimental ones, hence, the mathematical model is reasonable for estimation of nanoparticles toxicity for *in vitro* experiments.

## Effect of aeration and stirring on the 2,3-butanediol production using non-pathogenic bacteria

Bc. Jan Šmidrkal (M1)

školitel: doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha

2,3-butanediol is a platform chemical with various applications in the industry. It can be produced by the fermentation of sugars. To this date, the best results has had the production of 2,3-butanediol using group risk 2 bacteria like *Klebsiella oxytoca*. However, the pathogenicity is a big obstacle for the future large scale production. Furthermore the 2,3-butanediol pathway is strictly connected with the oxygen supply conditions. The aim of this work was to evaluate the effect of different values of aeration and stirring in order to evaluate the fermentation performances in terms of concentration of product and byproducts, employing the non-pathogenic microorganisms *Bacillus licheniformis* ATCC 9789. Fermentations were carried out with glucose as carbon source. Each experiment was carried out at the certain aeration and agitation. Agitation was varied in the range of 250 – 500 rpm and aeration in the range of 0,1 – 0,5 vvm. For each fermentation the  $k_La$  was evaluated for determining the relationship between the fermentation performances and the  $k_La$ . The  $k_La$  was measured by dynamic method. The highest yield and productivity were obtained at 425 rpm and 0,43 vvm. In particular the concentration of by-products was the lowest.

## Bubble adhesion onto solid surface during plastics flotation

Bc. Kateřina Soušková (M2)

školitel: Dr. Ing. Pavlína Basařová

Flotation as a selective process to separate hydrophobic and hydrophilic materials recently found its application in plastics separation. Gamma flotation is one of the methods to achieve selective wetting and can be performed using surface active compounds. The bubble stability and dynamics of bubble adhesion onto solid surface influence the flotation recovery. The aim of this project is to extend knowledge of the dynamics of bubble adhesion focusing mainly on the three-phase contact (TPC) line expansion. The experiments were carried out in demineralized water and two surface active compounds solutions, Terpineol and SDS. Hydrophobic silanized glass and piece of PET bottle were used to represent solid surface. The results were obtained by image analysis. There are several theoretical models suggested for the three-phase contact line expansion. The image capturing velocity of 16 000 fps enabled detailed study of the velocity of TPC line expansion, which together with dynamic contact angles will be used to study the suitability of theoretical models for description of TPC line expansion.

## *In-situ* production of garlic-based antibacterial agents using encapsulated alliinase

Adam Tywoniak (B3)

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

The work presents development of a system for controlled *in-situ* production of allicin, a potent antibacterial and cytotoxic agent naturally occurring in garlic. Therapeutical application of allicin is limited by its high reactivity and rapid biotransformation upon administration. This limitation can be overcome by producing allicin from non-protein amino acid alliin, a stable precursor, by action of the enzyme alliinase. A protocol for extraction of both alliin and alliinase from garlic will be presented together with analytical methods for evaluation of the purification process. Multiple strategies for preparation of the enzyme/precursor system will be discussed, starting with addition of alliin to a suspension of alginate microbeads with immobilized alliinase. To reduce loss of precursor due to passive diffusion, encapsulation of both components is suggested, either into oppositely charged microparticles containing each substance or using structured core-shell alginate beads. The presented approaches allow for targeted production of allicin, paving the way for cutaneous treatment of infections caused by multi-drug resistant bacteria.

## Study of nanoparticle interaction with plasma proteins

Bc. Otakar Vinklář (M1)

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

The use of drug delivery systems employing nanoparticle (NP) carriers is spreading rapidly. In some cases, undesirable opsonization of these NPs with blood proteins occurs after intravenous administration which leads to lowering the plasmatic half-life and accumulation of NPs in Mononuclear Phagocyte System (MPS). This work focuses on a reduction of phagocytic NP uptake by modifying NPs with hydrophilic polymer poly N-(2-Hydroxypropyl) methacrylamide (pHPMA), which grants NP stealth properties (avoids recognition by MPS). NP stability and the ability to resist opsonization in conditions within blood vessels was studied by Nanoparticle Tracking Analysis (NTA). Semi quantification and verification of modifying layers was accomplished by Scanning Electron Microscopy (SEM) with Energy-dispersive X-ray Spectroscopy (EDS). The reduction of opsonization and increased stability of NPs modified by pHPMA will be shown and discussed in the presented work.

## Development of Lattice Boltzmann model for flow in porous filters

Bc. Marie Vyhlídková (M2)

školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Particulate filters for soot removal have become standard equipment in diesel exhaust after-treatment systems. With the upcoming emission legislation, even gasoline cars will be fitted with a filter to meet the restrictions. Recent developments have focused on the integration of catalyst for abatement of gaseous pollutants (CO, hydrocarbons and NO<sub>x</sub>) into the filter. The combined system benefits from the reduced size as well as cost savings. However, the distribution of catalytic material in the filter can affect the catalytic activity, soot trapping efficiency as well as pressure drop, which has to be understood to design a system with optimal performance. This contribution introduces the newly developed mathematical model based on the Lattice Boltzmann equations for gas transport through a porous medium with complex geometry. This approach represents an alternative to standard description by Navier-Stokes equations for continuum flow. The simulation results – velocity profiles and pressure fields – will be presented for several case studies such as flow in pipe, flow passing single obstacle including formation of von Kármán's vortices, and flow in porous filter.

## Investigation of properties of porous materials created by physical locking

Bc. Boleslav Zahradník (M1)

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

Porous materials is the field with intensive research due to their unique properties and wide range of applications, namely in mechanics, geoscience, material science, engineering, biology and biophysics. The porous materials are composed of the skeleton and the pores. The skeleton is usually formed by the solid phase and the pores are filled with fluid, liquid or gas. The size, structure and properties of the porous materials depend on the method of preparation, the type of material used for the skeleton and fluid which fills the pores. In this work, porous microparticles, so called microclusters, were prepared by aggregation of polymeric primary particles. The polymeric nanoparticles have core-shell structure where the core is formed by highly crosslinked polymethyl methacrylate and the shell is formed by partially crosslinked polymethyl methacrylate and polybutylacrylate. The partially crosslinked structure of the shell increase the adhesivity of the nanoparticles which leads to the physical locking of the primary particles and creation of the microcluster. The adhesivity of the shell can be influenced by the temperature. The effect of temperature and speed of stirring on the structure and size of the microclusters was investigated.

SPONZOŘI SEKCE CHEMICKÉ INŽENÝRSTVÍ I-V



**ŠKODA**



**Lonza**



## Preparation of drug forms using emulsification

Bc. Mosir Aboeldahab (M1)

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

Jedním ze současných problémů, kterým čelí obor farmacie, je rostoucí počet syntetizovaných aktivních farmaceutických látek (API), které mají nízkou rozpustnost ve vodě, z čehož plyne jejich nízká dostupnost v lidském těle (biologická dostupnost). Účinným způsobem, jak zvýšit biologickou dostupnost, je snižování velikosti částic API v rozmezích mikro a nanometru, jelikož mají větší plochu a větší zakřivení, což zvyšuje jejich rychlost rozpouštění. Objektem prezentované práce je experimentální studie, která zkoumá možnost přípravy suspenze nanočástic pomocí technologie "Bottom-up" metodou emulzifikace. Pro přípravu byla použita kombinace různých surfaktantů a rozpouštědel. Z nich byly následně vybrány podmínky, za kterých jsme byli schopni připravit stabilní částice v širokém rozsahu velikostí. Pro vybrané podmínky byl dále zkoumán efekt koncentrace surfaktantu a ko-surfaktantu, a efekt rychlosti otáčení při přípravě částic. Získané distribuce velikosti částic byly charakterizovány pomocí dynamického rozptylu světla. Získaná data potvrzují možnost použití této metody při přípravě nanočástic léčiva s dobrou stabilitou a v širokém rozsahu velikostí.

## Preparation of polymeric nano- and micro-fiber suspensions

Lukáš Bláha (B3)

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

Polymeric micro/nano fibers have a great potential in many applications such as tissue engineering, aerosol and liquid filtration, sensors, and so on, however, one of the main challenges is to develop scalable, rapid, and cost-effective processes for micro/nano fibers fabrication. This work is based on the simple method that polystyrene dissolved solution is directly injected to a viscous medium that contains antisolvent under shear force. As a result, polystyrene fibers were obtained having the diameter in range of 0,4 - 1,8  $\mu\text{m}$  with smooth surface and stabilized by a surfactant to prevent aggregations. Further, fibers with smaller diameters in a range of 100-600 nm were fabricated by varying the shear rate. These results showed that this process is simple and feasible technically, which could be easily scaled up for continuous fabrication of micro-nano fibers.

## Nanášení katalytické vrstvy do kanálku monolitického reaktoru

Miroslav Blažek (B3)

školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Monolitické reaktory jsou tvořeny nosičem z keramiky nebo kovu, který 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 výroбах, tak pro snižování množství škodlivin ve výfukových plynech automobilů. V automobilovém katalyzátoru dochází k oxidaci oxidu uhelnatého a nespálených uhlovodíků na oxid uhličitý a redukci oxidů dusíku na plynný dusík. Konverze škodlivin 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 optimalizace postupu nanášení katalytické vrstvy do monolitu namáčením (dip-coating). Monolit je ponořen do suspenze s deponovaným materiálem a poté je vytahován určitou rychlostí ven. Na povrchu monolitu zůstane tenký film, ze kterého se odpaří rozpouštědlo. V rámci práce byl zkoumán vliv následujících parametrů na tloušťku nanesené vrstvy: pH suspenze a její viskozita, rychlost a počet opakování namáčení monolitu a tlak použitý při profukování kanálků pro odstranění přebytečné suspenze.

## Influence of membrane properties on vanadium redox flow battery operating parameters

Bc. Jiří Charvát (M1)

školitel: Ing. Jaromír Pociď, Ph.D.

Produkce elektřiny z časově proměnlivých obnovitelných zdrojů narůstá, což vytváří nové výzvy pro přenosovou síť. Tyto výzvy mohou být vyřešeny distribuovanými stacionárními úložišti energie. Vanadová redoxní průtočná baterie (VRFB) se jeví jako ideální úložiště vzhledem ke snadno škálovatelné kapacitě (kWh), dlouhé životnosti a vysoké účinnosti. Koncept VRFB funguje velmi dobře, ale relativně vysoké investiční náklady zpomalují zavádění do praxe. Iontově selektivní membrány, které od sebe oddělují záporný a kladný elektrolyt v poločlánku baterie při zachování iontového propojení, představují významnou část investičních nákladů. Jejich vlastnosti zároveň významně ovlivňují provozní parametry baterie, jako jsou výkon, účinnost a pokles kapacity způsobený difuzí vanadových iontů. V této práci byla navržena a provedena experimentální studie membrán. Měření permeability iontů vanadu přes různé typy komerčních perfluorosulfonových membrán a charakterizace těchto membrán měřením odporu a nabíjecími/vybíjecími cykly přímo v temperovaném laboratorním článku vanadové redoxní průtočné baterie byly hlavními použitými metodami. Získané výsledky přispěly k pochopení vlivu jednotlivých parametrů membrány (tloušťka, iontově výměnná kapacita, vnitřní struktura) na provozní vlastnosti baterie.

## Charakterizace iontově-výměnných částic používaných v heterogenních iontově-výměnných membránách

Bc. Lukáš Chroust (M1)

školitel: Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.

Hlavní funkční složkou heterogenních iontově-výměnných membrán široce využívaných v elektroseparačních procesech jsou rozemleté iontově-výměnné částice. V této práci se zabýváme vývojem a optimalizací technik umožňujících měření elektrochemických a elektrokinetických vlastností jednotlivých iontově-výměnných částic. Polarizační křivky nám poskytují údaje o chování iontově-výměnných systémů. Naše měření jsou zaměřena na tzv. nadlimitní oblast, ve které dochází k nárůstu vodivosti. Zkoumáme mechanismy, které tento jev způsobují. U aniontových částic pozorujeme vliv štěpení vody pomocí měření pH. Kationtové částice sledujeme pod fluorescenčním mikroskopem, kde studujeme vznik proudění s víry v okolí částice. Z těchto částic budeme později vytvářet nejrůznější prostorové struktury (heterogenní membrány s vhodně zvolenou geometrií částic) s cílem pochopit vliv prostorového uspořádání částic na chování membrán v elektrickém poli.

## Matematické modelování hasení vodní mlhou

Bc. Tereza Čmelíková (M2)

školitel: doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

Stabilní hasicí zařízení slouží pro potlačení vzniklého požáru nebo zabránění jeho šíření. Je tvořeno systémem trysek na potrubní síti. Po aktivaci z trysek proudí voda ve formě malých kapek. Hasicí účinek je způsobený odpařením vody, tím dojde k snížení teploty a zároveň k vytlačování vzdušného kyslíku vodní parou. V současné době se začínají více rozšiřovat mlhové trysky, které oproti klasickým, vytvářejí kapky o průměru až 100 krát menším. Právě velikost kapek je důležitým parametrem při hasení, protože s ní souvisí jednak rychlost odpařování ale také vliv okolního proudění na strhávání kapek. Předložená studie se zabývá modelováním tvorby kapek a účinkem hasení metodou počítačové dynamiky tekutin (CFD). Práce je zaměřena na validaci numerických výpočtů pro mlhová zařízení. Zahrnuje jak model samostatně padající kapky tak celého sprchového proudu. Dále je součástí model tepelného namáhání ocelové konstrukce při požáru. Cílem je sestavit metodiku výpočtu, která by mohla v budoucnosti sloužit jako pomocný nástroj při navrhování rozmístění trysek například v chemických provozech s nestandardním uspořádáním.

## Modelování dynamiky enzymového rozkladu peroxidu vodíku v membránovém reaktoru

Bc. Daniil Denisov (M2)

školitel: prof. Ing. Igor Schreiber, CSc.

V této práci jsou uvedeny výsledky modelování dynamiky systému reakcí peroxid vodíku-kataláza a glukóza-kyslík-glukózaoxidáza v míchaném průtočném reaktorovém systému. Tento systém má dvě části: průtočný zásobník a průtočný enzymový reaktor, vzájemně propojené membránou umožňující pomalý přenos peroxidu do reaktoru. Systém má nelineární dynamiku v důsledku složité kinetiky katalázy a propojení obou enzymových reakcí přes společné reagující složky: kyslík a peroxid vodíku. Cílem práce bylo nalézt oblasti v prostoru experimentálně nastavitelných parametrů, kde se vyskytují různé dynamické režimy, a porovnat výsledky modelování s dostupnými experimentálními výsledky. V průběhu experimentů systém vykazoval oscilace rozpuštěného kyslíku. Hlavním výsledkem této práce je analýza modelu navrženého v předchozí práci pomocí metody numerické kontinuity s využitím programu CONT. V rovině experimentálně nastavitelných parametrů průtočná rychlost – vstupní koncentrace katalázy byla nalezena rozsáhlá oblast oscilační dynamiky a přilehlá úzká oblast násobných ustálených stavů. Dynamickými simulacemi v oscilační oblasti bylo zjištěno, že systém vykazuje periodické oscilace, oscilace smíšeného typu a chaotickou dynamiku. Aperiodická dynamika je v souladu s oscilacemi pozorovanými experimentálně.

## Kinetika smáčení porézních vícesložkových materiálů

Bc. Wilhelm Feigl (M1)

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

Pokud někoho po dlouhém pracovním dnu pobolívá hlava, tak si dá malou bílou tabletku. Každá takováto tabletka se skládá z matrice (většinou škrob nebo jiný sacharid), vlastní léčivé látky (zpravidla složitá organická molekula spíše hydrofobní povahy) a případných dalších složek (dezintegranty, barviva). Optimální účinek léčivé látky však není jen otázkou její koncentrace v tabletce, ale mimo jiné i kinetiky rozpouštění tabletky a s tím spojené rychlosti distribuce léčiva po těle. V této práci je zkoumán právě průnik smáčecí vrstvy tabletkou složenou z binární směsi ibuprofen - laktóza v závislosti na vzájemném poměru obou složek a tlaku lisování. Data jsou získána metodou NMRI, která umožňuje sledovat průnik smáčecí vrstvy tabletkou, z čehož lze vypočítat potřebné kinetické údaje a nakonec i difúzní koeficient jako funkci složení tabletky, což je i hlavním cílem této práce.

## Fluidní čipy pro elektrochemickou charakterizaci nanostrukturovaných materiálů

Bc. Jakub Fiala (M1)

školitel: Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.

V posledních letech nanostrukturované materiály (vodivé polymery, grafen, zlaté nanočástice atd.) zažívají prudký rozvoj a v mnoha oblastech pronikají do našich každodenních životů. Vzniká tak potřeba tyto nové materiály spolehlivě a rychle identifikovat a popsat jejich vlastnosti. Konkrétně se tato práce zabývá vývojem fluidních zařízení, jež jsou ve spojení s elektroimpedanční spektroskopií schopna charakterizovat nanostrukturované vodivé polymery. Tyto polymery vynikají svou schopností měnit elektrické vlastnosti v závislosti na absorbovaných molekulách a díky tomu jsou předurčeny stát se základní součástí nových typů biosenzorů.

## Litografie a pokovování pro výrobu mikrofluidních systémů.

Štěpán Halada (B3)

školitel: Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.

Tato práce se zabývá základními výrobními technikami k produkci mikrofluidních systémů, jmenovitě optickou litografií a pokovováním. Hlavní náplní práce je optimalizace podmínek pro strukturování negativního fotorezistu SU8 pomocí optické litografie a následného vyplnění vytvořených struktur zlatem pomocí galvanického pokovování. Při optimalizaci podmínek strukturování fotorezistu SU8 se studovaly následující parametry: (i) velikost substrátu, na kterém se litografie provádí, (ii) úprava jeho povrchu (čištění), (iii) výška fotorezistu daná podmínkami při jeho nanášení a (iv) délka osvit, sušení a pečení rezistu. Struktury ve fotorezistu poté sloužily jako (i) odlévací maska silikonového elastomeru s označením PDMS a (ii) k přípravě zlatých elektrodových polí. Hlavní důraz byl kladen na elektrodová pole vyrobená galvanickým vyplněním struktur v SU8. Primárně studovanými parametry byla proudová hustota pokovování a stabilita rezistové vrstvy při daném procesu. Po optimalizaci všech podmínek se podařilo připravit elektrodová mikropole požadovaných velikostí. Tato pole se zalévala do epoxidu. V další práci se zaměřím na výrobu epoxidových systémů kombinující elektrodová pole a fluidní kanály.

# Matematické modelování rozpouštění farmaceutických tablet

Bc. Tereza Herinková (M2)

školitel: Ing. Zdeněk Grof, Ph.D.

Je obecně známo, že lék může být pacientovi podán jako injekce, sirup nebo může být třeba inhalován, nejrozšířenější je však pevná forma, která je představována tabletkami, či kapslemi nejčastěji určenými k orálnímu užití. Z hlediska účinnosti je důležité, aby se aktivní látka, která je obvykle schovaná v tabletě ve formě krystalků či amorfních částic vmísených mezi všemi ostatními přídatnými látkami (plniva, pojiva, disintegranty, kluzné látky atd.), vyloučila z tablety správnou rychlostí a ve správném množství. Tato práce si klade za cíl vytvořit model farmaceutické tablety, která je složena ze tří stavebních prvků: účinné látky (API), excipientu, který zobecňuje ostatní pevnofázové komponenty, a nakonec pórů. Primárním cílem je sledovat vliv prostorového rozložení těchto složek v tabletě a sledovat rychlost rozpouštění v závislosti na stavbě tablety, ale i jiných parametrech jako je například difuzní koeficient excipientu v rozpouštědle. Výsledky jsou diskutovány s ohledem na perkolační teorii, z níž vyplývá nelineární závislost rychlosti uvolňování účinné látky na složení tablety. Rovněž je vyhodnocován proces desintegrace (rozpadu) tablet, zejména vliv složení tablety na velikost clusterů, na které se tableta během procesu rozpouštění rozpadne.

## Vliv ceru na funkci trojcestného automobilového katalyzátoru

Bc. Michal Janda (M2)

školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Produkce zplodin ve městech způsobená automobilovou dopravou často vede k výraznému zhoršení kvality ovzduší. Je tedy žádoucí, aby bylo množství emitovaných škodlivin, jako jsou oxid uhelnatý (CO), oxidy dusíku (NO<sub>x</sub>) a zbytky nespálených uhlovodíků (HC), minimalizováno. Velkým přispěvatelem škodlivin je zejména provoz automobilů s málo vyhřátým katalyzátorem, ve kterém není při nízkých teplotách dosahováno dostatečně vysokých konverzí na látky bezpečnější (oxid uhličitý, dusík, voda). K tomuto stavu dochází zejména při prvních minutách po startu, nebo při krátkých pojíždkách po městě. V této práci byla zkoumána strategie řízených oscilací koncentrace kyslíku ve výfukovém plynu, která umožňuje potlačit inhibiční efekty a urychlit zapálení jednotlivých reakcí ve srovnání s režimem konstantního složení. V rámci experimentů byly porovnány vzorky trojcestného katalyzátoru obsahující pouze platinu na alumině (Pt/γ-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) a katalyzátor s přídavkem oxidů ceru (Pt/CeO<sub>2</sub>/γ-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>). Výsledky ukazují, že oxidy ceru fungují díky vratnému přechodu mezi Ce-<sub>2</sub>O<sub>3</sub> a CeO<sub>2</sub> jako významný zásobník kyslíku. Umožňují tak potlačit nežádoucí průrazy nezreagovaného CO a uhlovodíků během oscilačních fází s nedostatkem O<sub>2</sub> na vstupu, čímž dochází k výraznému zlepšení funkce katalyzátoru.

## Studie vlastností slunečních krémů v závislosti na přidaných přírodních brazilských olejích

Bc. Petra Janská (M2)

školitel: Ing. Jitka Čejková, Ph.D.

Cosmetic products represent a very important part of civilized society. The aim of this work was to assess the biological effect of using the oil fraction of different natural plants in the development of new generation of sunscreens with improved sun protection performance. Oils as natural products are less expensive and not harmful for human skin. Six different types of Brazilian natural oils were compared in different types of stress conditions (temperature and light). Viscosity, pH and sun protection factor (SPF) were measured and evaluated. The results indicate an instability of our testing systems. It may be because the emulsifying system and its HLB are adjusted to obtain optimal stability per the polarity of the oil phase and the desired emulsion characteristics, any changes to the composition of the formulation would require an adjustment in the emulsifier type or dosage. So, when we had added different types of Brazilian oils to the stabile sunscreen system, its original balance changed. Then a little instability could appear. This project was performed at Universidade Estadual Paulista in Araraquara (Brazil) in collaboration with Profa. Dra. Vera Lucia Borges Isaac.

## Controlled Assembling of Gold Nanoparticles

Bc. Martina Ježková (M2)

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

Metal nanoparticles are promising field of study due to their special properties suitable for numerous applications. First step to achieve these applications is the synthesis of metal nanoparticles of desired shape and size. In this work we present the synthesis of gold spherical nanoparticles with various sizes. Products of the reactions were characterized with TEM, DLS and UV-VIS spectroscopy. The nanoparticles were consequently used in an assembly process using emulsion method. The products of the emulsification are colloidosomes which are spherical objects with cavities inside. Depending on the applied conditions it was possible to control the size as well as morphology of the formed particles. Preparation of these aggregates represent a significant step in the development of nano-sensors or in the controlled release of drug molecules at the point of interest.

## Experimentálne štúdium enzýmového rozkladu peroxidu vodíka v membránovom reaktore

Bc. Radovan Jurašek (M1)

školiteľ: Ing. František Muzika, Ph.D.

Cieľom štúdia enzýmového rozkladu peroxidu vodíka v membránovom reaktore bolo analyzovať vplyv počiatočnej koncentrácie enzýmu kataláza na dynamiku reakcie peroxid vodíka – kataláza – kyslík – glukózaoxidáza a nájdenie bodu Hopfovej bifurkácie pri zmene jedného počiatočného parametra, t.j. počiatočnej koncentrácie enzýmu kataláza. Reakcia je študovaná v miešanom prietokovom reaktore s dialyzačnou membránou MWCO: 1000. Dynamika systému je spôsobená synergickým efektom katalázy a glukózaoxidázy cez spoločné substráty/produkty (kyslík a peroxid vodíka). Výsledky meraní sú prezentované formou grafov závislostí rozpusteného kyslíka od času, jeden z výsledkov meraní je porovnaný s výsledkom simulácie, uskutočnenej Bc. D. Denisovom, pre overenie zhody modelu s experimentom. Nájdenie bodu Hopfovej bifurkácie a analýza dynamiky oscilačnej reakcie môžu byť dôležité pre následné využitie v palivových článkoch alebo na ovplyvňovanie reakčných síl chemických motorov Janusových častíc, ktoré môžu byť použité k doprave špecifických chemikálií či liečiv. V práci sa taktiež zaoberáme konceptom pohonu Janusových častíc v dôsledku nameranej supersaturácie kyslíkom.

## Vliv blokových kopolymerů na morfologii houževnatého polypropylenu

Kateřina Kholyavytská (B3)

školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

High-impact polypropylene (hiPP) is a heterophase copolymer composed of two non-miscible phases – rigid polypropylene (PP) matrix and soft ethylene-propylene rubber (EPR) dispersed in a form of discrete domains. This structure gives hiPP its unique properties, such as high impact strength, toughness and rigidity. This work presents the morphological study of hiPP with respect to the distribution of ethylene-propylene rubber (EPR) domains inside polypropylene matrix and the effect of block copolymers on structure and properties of hiPP. High impact polypropylene morphology on the submicron-scale was investigated by atomic force microscopy (AFM). During the analyses, we found several interesting differences between hiPP samples which either contained block copolymers or did not. The biggest difference was found in the structure of ethylene-propylene rubber domains. This ascertainment could provide a new insight into how exactly are the block copolymers distributed inside the hiPP. A comprehensive understanding of multiphase structure is the key to a new design and synthesis of advanced hiPP materials with upgraded mechanical properties.

## Studying of diffusion in polymers by pressure-decay method

Jakub Klimošek (B2)

školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Studying of sorption and diffusion in polymers can significantly contribute to the optimization of production processes and thus save time and energy. The aim of this work was to compare diffusivity of penetrants in several polyethylene samples. Diffusion coefficients were measured using our in-house built apparatus, i.e., by pressure-decay method. This method is based on recording the responses to step pressure changes and is applicable in a wide pressure and temperature range. With the newly developed method of data processing we were able to evaluate the measured data thoroughly and to obtain more precise values of diffusivities. We applied our new method to the previously measured data and significantly improved the accuracy of evaluated diffusivities. Automatic repeated measurements of responses to pressure steps are further improving the accuracy of evaluated diffusivities. Moreover a new experimental set-up allowing a much better quality of evaluated diffusivities is proposed.

## Vývoj zařízení pro kombinatorickou přípravu polymerních částic

Bc. Vojtěch Klimša (M1)

školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Na dnešním trhu je celá řada dostupných biopolymerů použitelných k enkapsulaci aktivních látek se zajímavými vlastnostmi pro farmaceutický průmysl, avšak současná praxe se mnohdy omezuje na použití pouze jednoho polymeru v rámci jednoho produktu. Tato práce se zabývá vývojem zařízení pro přípravu polymerních částic složených ze dvou, či více polymerů, které plní jak funkci ochrannou – zabraňují oxidaci aktivních látek uložených uvnitř částic, tak funkci pomocnou – stabilizují výslednou disperzi, či zabraňují precipitaci aktivní látky v roztoku. Zařízení by mělo být zcela automatizované, jediný úkol operátora by byl pouze v daných intervalech odebírat hotový produkt. Dále by zařízení mělo být schopno vytvořit částice, které mají předem určené zastoupení vybraných polymerů. Takto připravené série částic by se měly podrobovat dalšímu výzkumu, jenž by určil správný poměr mezi polymery, aby bylo dosaženo požadovaných vlastností částic. Jako výchozí metoda pro tvorbu částic bylo zvoleno rozprašovací sušení v kombinaci s počítačem řízenými pumpami a inertní smyčkou. Na takto upravené rozprašovací sušárně byla dále provedena parametrická studie zkoumající vliv průtoků složek a prodlevy mezi změnou průtoků na výslednou kvalitu částic.

## Modelování a analýza struktury anizotropních pěn

Bc. Jiří Kolář (M2)

školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Anizotropie se vyskytuje především u polymerních pěn, které se vyrábějí volným litím a následným vypěněním bez externích zásahů. Tento postup se používá například při přípravě polyuretanových (PU) pěn. Výsledná strukturní nepravidelnost ve směru rozpínání není příliš velká, u běžné PU pěny poměr dvou na sebe kolmých rozměrů polymerní buňky typicky nabývá hodnot 1.2-1.6. Tato anizotropie ale stále významně ovlivňuje závislost mechanických, tepelně a zvukově izolačních vlastností pěny na směru. Pro predikci těchto vlastností je nutné nejprve vytvořit počítačový model struktury pěny. Modelování anizotropních pěn je v současnosti výzvou, protože dosud vyvinuté algoritmy nedokáží zaručit, aby vygenerovaná pěna tvořila anizotropní strukturu v jednom směru a zároveň ve všech směrech splňovala Plateauovy zákony. Obvykle používané metody rozdělování prostoru, jako je například Laguerrova tessellace, umí vytvořit nepravidelnou náhodnou strukturu, která však není anizotropně preferenčně orientovaná do jednoho směru. V této práci bylo vyzkoušeno několik různých přístupů k modelování anizotropních struktur a následně byly tyto přístupy ohodnoceny dle jejich vhodnosti a věrohodnosti v porovnání s reálnou morfologií polyurethanových pěn.

## Synthesis of conductive porous materials based on polyaniline by controlled assembly of nanoparticles

Jakub Kovačovič (B3)

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

Polyaniline, usually doped with acid molecules, is a tempting polymer because of its optical and exceptional mechanical properties. This work deals with synthesis of conductive porous materials based on polyaniline by controlled assembly of non-conductive polystyrene nanoparticles coated by conductive polymer. Polymerization occurs at isothermal conditions in a stirred reactor. Effect of operating conditions, such as stirring speed and concentrations of aniline and polymers was systematically studied. The size of synthesized aggregates composed of polystyrene nanoparticles coated with a conductive polymer shell was measured by static light scattering, while the thickness of conductive polymer shell and morphology of formed aggregates was characterized by scanning electron microscope. Obtained results show a strong impact of stirring speed on the size of aggregates, while ratio of polystyrene nanoparticles to polyaniline is a key factor for the morphology of conductive polymer shell. Gained knowledge can find application in the separation of various molecules or in the synthesis of smart textiles.

## Semikrystalické polymery: Bobtnání a sorpce v kapalných penetrantech a jejich směsích

Bc. Lenka Krajáková (M2)

školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Polyetylen (PE) a polypropylen (PP) se spolu s jejich kopolymery řadí na první příčky synteticky vyráběných polymerů. A to hlavně díky jejich nepřebernému množství aplikací a nízké ceně. Kromě radikálové polymerace se polyolefiny vyrábějí katalytickou polymerací, která může být realizována v kapalně fázi (tzv. slurry polymerace) nebo v plynné fázi (plynně disperzní polymerace). Sorpční rovnováhy reaktantů a přítomných rozpouštědel v polyolefinech ovlivňují nejen reakční rychlost, ale jsou také důležité při následném zpracování produktu. Znalost rozpustností a transportních vlastností monomerů v polyolefinech je tedy nezbytná pro optimalizaci těchto procesů. Moje práce se zaměřuje na experimentální měření rozpustností kapalných penetrantů v polyolefinech (sorpční experimenty) a dále na bobtnací experimenty v kapalině, při kterých se zjišťuje nabobtnalý objem polymerní částice, jež má vliv na difuzní dráhu monomeru v průběhu polymerace. Pro systém polymer-kapalina se jedná o nově vyvinuté metody měření termodynamického chování polyolefinů. Mým cílem je posunout tato měření ještě dál a zavést nové metody pro měření třífázových systémů polymer-kapalina-plyn (např. PE-hexan-ethylen), jež jsou z pohledu „slurry“ polymerací ještě atraktivnější.

## Iontově-výměnné systémy pro zakoncentrování nabitých molekul a biomolekul

Bc. Dominik Kralík (M1)

školitel: Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.

Tento příspěvek je věnován vývoji elektrokinetického mikrofluidního separátoru, který využívá vlastností iontově-výměnných membrán a jejich chování v elektrickém poli. V představovaném systému je stejnosměrné elektrické pole připojené na dvě kationtově-výměnné membrány zapojené v sérii. Profil elektrického pole je díky přítomnosti dvou membrán nelineární. Toto nehomogenní elektrické pole umožňuje separovat vzorky bez nutnosti použití gelu a lokálně zvyšovat koncentraci (tzv. zakoncentrovat) určité složky vzorku pro zjednodušení možnosti detekce. Následně je tato práce věnována optimalizaci podmínek zakoncentrování roztoku fluoresceinu. Roztoky fluoresceinu nám slouží k ověření funkčnosti vyvinutého čipu, jelikož se fluorescein hojně využívá jako barvicí značka určitých biomolekul, například systému antigen-protilátka. Po ověření je možné použít vyvinutý systém na separaci složitějších vzorků. V poslední části tohoto příspěvku bude v krátkosti představen mikrofluidní čip využívající iontově-výměnné částice určený pro separaci fluorescenčně značeného systému antigen-protilátka a budou prodiskutovány prvotní výsledky dosažené s tímto systémem.

## Návrh a konstrukce aparatury pro identifikaci azeotropických vícesložkových směsí

Bc. Filip Králík (M1)

školitel: Ing. Jan Haidl, Ph.D.

Pri návrhu destilačných zariadení pre delenie dvojzložkových, prípadne viaczložkových zmesí je nevyhnutné určiť, či delená zmes tvorí alebo netvorí azeotrop, pretože jeho existencia predstavuje významné obmedzenie pre možnosť rozdelenia pomocou opakovanej, či stupňovej destilácie. Pri vare azeotropných zmesí vznikajú pary s rovnakým zložením ako má vriaca kvapalina. Táto skutočnosť sa využíva pri identifikácii azeotropu pomocou metódy viacposchodovej destilácie. Podstatou tejto metódy je stanovenie závislosti zloženia destilátu na zložení destilačného zvyšku. Existencia azeotropu je potvrdená v prípade, že pre dve rôzne zloženia destilačného zvyšku je zloženie destilátu totožné. Cieľom tejto práce je návrh a následná konštrukcia vysokoúčinnnej poschodovej destilačnej kolóny. Hlavným kvantifikovaným parametrom je účinnosť poschodia, ktorá bude kvalitatívne stanovená prostredníctvom modelovej zmesi metanol-n-propanol.

## Modelovanie utvárania morfológie polyuretánových pien

Bc. Iveta Kršková (M1)

školiteľ: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Polyuretánové (PU) peny hrajú dôležitú úlohu nielen tým, že robia náš život komfortnejším a bezpečnejším, ale aj znižujú finančné náklady a podieľajú sa na zachovávaní prírodných zdrojov planéty. Ich využitie je v podstate nekonečné: počínajúc malými položkami v domácnostiach až po veľké zvukotesné či tepelno-izolačné systémy. Vlastnosti týchto produktov sú dané predovšetkým ich vnútornou štruktúrou. V našej práci sme pripravili model popisujúci vznik morfológie pien – pokles hustoty peny, rast ciel a utváranie stien a strutov pri styku dvoch respektíve troch ciel. Rast ciel je spôsobený difúziou vypeňovacích činidiel z kvapalnej fázy do bublin. Na formovanie stien a strutov majú potom vplyv predovšetkým dva javy. Prvým z nich je rast ciel, ktorý spôsobuje predlžovanie stien a zmenšovanie strutov. A druhým sú kapilárne sily naopak vytvárajúce podtlak v strutoch a vyvolávajúce tak vytekanie polyméru zo stien do strutov. Matematický model vychádza z lubrikačnej teórie toku tekutín a zahrňuje aj popis vývoja fyzikálnych vlastností ako je zvyšovanie viskozity behom vypeňovania. Tento model nám umožňuje sledovať časový vývoj profilu steny cely a tvaru strutu a ďalej študovať fyzikálne javy prebiehajúce pri vypeňovaní a zodpovedné za konečnú morfológiu pien.

## Collision behaviour of polyethylene particles: Experimental and modeling study

Jarmila Kučerová (B3)

školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Predicting particle collision behaviour is a challenging problem, as there is only limited knowledge of dissipative parameters in many particulate systems. The understanding of contact mechanics is important especially in industrial systems. Particle behaviour during impact depends strongly on particle elasticity, which is related to the dissipated energy. As a measure of elasticity, we use the restitution coefficient (the ratio of velocity after and before collision). In our work, the restitution coefficients of polyethylene (PE) particles were experimentally determined. Then we developed a mathematical model that enabled us to predict the restitution coefficients of PE particles of a general shape under various conditions. We used high-speed camera to monitor the velocity of particles during collisions with a metal plate. The data measured for almost circular particles were used to fit parameters in our model. Such a model enabled us to predict restitution coefficients even for non-circular particles. Our results provide important information about energy dissipation during collision and show that the collision behaviour of particles depends significantly on particle shape. Such observation should be accounted for in models involving particle agglomeration and wall-sheeting.

## Studium reologie emulzí pomocí optimalizovaného modelu Disipativní částicové dynamiky

Bc. Pavel Kupka (M2)

školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Práce je zaměřena na studium emulzních systémů, což jsou systémy dvou a více nemísitelných kapalin, přičemž dispergovaná fáze má podobu sub-mikronových částic. Tyto systémy nacházejí zastoupení u mnoha dnes oblíbených produktů jako např. farmaceutické výrobky, potraviny a plastické hmoty. Konečné vlastnosti těchto produktů ovlivňují procesy, odehrávající se na velice malých prostorových a časových měřítcích (tzv. meso-měřítko) a ani dnes není možné experimentálně všechny vlastnosti měřit. V důsledku toho stále chybí úplný popis těchto čteně se vyskytujících systémů a nejsme schopni plně predikovat jejich chování. Z výše uvedených důvodů jsme přistoupili k problematice emulzních systémů pomocí počítačového modelování, konkrétně využíváme simulační metodu zvanou Disipativní částicová dynamika (DPD). V rámci této práce byla metoda DPD optimalizována a pro výpočty lze nyní používat grafického akcelérátoru. Toto úsilí vedlo k výraznému zvýšení počtu simulovaných částic v doméně. V souvislosti s tímto bylo také zapotřebí vytvořit novou metodu pro inicializaci simulace. Dále byla metoda DPD rozšířena pro 3D simulace a je schopna vyhodnocovat reologické chování kapek ve stříhovém poli pomocí tlakového tensoru, díky němuž jsme schopni vyhodnotit i složitější, neneutonské chování kapalin.

## Chování iontově-výměnných membrán v nadlimitní oblasti

Bc. Nazerke Kurospayeva (M1)

školitel: Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.

Heterogeneous ion-exchange membranes are widely used in electroseparation processes such as electrodialysis or electrodeionization. They provide selectivity towards the transport of charged ionic species in electrolytes by means of electrostatic interactions between the charge bound on/in the membrane and the mobile ions in the electrolytes. We investigate electrochemical characteristics of heterogeneous ion-exchange membranes by measuring current-voltage and chronoamperometric curves. The current-voltage curves of ion-exchange membranes bear a typical shape with three regions (under-limiting, limiting, over-limiting). In the over-limiting region, we observed formation of vortex on a cation-exchange membrane and water splitting on an anion-exchange membrane. In the next stage of the project we focus on pH changes occurring around ion-exchange membrane due to water-splitting reaction. We quantify the pH changes by measuring pH of the corresponding solutions before after performing chronoamperometric experiments. The obtained results will help us in understanding of the behavior of the membranes in the over-limiting region.

## Katalyzátor se zeolitickou membránou pro přednostní oxidaci CO v přítomnosti propanu

Bc. Patrik Labík (M2)

školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

V chemickém průmyslu se stále častěji uplatňují separační procesy integrované do chemických reaktorů pro dosažení vyšších konverzí a selektivit. Jednou z nejatraktivnějších separačních metod je využití selektivních membrán. V této oblasti získaly v posledním desetiletí značnou pozornost zeolity, které mají pravidelnou strukturu s přesně definovanou velikostí vnitřních pórů o rozměru v řádu desetin nanometru. Krystal zeolitu je schopen selektivně propouštět pouze molekuly menší než průměr pórů, nicméně připravit dokonale kompaktní zeolitickou vrstvu je velmi obtížné. V této práci byl použit zeolit s označením 4A, jehož póry mají průměr okolo 0,4 nm. Byla připravena řada tenkých zeolitických vrstev pokrývajících Pd/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> katalyzátor s cílem zablokovat transportu propanu a větších uhlovodíků a současně umožnit difuzi CO a kyslíku tak, aby docházelo k přednostní oxidaci CO – tento krok žádoucí při organických syntézách, například výrobě anhydridů. I přes částečné popraskání membrány vzorky při testech v laboratorním reaktoru vykazovaly zvýšenou selektivitu pro oxidaci CO v porovnání se samotným Pd/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> katalyzátorem. Výsledky experimentů byly doplněny simulační studií, mapující vliv difuzivity a tloušťky zeolitické vrstvy na funkci katalyzátoru.

## Studie elektrolytů založených na alkalických hydroxidech pro použití v zinko-vzduchových palivových článcích

Bc. Ondřej Libánský (M1)

školitel: Ing. Jaromír Pociďč, Ph.D.

Regenerativní zinko-vzduchové palivové články patří díky vysoké energetické hustotě, bezpečnosti a ceně zinkového paliva k velmi perspektivním kandidátům pro akumulaci elektrické energie. Nedílnou součástí těchto zařízení je elektrolyt, který má zcela zásadní vliv na samovybíjení, vnitřní odpor článku a další parametry. Zkoumané palivové články využívají jako elektrolyt tradičně, bez větší diskuze, koncentrované roztoky hydroxidu draselného. Tato práce si klade za cíl komplexní srovnání vlastností nejběžnějších alkalických hydroxidů (LiOH, NaOH, KOH) v širokém rozmezí koncentrací. Studovanými vlastnostmi byly: koroze zinku, rovnovážná rozpustnost oxidu zinečnatého, vodivost elektrolytů čistých i nasycených oxidem zinečnatým a přepětí vodíku na sběrači proudu palivového článku. Kromě samotných experimentálních stanovení byl vyvinut jednoduchý model rozpouštění oxidu zinečnatého umožňující odhad vodivosti elektrolytu v závislosti na rozpuštěném množství ZnO a metodika stanovení složení elektrolytu určená pro budoucí provozní analýzy. Výsledky práce ukazují vliv koncentrace a složení alkalického hydroxidu na studované vlastnosti a zároveň lze na jejich základě navrhnout optimalizace složení elektrolytu pro vyvíjený laboratorní palivový článek.

## Transportní charakteristiky strukturované výplně Mellapak 452Y změřené při destilaci systému cyklohexan/n-heptan v koloně o průměru 300 mm

Bc. Eliška Lyko Vachková (M1)

školitel: Ing. František Rejl, Ph.D.

V této práci byla v rámci testování nové destilační kolony o vnitřním průměru 300 mm změřena hydraulická a transportní data ocelové strukturované výplně Mellapak 452Y firmy Sulzer. Byla měřena výška výplně ekvivalentní teoretickému patru (*HETP*) a tlaková ztráta plněného lože při destilaci organické směsi cyklohexan/n-heptan za atmosférického tlaku. Získaná data byla porovnána s daty dříve naměřenými na destilační koloně o průměru 150 mm za stejných podmínek. Obecně se předpokládá, že transportní charakteristiky a hydraulické vlastnosti výplně závisí na průměru destilační kolony. Získané výsledky však ukazují vynikající shodu mezi hydraulickými daty změřenými na obou kolonách. Závislost *HETP* na zatížení kolony vykazuje pro obě kolony poněkud odlišný tvar, průměrná hodnota *HETP* se však liší jen o 2,8 %. Před provedením pokusů bylo nutno kolonu a potrubní větve zaizolovat tepelnou izolací Kaiflex. Díky nízkým tepelným ztrátám mohla být provedením entalpických bilancí vyčíslena výkonová charakteristika vařáku a předehevu refluxu a nalezena její nespojitost. Data budou použita k identifikaci chybných zapojení a usnadnění nápravy stavu dodavatelem.

## Separace směsi barviv pomocí gelové elektroforézy na mikrofluidním čipu

Bc. Karel Mařík (M1)

školitel: Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.

Mikrofluidika je odvětví chemického inženýrství zabývající se tokem a manipulací tekutin v kanálcích s mikro- až milimetrovými charakteristickými rozměry. Jednou z nejatraktivnějších aplikací mikrofluidiky jsou tzv. laboratoře na čipu. Jedná se o zařízení integrující jeden nebo více analytických postupů na plochu v řádu jednotek centimetrů čtverečních. Tyto systémy nacházejí uplatnění zejména v tzv. „point-of-care“ diagnostice, to znamená diagnostice na místě u pacienta. Zkonstruování plně funkčních zařízení tohoto typu by v budoucnu jistě znamenalo doslova revoluci v diagnostice a léčbě většiny nemocí. Ideální laboratoře na čipu by měly plně automaticky analyzovat předem neupravený biologický vzorek – např. krev. Tyto vzorky jsou však velmi složité a obsahují jen malé koncentrace hledaného analytu. Jednou z největších překážek je technologické zvládnutí prvotní separace vzorku na čipu sloužící ke zjednodušení směsi pro další kroky analýzy. Pro tyto účely by mohla sloužit separační technika gelové elektroforézy. Předmětem předkládané práce je vývoj funkčního mikrofluidního systému pro provádění gelové elektroforézy v kanálku. V příspěvku jsou představeny dva systémy pro provádění gelové elektroforézy na čipu a popsány výsledky separací s modelovou směsí záporně nabitých barviv.

## Morphology evolution of microcellular polymeric foams

Bc. Maria Minichová (M1)

školicel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

The actual worldwide trend is to minimize the consumption of materials and energy. Preparation of the microcellular polymeric foams (with the cell size in a range of micrometres) not only enhances the foam physical properties but also saves material and energy. The theoretical knowledge of the correlation between properties of foams and their internal structure enables us to produce them with superior properties. This creates two complex tasks: i) finding a suitable method for the preparation of various structures, and ii) mathematically describing the morphology evolution. The thermally induced phase separation (TIPS) fulfils the possibility to form various structures. In this work we modified a device for TIPS and were able for the first time to determine the time-scale of TIPS for the polystyrene–cyclohexane and polystyrene–cyclohexanol systems. We investigated the morphology evolution of the final structure in dependence on the cooling rate by SEM imaging of samples. The knowledge of the TIPS thermodynamics is fundamental. Therefore, a part of this work is also focused on the mathematical modelling of binodals and spinodals in systems which show an application potential and have not been studied experimentally yet, but will be experimentally studied by us in the near future.

## Nanostandardy a reálné nanočástice - porovnání metod pro určení rozložení velikosti

Bc. Jan Mokřý (M1)

školitel: Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D.

Přesně popsat distribuci velikostí nanočástic je jedna ze základních nutností při charakterizaci koloidního roztoku. Asi nejpoužívanější metoda, dynamický rozptyl světla (DLS), implementovaná v naší laboratoři v podobě přístrojů Malvern Zetasizer Nano ZS a Microtrac NANO-flex byla v této práci porovnávána s novější metodou, analýzou trajektorie nanočástic (NTA) v podobě přístroje NanoSight NS300. Tyto přístroje byly použity k měření jak polystyrenových standardů o velikostech desítek až stovek nanometrů (a jejich vybraných binárních směsí), tak reálných vzorků liposomů. Byl porovnáván rozsah měřitelných velikostí částic, rozsah měřitelných koncentrací, schopnost měření monodisperzních a polydisperzních vzorků a uživatelská přívětivost přístrojů. Metoda DLS vykazovala větší měřicí rozsah jak pro koncentrace, tak pro velikosti, ale měla nižší rozlišení při měření binárních směsí nanostandardů. Metoda NTA zase vyžaduje náročnější přípravu vzorků, výsledky více závisely na parametrech nastavených operátorem a jejich získání může být časově náročné. Výsledky z obou metod byly na závěr konfrontovány s distribucemi velikostí získanými analýzou snímků z TEM.

## Reactions in vanadium redox flow batteries – carbon felt electrodes

Bc. Jindřich Mrlík (M1)

školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Vanadové redoxní průtočné baterie jsou efektivní a bezpečnou elektrochemickou alternativou stacionárního ukládání elektrické energie pro zajištění rovnováhy mezi produkcí a spotřebou elektrické energie během dne. Konverze energie probíhá při elektrochemických reakcích vanadových iontů na inertních elektrodách v bateriovém svazku, skrz který jsou čerpány elektrolyty skladované v externích nádržích. Použití uhlíkové plsti jako elektrodového materiálu je dáno její dobrou elektrickou vodivostí, chemickou a elektrochemickou stabilitou a cenovou dostupností. Tepelná úprava je obvyklým způsobem vylepšení elektrokatalytické aktivity plsti, díky níž je možné významně snížit velikost i výrobní náklady svazku. Její optimální podmínky jsou však specifické pro každý typ, ba dokonce výrobní řady plsti. V rámci mé předchozí práce byly nalezeny optimální podmínky teplotní úpravy pro dvě morfologicky odlišné uhlíkové plsti pro použití v baterii. Cílem této práce je ověření elektrochemických vlastností upravených plstí v laboratorním monočlanku s komerčním elektrolytem pomocí impedanční spektroskopie, měřením zátěžových křivek a nabíjecích-vybíjecích cyklů a studium střednědobé životnosti optimálně upravené plsti při cyklickém zatěžování baterie, včetně identifikace hlavních degradačních faktorů.

## *In situ* amorphization of active pharmaceutical ingredients using microwave irradiation

Bc. Jakub Mužík (M1)

školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Nowadays, one of the key issue in pharmaceutical engineering is transforming crystal state of the active pharmaceutical ingredients (API) into amorphous one (by the nature unstable form), which has higher solubility due to the absence of crystal lattice. Amorphous API in dosage form must be stable for at least shelf life of drug product (usually 2 - 3 years). Wet and dry granulation or direct tableting can be used to create dosage form containing crystal form of API and its amorphous form is than fabricated in situ “on demand” by end user using microwave radiation (MW). In this study, the proof of concept on tablets composed from (i) Ibuprofen as a model drug and (ii) AVICEL as excipient is presented. To create in situ amorphous ibuprofen, standard microwave oven was used. Its heating properties were investigated and characterized (e.g. spatial distribution of microwave heating). The microwave power input and the composition of the tablets (Avicel/Ibuprofene) was tested with respect to reaching the melting point. The change of crystalline structure due to MW heating was evaluated by x-ray diffraction (XRD) and different scanning calorimetry (DSC). The dissolution profiles of both MW untreated and treated tablets were measured by time-dependent UV/vis spectrophotometry.

## Tlakové ztráty v katalytických filtrech pevných částic

Jan Němec (B3)

školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Výfukové plyny obsahují mikroskopické částice sazí, na jejichž povrchu mohou být navázány další škodlivé látky, jako např. nespálené zbytky paliva, polycyklické uhlovodíky nebo sírany. Množství sazí je proto regulováno emisními normami. Filtry pevných částic jsou dnes nepostradatelnou součástí všech dieselových motorů a v současné době se uvažuje o jejich rozšíření také do motorů benzinových. Toto zařízení však představuje překážku ve výfukovém potrubí, která způsobuje tlakovou ztrátu a snižuje účinnost motoru. Tlaková ztráta je sledovaným parametrem především moderních katalytických filtrů pevných částic, které mají uvnitř porézní struktury nanesen katalyzátor – zde je nutné nalézt optimum mezi nízkou tlakovou ztrátou, vysokou filtrační účinností a katalytickou aktivitou. Tato práce studuje vliv přítomnosti katalyzátoru na velikost vznikající tlakové ztráty ve filtrech z oxidové keramiky ( $\text{Al}_2\text{TiO}_5$ ), a to buď prázdných, nebo obsahujících katalyzátor pro selektivní redukci oxidů dusíku (Cu-zeolit). Vyříznuté vzorky filtrů byly vloženy do reaktoru, zaizolovány a tlaková ztráta byla stanovena pomocí diferenčního manometru při sérii průtoků.

## Kompozity na bázi uhlík-polymer pro redoxní průtočné baterie

Bc. Martin Pecha (M1)

školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Trend využívání elektrické energie z obnovitelných zdrojů neustále roste. Tato elektrická revoluce je úzce podmíněna otázkou skladování energie. Řešení v podobě stacionárních uložišť by mohly poskytnout redoxní průtočné baterie (RFB). RFB se dostávají do popředí díky bezpečné technologii s vysokou účinností a životností. Jednoduchý atraktivní design, umožňující nastavit si kapacitu a výkon dle vlastních požadavků, představuje potenciál pro komerční využití. Vytvoření atraktivního designu umožňují vysoce vodivé kompozitní bipolární desky. Díky nim lze vodivě spojit jednotlivé články v baterii do série, čímž se výrazně zjednoduší a zmenší její výsledný rozměr. Jako kompozit s největším potenciálem se nabízí bipolární deska na bázi uhlík-polymer (CBP), který poskytuje dostatečně vysokou vodivost, mechanickou a chemickou odolnost. Největší výzvu u CBP představuje optimalizace výrobních nákladů s uchováním požadovaných vlastností. Složení a struktura CBP (např. tvar, velikost nebo orientace uhlíkových částic) zde hraje významnou roli. Tato práce se zabývá vlivem výrobní technologie na elektrické vlastnosti CBP. Práce je také věnována vlivu morfologie CBP na přechodové odpory mezi CBP a uhlíkovou plstí, kde dochází k výrazným ztrátám v baterii.

## Dvojité zapálení katalytické oxidace CO na automobilovém katalyzátoru

Bc. Rudolf Pečinka (M1)

školitel: Doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Obavy společnosti z globálního oteplování a nežádoucího dopadu škodlivin obsažených ve výfukových plynech na lidské zdraví vedou ke zpřísnění emisních norem. Z tohoto důvodu jsou ve výfukovém potrubí automobilů uloženy katalytické konvertory. Tato studie se zabývá nežádoucím jevem pozorovaným při ohřevu automobilového katalyzátoru typu Pt/ $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> po studeném startu, kdy se rozbíhají jednotlivé reakce jako oxidace CO, oxidace uhlovodíků a redukce NO<sub>x</sub>. Při něm v určitém momentu může dojít ke zpomalení oxidace CO, takže jeho konverze s rostoucí teplotou dočasně klesá. Pro objasnění tohoto neobvyklého jevu byla navržena a změřena sada experimentů v laboratorním reaktoru s lineárním růstem provozní teploty, prokládaným periodami s konstantní teplotou. Byl studován také vliv přítomnosti dalších složek ve směsi. Na základě naměřených dat byl odvozen reakční mechanismus vedoucí k pozorovanému jevu. Dočasný pokles konverze CO je neustálený proces, který se rozvíjí při teplotě počínajících reakcí uhlovodíků. Meziprodukty neúplné oxidace uhlovodíků postupně zaplňují katalyticky aktivní centra, čímž inhibují oxidaci CO. Při dalším zvýšení teploty dojde k úplné oxidaci uhlovodíkových meziproduktů, uvolnění katalytických center a opětovnému nárůstu konverze CO.

## Odhad hydrodynamických parametrů segmentovaného toku pomocí impedanční spektroskopie

Bc. Petr Polezhaev (M2)

školitel: Ing. Jiří Lindner, Ph.D.

Práce se zabývá charakterizací segmentovaného toku roztok KCl/kerosin v mikrofluidním čipu pomocí elektrochemické impedanční spektroskopie. Charakterizace pomocí EIS má celou řadu výhod oproti jiným metodám (optickým, akustickým a radiologickým) jako např. možnost měření i v čípech z neprůhledných materiálů. Snahou práce bylo rozšířit naše stávající možnosti charakterizace segmentovaného toku o určení tloušťky mezní kapalně vrstvy  $\delta$  (mezi kapkou dispergované fáze a stěnou mikrokanálku). Přesné experimentální určení  $\delta$  slouží k vylepšení matematických modelů pro rozložení teplotních a koncentračních profilů v mikrofluidním čipu a umožňuje tak přesnější popis reakčně-transportních dějů v něm. Experimentální data byla interpretována a aproximována s použitím modelu ekvivalentního elektrického obvodu. Parametry modelových rovnic byly určeny nelineární regresí ve smyslu nejmenších čtverců. Z takto určených parametrů modelu byla vypočtena tloušťka mezní vrstvy  $\delta$ , jež byla ve velmi dobré shodě s orientačním výpočtem z hydrodynamické korelace z literatury (relativní odchylka jen 2 %). Použitá metoda charakterizace se tak jeví jako perspektivní. Vzhledem ke složité interpretaci dat, bude nutné dodatečně ověřit výsledek pomocí obrazové analýzy a zjistit míru reprodukovatelnosti experimentu.

## Křivka zapálení a zhášení biochemické reakce v enzymovém palivovém článku

Bc. Ksenia Ponomareva (M2)

školitel: Ing. Lenka Schreiberová, CSc.

Tato práce je zaměřená na studium nelineární dynamiky odezvy enzymového palivového článku na základě enzymatické reakce oxidace glukózy ferrikyanidem draselným jako druhým substrátem v přítomnosti enzymu glukózaoxidázy. Roztok hydroxidu sodného je k dané enzymatické reakci přiváděn jako negativní zpětná vazba. Průběh reakce je sledován v průtočném míchaném reaktoru pomocí měření pH reakční směsi. Daný systém simuluje podmínky průtočného enzymového palivového článku. Křivka zapálení a zhášení sledované enzymatické reakce byla nalezena experimentálně pomocí metody pomalé lineární změny průtočné rychlosti s časem ve směru snížení rychlosti k minimu a v opačném směru. Výsledkem je nalezení oblasti parametrického prostoru, která odpovídá bistabilitě. Matematickým modelováním pomocí dvou-parametrické kontinuace v rovině parametrů koncentrace hydroxidu sodného – průtočná rychlost byla nalezena oblast bistability. Výsledný bifurkační diagram předpovídá širší oblast bistability než jaká byla nalezena v experimentech. Přeskok při zapálení biochemické reakce v enzymovém palivovém článku při pohybu podél křivky zapálení a zhášení se snižující se hodnotou průtočné rychlosti vede ke zvýšení konverze reakce, tedy ke zvýšení proudové odezvy enzymového palivového článku při současné úspoře paliva

## Výpočet zpětné difuze, osmotického toku a transferu vody v solvatačním obalu solí pro iontovýměnné membrány v průběhu elektrodialýzy

Michal Říha (B2)

školitel: Dr. Ing. Pavlína Basařová

Cílem studie byl výpočet množství vody přenesené v solvatačním obalu solí, osmotického toku a zpětného difuzního toku, v průběhu elektrodialýzy. Roztok NaCl byl čištěn za pomoci elektrodialyzační cely obsahující pět párů iontovýměnných membrán. V systému byly měřeny vodivosti vzniklého koncentrátu i diulátu, a z nich byly vypočteny požadované veličiny. Bylo zjištěno, že vypočtené veličiny se mezi sebou řádově liší. Zatímco celkový přechod vody přes membrány v solvatačních obalech  $\text{Na}^+$  a  $\text{Cl}^-$  se pohybuje okolo  $0,0289 \text{ ml.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$ , u zpětné difuze je dosahováno průtoku o řád většího, okolo  $0,27 \text{ ml.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$ , a u toku osmotického jde již o tok o dva řády vyšší, než u solvatačních obalů ( $1,9 \text{ ml.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$ ). Záleží však na tloušce vzorků. Aby se data získaná z různých membrán dala porovnat, zavedli jsme pro zpětnou difuzi i osmotický tok permeační koeficienty, které lépe vypovídají o kvalitě materiálu. Hodnoty permeačních koeficientů solí v případě zpětné difuze jsou u obou membrán skoro identické, zatím co hodnoty osmotických permeačních koeficientů se liší výrazně.

## Modelování hoření pevných materiálů

Bc. Vojtěch Šálek (M1)

školitel: doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

Práce se zabývá modelováním šíření tepla a následným hořením pevných látek, jakožto nástrojem požárního inženýrství vedoucím ke snížení počtu finančně nákladných a neefektivních požárních zkoušek. Zaměřuje se na možnosti zadávání vstupních parametrů modelu, jejichž hodnoty jsou často obtížně dohledatelné, neodpovídající modelu, nebo nedostupné a jedinou možností je jejich experimentální zjištění. Pomocí programu FDS (Fire Dynamic Simulator) je modelováno zahřátí a následné hoření polypropylenu na základě experimentálně naměřených dat, která jsou doplněná o parametry zjištěné z literatury. Model odpovídá případu, kdy se požár šíří z hořícího vozidla na přední nárazník čelně stojícího automobilu. Tento model lze analogicky aplikovat na další materiály a obdobné případy, kde dochází šířením tepla k zapálení okolních objektů.

## Low-field NMR for analysing polymer phases and dynamic sorption processes

Bc. Patrik Schneider (M2)

školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Hetero-phase polymers are industrially important and partially commodity products, but their internal morphology and behaviour of individual phases at different working conditions are still the subject of many research studies. In this work, we focus on the measurement and the evaluation of samples composition, determining the number of components (i.e., phases) and interpretation of the morphology of industrially important hetero-phase polymer samples using a methodology of TD-NMR. We focused primarily on polyethylene (PE) samples. All samples were provided by our industrial partners. Semi-crystalline PE samples were studied not only at laboratory conditions, but also at higher temperatures and during the sorption of organic solvent. Results of this work show the possibility to determine the content of not only the amorphous but also the crystalline phases at the considered conditions. We determined the behaviour of individual phases in a PE sample during the dynamic sorption and phases evolutions at elevated temperatures, and its implication on the final PE properties. The knowledge of the chain dynamic behaviour can serve for the optimization of the manufacturing process and, thus, minimize the production costs and produce polymers with desired properties.

## Vliv podmínek sušení na velikost nanočástic niklu při přípravě katalyzátoru

Adam Sklenář (B3)

školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Porézní materiály nacházejí využití v separačních nebo adsorpčních procesech, katalýze či izolační technice. Ve zmíněných aplikacích hraje nejdůležitější roli charakterizace architektury systému pórů a měrného povrchu. V mé práci se zabývám přípravou katalyzátoru technikou kapilární impregnace dusičnanem niklu a následnou kalcinací doprovázenou tvorbou nanočástic kovu. Nosičem katalyzátoru je mesoporézní  $\text{SiO}_2$ , známé jako SBA-15, která disponuje pravidelně uspořádanými válcovými póry ve stále se opakující struktuře, která připomíná včelí plástve. Výhodou SBA-15 je úzká distribuce velikosti pórů a vysoký měrný povrch. Hlavním cílem práce bylo zkoumat vliv různých podmínek sušení a kalcinace na velikost výsledných krystalů niklu a jejich disperzi v pórech. Krystalizace na povrchu nosiče, nikoliv uvnitř jeho pórů, je nežádoucí. Bylo testováno sušení při pokojové teplotě, při teplotě 100 °C či sušení ve vakuu. Charakterizace byla provedena pomocí fyzisorpce dusíku, rentgenové difrakce (XRD) a transmisní elektronové mikroskopie (TEM).

## Optimization of parameters affecting electrospraying - how to obtain homogeneous layers of nanoparticles?

Bc. Jana Sklenářová (M1)

školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

The electrospraying is one of the methods for the generation and deposition of micro- and nanoparticles used in microelectronic, optoelectronic or storage applications. Unfortunately, the lack of understanding of how measurement conditions affect the morphology of deposited layers prevents the utilization of electrospray in some areas of industry, e. g., in specialties like pharmacy. Thus, the goal of this work is to determine the influence of spraying conditions on the morphology of the deposited layers. In our study, sprayed solutions not involved in any chemical reactions were used with the aim to prepare uniform layers of nanoparticles. Our results show, how the studied parameters affect the mode of spraying, the size of particles and the homogeneity of formed layers. The particles size decreases as the flow rate, humidity of the air and material concentration decreases and depends on optimizing the inter-electrode distance. The experiments indicate that the size of largest particles is decreasing with the distance from the central part of the deposited layers. Our results broaden the understanding of electrospraying process and suggest that the use of proper spraying conditions may help electrospraying to become a suitable candidate method for some industrial applications.

## Příprava katalyzátoru Ni/NiO/SiO<sub>2</sub> pro parní reforming

Bc. Matěj Slavíček (M2)

školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Parní reforming je proces, při kterém při kterém reaguje zemní plyn, případně jiné uhlovodíky, s vodní parou za vzniku oxidu uhelnatého a vodíku. Tato směs pak nachází uplatnění při Fisher-Tropschových syntézách, kdy jsou z ní vyráběny uhlovodíky s delšími řetězci, ale je také možné z ní získat čistý vodík. Tyto reakce probíhají v trubkových reaktorech za přítomnosti katalyzátoru, který tvoří nanočástice niklu nanesené na porézním nosiči. Aktivitu připraveného katalyzátoru ovlivňuje mnoho parametrů – zejména objem a průměr pórů nosiče, velikost, množství a rozmístění kovových nanočástic. Cílem této práce bylo zmapovat vliv podmínek přípravy katalyzátoru na jeho strukturu a funkci. Byla připravena série porézních nosičů na bázi SiO<sub>2</sub> s velikostí pórů od 3,5 do 10 nm, na kterých byla provedena kapilární impregnace roztokem dusičnanu nikelnatého. Různé parametry následného sušení a kalcinace pak ovlivnily velikost a rozmístění nanočástic niklu, měřené pomocí XRD a TEM. Testování katalytické aktivity práškových vzorků probíhalo v laboratorním reaktoru a jejich vzájemné porovnání umožnilo určit klíčové strukturní parametry katalyzátoru a podmínky během jednotlivých kroků přípravy, které vedou k dosažení vysoké aktivity a konverze.

## Vliv diskretizace konvekčních členů VoF-Navier-Stokesových rovnic při simulaci kapilaritou řízených dějů

Jakub Smutek (B2)

školitel: Ing. Martin Isoz

Výpočetní mechanika tekutin (CFD) je stále častěji využívána jako nástroj pro simulace chemicko-inženýrských procesů. Kvalita získaných výsledků je ovlivněna nejenom vlastnostmi fyzikálního modelu, ale do značné míry také využitými matematickými metodami. V této práci budeme modelovat vícefázové děje řízené kapilárními jevy. Konkrétně chování kapky na vodorovném a nakloněném substrátu. Zaměříme se na nalezení ideálního diskretizačního schématu pro konvekční člen v Navier-Stokesových rovnicích rozšířených metodou Volume of Fluid. Ukážeme, že pro simulace kapky na horizontálním substrátu je, z nabídky v softwaru OpenFOAM, nejvhodnější použít schéma Gamma pro advekční člen a schéma interfaceCompression pro kompresivní člen ve VoF rovnici. V případě diskretizace konvekčního členu v Navier-Stokesových rovnicích nebyl prokázán vliv volby diskretizačního schématu na výsledky simulací. Simulace kapky na nakloněném substrátu neodpovídaly experimentům, jelikož se kapka pohybovala příliš rychle. Nicméně jsme našli taková schémata, pro která kapka stéká nejpomaleji. Uvedené výsledky naznačují vhodný postup při volbě diskretizačních schémat pro simulace komplexnějších vícefázových dějů s vlivem kapilárních jevů, například simulace smáčení strukturovaných výplní separačních kolon.

## Vývoj disoluční metody pro depotní suspenze

Erik Sonntag (B3)

školitel: Mgr. Róbert Lehocký

Depotní formulace nacházejí v moderní farmakoterapii stále větší uplatnění. Tento způsob aplikace léčiva do organismu poskytuje řadu výhod - např. nižší výskyt nežádoucích účinků a konstantní plazmatickou koncentraci léčiva v rozmezí terapeutického okna bez výrazných výkyvů, což vede k efektivnější farmakoterapii. Při vývoji generických léčiv a jejich uvedení na trh je nutné provést bioekvivalenční studii na lidech (BES), která je drahá a časově náročná. Z tohoto důvodu je vhodné provádět tuto studii s co největší pravděpodobností úspěchu. Dobrým předpokladem úspěšné BES může být disoluční metoda (*in vitro*), která je v porovnání se studií *in vivo* levná a časově nenáročná. Kvůli velmi malé rozpustnosti některých proléčiv v suspenzi nelze použít klasické disoluční testy, ale je nutné provést časově i finančně náročné studie na zvířatech. Proto je potřeba vyvinout vhodnou *in vitro* disoluční metodu. V této práci se zabýváme vývojem a optimalizací takovéto metody pro konkrétní depotní lékovou formu se špatně rozpustným proléčivem, což zahrnuje: přípravu dané suspenze o různé distribuci velikosti částic na laboratorním mlýnu, vytvoření HPLC metody pro stanovení produktů vzniklých reaktivní enzymatickou disolucí a studium fyzikálně chemických vlastností konkrétního proléčiva.

## CFD simulace vícefázového proudění na nakloněné desce: porovnání smáčivosti různých kapalin

Martin Šourek (B2)

školitel: Ing. Martin Isoz

Vícefázové proudění lze nalézt v široké škále inženýrských aplikací. Tlak na optimalizaci průmyslových výroby tedy motivuje snahu o co nejlepší pochopení vícefázových toků. Jedním z nástrojů umožňujících studium proudění jsou, díky rozvoji numerické matematiky a výpočetní techniky, počítačové simulace. V této práci je představen jeden z možných přístupů k simulaci vícefázového proudění založený na metodě konečných objemů a metodě objemu kapaliny. Dále je představena implementace těchto metod v řešiči interFoam, který je součástí open source softwaru OpenFOAM. Nástroj interFoam je následně využit pro simulaci stékání kapaliny po nakloněné desce. Nejprve byly simulace validovány na, v literatuře dostupných, experimentálních datech a publikovaných výsledcích simulací. Následně byla porovnávána smáčivost dané desky v závislosti na vlastnostech kapaliny a intenzitě proudění. Na základě dostupnosti experimentálních dat a průmyslového významu byly jako testovací kapaliny vybrány: voda, lehké alkoholy, hexan a heptan. Vzhledem k nastavení numerických experimentů lze získané výsledky využít například k odhadu provozních podmínek nutných pro dosažení předepsané smočenosti strukturované výplně danou kapalinou.

## Hystereze při zapálení a zhasnutí katalytických reakcí CO, NO<sub>x</sub> a propenu

Bc. Jiří Štěrba (M1)

školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Z důvodu snížení nežádoucích emisí spalovacích motorů jsou do výfukového potrubí zařazeny automobilové katalyzátory. Účelem těchto katalyzátorů je pomocí chemických reakcí přeměnit škodlivé látky jako oxidy dusíku, oxid uhelnatý nebo nespálené zbytky uhlovodíků na látky zdraví neškodné (CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, N<sub>2</sub>). Cílem této práce bylo porovnat teploty zapálení a zhasnutí katalytických reakcí CO, NO<sub>x</sub> a propenu na oxidačním katalyzátoru typu Pt/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. 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 experimentů byla sledována hystereze, neboli rozdíl mezi teplotou zapálení a zhasnutí katalytických reakcí CO, NO<sub>x</sub> a propenu. Tento jev je zvláště důležitý z hlediska dynamického provozu automobilu zahrnujícího zastávky a také v případě hybridních pohonů, kdy dochází k vypínání spalovacího motoru a chladnutí katalyzátoru. Zatímco u oxidace CO a propenu je hystereze podmíněna exotermicitou reakcí a následným vývojem teplotního profilu v reaktoru, u oxidace NO docházelo k výrazné chemické hysterezi v důsledku citlivosti této reakce na stav katalytických center (Pt versus PtO<sub>x</sub>), který se v průběhu experimentů měnil.

## The influence of surfactants on bubble coalescence

Bc. Lucie Štiková (M2)

školitel: Dr. Ing. Pavlína Basařová

The motivation of this work is to understand how anti-foam additives control the unwanted foam production in multiphase sparged reactors. These compounds counter-act the foam stabilizing effect of surfactants and enhance the rapid bubble coalescence which causes the foam collapse. In this work, the dependency of the coalescence efficiency on the type and concentration of surfactant substances was studied. The experiments were performed on model well-defined systems - in pure water, in NaCl and n-pentanol solutions. Bubbles were generated into a small coalescence cell and their velocity and ability of coalescence were observed. A high speed video camera was used for image acquisition and images were evaluated in Matlab. The experiments with NaCl solution allowed us to demonstrate that the possible impurities in the salt used are negligible. Experiments with n-pentanol proved that it is not possible to determine a unique concentration of surfactant as a transition concentration where the coalescence is suppressed without involvement of other factors such as bubble velocity. Measurements with model and industrial anti-foam agents will follow.

## Využití robotického zařízení EvoBot pro experimentální studium kapek

Bc. Dominik Švára (M1)

školitel: Ing. Jitka Čejková, Ph.D.

Nedávno byla popsána schopnost kapek dekanolu chemotakticky se pohybovat v roztoku dekanoátu sodného po koncentračním gradientu přidaného roztoku soli. V tom samém systému obsahujícím dekanol-dekanoát sodný a sůl bylo dále pozorováno vytváření obrazců při odpařování vody z roztoku dekanoátu. Tvar obrazců a čas, ve kterém se začínají obrazce vytvářet, závisí na velikosti studovaného systému (tzn. objemu roztoku a kapek), množstvím přidané soli a rychlosti odpařování. Samotný systém je pro popis velmi složitý, protože obsahuje jednak sůl a povrchově aktivní látky, které ovlivňují rychlost odpařování rozpouštědla. Dalším faktorem, který ovlivňuje rychlost odpařování je přítomnost okolní vlhkosti vzduchu a teplota. Pro studium systému je zamýšleno využití robotického systému EvoBot vytvořeného v rámci evropského projektu EVOBLISS, který pomáhá s automatizací výše popsaných časově náročných experimentů.

## Preparation tunable porous materials by modifying silica aggregation

Bc. Danylo Trunov (M1)

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

Porous silica has find application in different areas, such as filters, food additive, drug transporting, catalyst and others. The key is the good mechanical stability with tunable pore size distribution and surface area coupled with lightweight structure. In this study, a modified sol-gel process was used to prepare short-range porous silica aggregates with high strength. The process is based on the controlled aggregation of fully destabilized silica nanoparticles under shear conditions in an alkaline environment. To increase mechanical properties of the material, tetraethyl orthosilicate (TEOS) was added during sol-gel process. This process was studied with different size of primary silica nanoparticles to control the pore size distribution and porosity of the aggregates. The resulting materials were characterized using a combination of various techniques, including scanning electron microscopy, static light scattering, mercury porosimetry and nitrogen adsorption. It was found that size of particles is the key parameter for the precise control of pore size distribution while stirring speed and amount of TEOS has strong impact on the size and mechanical stability of the formed aggregates.

## Mechanismus průchodu lipozomů a látky jimi nesené přes kožní bariéru

Bc. Jitka Urbánková (M1)

školitel: Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D.

Liposomy jsou v současné době již používány v kosmetických i dermatologických prostředcích pro svou schopnost zvýšit průnik účinné látky do hlubších vrstev kůže. Dosud však není zcela objasněn mechanismus tohoto působení, zejména pak role velikosti lipozomu a složení lipidové dvojvrstvy na transport účinné látky kůží. Pro objasnění tohoto mechanismu byly připraveny liposomy s jednou fluorescenční látkou kovalentně vázanou v membráně a jinou fluorescenční látkou enkapsulovanou do vnitřku liposomu. Penetrační experiment byl prováděn *in vitro* na prasečích kůžích. Liposomy byly nanесeny na kůži uzavřenou do Franzovy difusní cely a nechány působit po dobu 20 hodin. Potom byly koncentrační profily fluorescenčních látek v kůžích vyhodnocovány pomocí dvou metod: obrazové konfokální mikroskopie a kvantifikační metody tzv. tape strippingu. Dalším cílem této práce bylo prozkoumat možnost urychlení průniku fluorescenční látky do kůže pomocí pulsu magnetického pole. Kůže s nanесenými agregáty liposomů s železnými nanočásticemi byla podrobena působení střídavého magnetického pole. Výsledky byly porovnány s experimenty bez působení magnetu. Zdá se, že magnetické pole může pomoci urychlit prostup látky do kůže.

## Dynamická simulace C<sub>3</sub>/C<sub>4</sub> splitteru

Bc. Ekaterina Volova (M2)

školitel: doc. RNDr. Tomáš Vaněk, CSc.

Práce se zabývá dynamickou simulací kolony nazývané C<sub>3</sub>/C<sub>4</sub> Splitter, která je nedílnou součástí technologického schématu jednotky atmosférické destilace ropy. Tato kolona (C<sub>3</sub>/C<sub>4</sub> Splitter ) slouží pro oddělení C<sub>3</sub> a C<sub>4</sub> uhlovodíků z plynné frakce kolony atmosférické destilace, které se pak dále zpracovávají pro petrochemické účely. Práce si klade za cíl vytvořit funkční simulační model kolony na základě reálných dat (vstupů) a s ohledem na reálné provozní podmínky navrhnout hlavní regulační obvody. Navržené hlavní regulační obvody poté implementovat do vytvořeného funkčního modelu a s využitím dynamických simulací modelovat reálné chování kolony, kdy nominální provozní stav je ovlivňován disturbancemi – reálný provoz nelze považovat za stacionární, ale za tzv. kvazistacionární. Výsledkem této práce bude funkční simulační model, který je schopný simulovat reálné chování kolony, a to nejen při idealizovaném stacionárním stavu, ale právě i v případech, kdy jsou v systému uvažovány i poruchy z vnějšího okolí; typickým příkladem je uvádění do provozu po údržbě, či nové nastavení řídicích veličin. Dílčím výsledkem jsou také získané a odladěné konstanty jednotlivých regulátorů v rámci implementovaných hlavních regulačních obvodů.

## Evaluation of parameters involved in contact charging of polyethylene powders: experimental study

Bc. Matej Vrzáček (M1)

školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

The contact charging of polyethylene (PE) plays a crucial role in not only fluidized-bed reactors but also in the transport and storage of granular PE. However, very few systematic parametric studies have been published. Thus we focused on qualitative and quantitative measurements of contact charging. To characterise contact charging we developed the swing apparatus, where we are able to control various conditions. The effects of temperature and relative humidity were studied and the obtained data were evaluated to fit the condenser model. We observed a strong effect of temperature on the saturation charge of PE particles. The effect of relative humidity on the dynamics of charging was also studied and it was found that a rapid change in the ambient humidity leads to an immediate response to the saturation charge (i.e. the maximum charge at specific conditions). This implies that absorbed water on the surface of material is not the main reason for a strong effect of relative humidity which is in contrast with the literature. Our results of temperature-dependent charging and a new approach to the study of relative humidity effect on charging provide the important data for the industry and also broaden our insight into the charging mechanism.

## Elektrosprejování nanočástic: model depozice a vybíjení vrstev

Bc. Anna Zítková (M2)

školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

V minulých letech došlo k nástupu výrobků s nanočásticemi na spotřební trh. Jejich využití znamenalo silnou konkurenční výhodu, kterou výrazně neovlivnila ani případná vyšší cena. V současnosti se nanočástice objevují ve větším počtu výrobků, je tudíž nutné zabývat se výrobními cenami. Jako jedna z velmi slibných metod pro levné vytváření nanočástic a jejich vrstev se jeví elektrosprej. Toto zařízení využívá jednoduchý princip založený na odpařování rozpouštědla a následné atomizaci díky elektrostatické repulzi. Ač je provoz jednoduchý, levný a efektivní, potýkáme se s obtížným řízením a predikcí morfologie a vlastností vytvářených vrstev. Vyvinuli jsme proto matematický model predikující trajektorii pohybu letící nanočástice krátce před její depozicí a chování již deponovaných nanočástic z bilance působících sil. Výhodou přístupu matematického modelování je možnost posuzovat vliv jednotlivých dějů samostatně. Díky této výhodě jsme se v návaznosti na předešlé výsledky zaměřili na sledování vybíjení vrstev a dynamiku tohoto procesu. Prezентujeme výsledky získané po rozšíření modelu o námi navržený popis vybíjení. Dynamika vybíjení značně ovlivňuje depozici částic. Také morfologie deponované vrstvy má velký vliv na vybíjení. Jedná se tedy o vzájemně propojený komplikovaný systém.

## SPONZOR ÚSTAVU FYZIKY A MĚŘICÍ TECHNIKY



## Test aparatury generující nízkoteplotní plazma pro veterinární účely.

Aleksandra Atanasova (B2)

školitel: Ing. Hana Soušková, Ph. D.

Práce se zabývá testováním mikrobicidních účinků nízkoteplotního plazmatu generovaného v elektrodovém systému hrot–spirála. Testování bylo provedeno na plísniích *Aspergillus oryzae*, *Alternaria alternata*, *Byssochlamys nivea*, *Paccilomyces variotii*, které byly naočkovány na povrchu živného média. Jako zdroj nízkoteplotního plazmatu byly použity kometární výboj a přechodová jiskra, které byly generovány ve výše uvedeném elektrodovém systému. Testování bylo provedeno při různých dobách expozice od jednotek do desítek minut. Bylo zjištěno, že pro některé druhy plísní dochází k poklesu přeživších spor o 3 řády již po 5 minutách expozice plazmatu. Mezi režimem přechodové jiskry a kometárním výbojem nebyly pozorovány z hlediska aplikace významné rozdíly.

## Separace zlatých a křemíkových nanočástic dle velikosti a náboje

Matej Černý (B3)

školitel: RNDr. Galář Pavel, Ph.D.

Cílem mojí práce je separovat nanočástice zlata a křemíku dle jejich velikostí, a to na základě buď jejich tvaru a velikosti, nebo dle jejich povrchového náboje. V prvním případě používám metodu gradientní centrifugace – částice na základě rozdílnosti tvaru a velikosti při centrifugace různě prostupují hustotním gradientem vodného roztoku glycerolu. Pro druhý případ, separaci dle náboje, zkouším využít metodu gelové elektroforézy, jež se v současnosti s úspěchem používá pro separaci DNA a malých organických molekul. Předpokládám, že částice podle svého povrchového náboje poputují ke kladné nebo záporné elektrodě. Takto získané vzorky následně vyhodnocuji pomocí AFM mikroskopu.

## Studium vlastností senzorové platformy KBI2

Bc. Jan Herbst (M2)

školitel: Ing. Ladislav Fišer, Ph.D.

Platformy na CHVS jsou nedílnou a nezbytnou součástí oboru zabývajícího se chemickými senzory. Platformy dříve využívané na Ústavu fyziky a měřicí techniky již dnes nejsou dostupné, jednou z možných náhrad jsou tedy platformy KBI2 komerčně dodávané firmou Tesla Blatná. Tyto platformy nejsou ovšem s těmi dříve používanými identické, je tedy třeba proměřit jejich vlastnosti tak, aby je bylo možné používat při experimentech s CHVS. V rámci této práce byla tedy naměřena statické a dynamické charakteristiky pro napájení topení platformy a její následné ohřívání, pomocí termokamery naměřeno rozložení teplot na povrchu platformy a určení teplotních profilů. Po nanesení aktivní vrstvy bylo dále provedeno měření dynamických vlastností senzoru. Tyto vlastnosti platformy KBI2 byly porovnány s aktuálně používaným senzorovým substrátem. V rámci této práce byla tedy naměřena statické a dynamické charakteristiky pro napájení topení platformy a její následné ohřívání a pomocí termokamery naměřeno rozložení teplot na povrchu platformy, určení teplotních profilů. Po nanesení aktivní vrstvy bylo dále provedeno měření dynamických vlastností senzoru. Tyto vlastnosti platformy KBI2 byly porovnány s aktuálně používaným senzorovým substrátem.

## Příprava samoorganizovaných vrstev ITO pro chemické senzory

Petr Holánek (B3)

školitel: Dr. Mgr. Jana Jirešová

V současnosti roste zájem veřejnosti o sledování škodlivin v ovzduší. QCM senzory se využívají k detekci znečišťujících látek vznikajících ve formě plynů. Pro jejich negativní dopad na životní prostředí jsou QCM senzory užívané jako prevence znečištění. Cílem mé práce je příprava samoorganizovaných vrstev ITO na povrch QCM senzorů a zjišťování citlivosti takto upravených senzorů na znečišťující plyny.

## Porovnání mikrobicidního působení dostupných zdrojů nízkoteplotního plazmatu referenční metodou

Bc. Lucie Kujalová (M1)

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

Cílem této práce bylo porovnat dekontaminační účinnost různých zdrojů nízkoteplotního plazmatu na grampozitivní sporulující bakterii *Bacillus subtilis*. Spory této bakterie byly nanесeny na polykarbonátovou membránu a exponovány nízkoteplotnímu plazmatu různých elektrických výbojů. Účinnost jednotlivých typů výbojů byla vyhodnocována podle počtu přeživších spor. Použitými zdroji nízkoteplotního plazmatu byly kladný a záporný korónový výboj, kometární výboj a přechodová jiskra. Všechny typy výbojů byly testovány jak v otevřené tak v uzavřené aparatuře. V literární části práce jsem se zaměřila na popis jednotlivých elektrických výbojů produkujících nízkoteplotní plazma a na jeho možné mikrobicidní faktory. Dále jsem se zaměřila na informace o použité bakterii, tvorbě jejích spor a na popis převzaté referenční metody pro vyhodnocení dekontaminační účinnosti. Experimentální část zahrnuje nejprve modifikaci a optimalizaci převzaté referenční metody, která je následně použita pro vyhodnocení dekontaminační účinnosti použitých plazmatických výbojů.

## Analytické metody pro analýzu mrtvé vody

Bc. Dominika Mertová (M2)

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

Tento příspěvek je součástí diplomové práce zabývající se účinky plazmatem aktivované vody (tzv. "mrtvé vody") na bakteriální kultury. Cílem samotného příspěvku je vytvoření metodiky pro stanovení jednotlivých komponent mrtvé vody - peroxid vodíku, dusičnany, dusitany a stanovení celkového množství oxidantů ve vzorku; a dále pak provedení těchto analýz včetně porovnání změn v koncentracích zkoumaných komponent v určitém časovém rozmezí.

## Elektronová mikroanalýza kosterních pozůstatků

Anna Petrová (B3)

školitel: Ing. Dušan Kopecký, Ph.D.

Mikroskopická struktura kostní tkáně lidí a zvířat je rozlišitelná. Toho lze využít ve forenzní antropologii, kdy se na místě činu naleznou kosterní pozůstatky a je třeba určit, zda šlo o osobu či zvíře, případně o jaký druh zvířete se jednalo. Tato práce se zabývá vhodnou přípravou vzorku kostní tkáně a nastavením optimálních parametrů skenovacího elektronového mikroskopu Mira 3 LMH, který byl v této práci použit k mikroanalýze kosterních pozůstatků. Sledována byla mikroskopická struktura kostní tkáně hovězí dlouhé kosti a její prvkové složení. Ze získaných poznatků se bude vycházet v bakalářské práci věnující se porovnávání mikrostruktury zvířecích kostí.

## Příprava a charakterizace 3D struktur polypyrrolu

Stanislav Valtera (B3)

školitel: Ing. Kopecká Jitka, Ph.D.

Práce je zaměřena na přípravu polypyrrolu metodou měkké šablony, kterou v tomto případě tvoří azobarvivo Sunset Yellow, běžně používané v potravinářském průmyslu. Vniklý polymer byl následně charakterizován pomocí elektronové mikroskopie a to jak z hlediska prvkového složení, metodou EDX, tak i z hlediska morfologického, metodou SEM. Elektrické vlastnosti polymeru, konkrétně vodivost a její změna v čase, byly měřeny metodou van der Pauw, ve spolupráci s MFF UK.

## Analýza prvkového složení temperových barev pomocí energiově disperzní spektrometrie

Lenka Voltrová (B3)

školitel: Ing. Dušan Kopecký, Ph.D.

Práce se zabývá možností využití energiově disperzní spektrometrie (EDS) pro analýzu malířských barev. Forenzní zkoumání těchto materiálů je velice důležité, jelikož identifikace pigmentů spolu se znalostí jejich historického (popřípadě i zeměpisného) zařazení mohou sloužit k určení autentičnosti obrazů a k odhalení falzifikátů. Pomocí EDS byla provedena elementární analýza 10 temperových barev značky UMTON (běloba titanová, kraplak tmavý, okr červený, kadmium oranžové tmavé, kadmium žluté světlé, smaragdová zeleň, chromoxid ohnivý, kobalt tmavý, ultramarín tmavý, čern kostní). Na základě znalosti výrob těchto pigmentů byla zdůvodněna přítomnost všech prvků. Získaná spektra budou sloužit jako vodítko k odhalení padělků obrazu „Z Korčuly“ českého malíře Václava Špály.

## Impedanční spektroskopie medů

Bc. Lenka Wiesnerová (M2)

školitel: Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.

Cílem práce je rozlišení původu jednodruhových medů impedanční spektroskopií a následně porovnání chování medů při jejich falšování pomocí nejčastěji používaných metod, a to příměsí kukuřičného sirupu, škrobu nebo melasy. Práce spočívá v přípravě vzorků jak čistých medů, tak i medů s přídavkem příměsí, jejich ředění destilovanou vodou v poměru 1:5 hmotnostního poměru a analýza pomocí LCR Metru ve frekvenčním rozsahu 100 Hz až 1 MHz. Výsledky ukazují, že použitou metodou je možné jednotlivé vzorky medů od sebe odlišit, jakožto i detekovat jejich falšování.

SPONZOŘI ÚSTAVU POČÍTAČOVÉ A ŘÍDICÍ TECHNIKY



## Klasifikační a vizualizační metody pro detekci spánkových stádií

Bc. Kristyna Dánová (M1)

školitel: prof. Ing. Aleš Procházka, CSc.

Práce je věnovaná obecné mezioborové oblasti zpracování a analýzy vícekanálových dat, pomocí uživatelského prostředí s aplikací na záznamy dat z polysomnografie. Popis obecných metod spektrální analýzy, diskrétní Fourierovy transformace a číslicové filtrace je následován detekcí vlastností spánku na základě analýzy EEG záznamů v průběhů vybraných spánkových stádií pro detekci jeho nepravidelností. Pro usnadnění nalezení správných vlastností a následné klasifikace, práce obsahuje GUI, ve kterém si uživatel může vybrat různé vstupní informace a předdefinované výpočty vlastností. Navržené GUI je ověřené na vybraných jedincích vyšetřovaných ve spánkové laboratoři fakultní nemocnice v Hradci Králové. Vybrané metody jsou ověřené ve výpočetním prostředí systému MATLAB.

## Vývoj klasifikátoru vybraných spektrálních dat

Bc. Ema Hrbková (M2)

školitel: Ing. Jan Mareš, Ph.D.

Cílem práce je vývoj klasifikátoru spekter z Ramanovy mikrosondy, která se v současné době využívá jako *in vivo* technika v diagnostice karcinomu plic. Práce se zabývá vytvořením programu v systému Matlab, který automatizovaně a v reálném čase zpracovává naměřená spektra. Součástí programu je i uživatelské prostředí. V rámci klasifikace dat bylo využito především odstranění trendu, dekorelace dat analýzou hlavních komponent či využití neuronových sítí.

## Webová aplikace monitorující změny obsahu webových stránek

Bc. Jakub Jůzl (M1)

školitel: Ing. Iva Nachtigalová, Ph.D.

Uživatelé webových stránek, které jsou průběžně doplňovány o nový obsah, je často musí sami pravidelně kontrolovat, aby získali nové informace. Práce se zabývá návrhem webové aplikace, která by upozorňovala na změny zadaných webových stránek automaticky. Součástí je průzkum již existujících aplikací tohoto typu z hlediska jejich vlastností, technických metod a omezení. Webová prezentace je realizována s využitím moderních webových standardů HTML5 a CSS3, aplikační data jsou ukládána do databázového systému a výstupy generovány pomocí skriptovacího jazyka PHP.

## Návrh a implementace aplikací v jazyku C# za použití moderních vývojových prostředků a programovacích technik

Bc. Jakub Kubík (M2)

školitel: RNDr. Pavel Cejnar

Práce je zaměřena na implementaci moderních nástrojů pro komunikaci různými protokoly, návrh a implementaci rozhraní pro externí výměnu dat či jejich uchovávání a sdílení skrze unifikované úložiště dat v rámci vývojových prostředků pro jazyk C#. Součástí práce je i návrh a vytvoření modelové aplikace v tomto jazyku. Tato aplikace demonstruje různé způsoby propojení databáze Microsoft Access s jazykem C# a je sestavena jako prostředek sloužící k zobrazení a práci s informacemi o studentech a opravování jejich testů. Je tedy schopna zobrazit záznamy z databáze, přidávat, odebírat či upravovat data nebo dynamicky vytvářet nové databáze.

## Multiplatformní testování výkonnosti hardware implementované v jazyku Java

Bc. Tomáš Matonoha (M2)

školitel: RNDr. Pavel Cejnar

Cílem práce je navrhnout a implementovat sadu testů pro ověření rychlosti procesoru a datových úložišť. Tyto testy budou implementovány v multiplatformním jazyce Java. Mezi navržené testy pro určení rychlosti procesoru patří rekurzivní implementace výpočtu  $n$ -tého čísla Fibonacciho posloupnosti, a to jak s výpočtem v celočíselných tak v neceločíselných operacích. Výpočet testuje rychlost buď na jednom jádře nebo na všech jádrech procesoru. Dalším použitým testem pro určení rychlosti procesoru je rychlost komprese souboru provedená za použití všech jader procesoru. Mezi testy pro určení rychlosti datových úložišť patří rychlost čtení a zápisu malých 1 kB souborů a dále čtení a zápis ve velkých 100 MB souborech sekvenčním přístupem. Součástí projektu je dále příprava jednoduchého grafického uživatelského rozhraní, kde si uživatel zvolí, jaké testy chce na konkrétním hardwaru provést. Výsledky testování budou následně validovány pro použití na různých operačních systémech (Windows, Linux), či různých implementacích Java Virtual Machine.

## Řízení modelu chemického reaktoru

Bc. Denisa Pauerová (M2)

školitel: Ing. Jan Mareš, Ph. D.

Cílem projektu je seznámit se s modelem reálné průmyslové stanice. Především byla v této části projektu věnována pozornost základním metodám řízení hladiny. Jednotlivé regulační pochody byly porovnány pomocí vybraných metod posuzování kvality regulačních pochodů. Součástí práce je i experimentální určení nelineární průtočné charakteristiky ventilu a návod ke správnému náběhu a odstavení stanice.

## Průmyslová regulace systému modelu nádrže

Bc. Tomáš Rychetský (M1)

školitel: Ing. Jan Mareš, Ph.D.

Projekt je svou tematikou zaměřen na průmyslovou regulaci modelu nádrže. Regulace se provádí pomocí RaspberryPi a k němu připojené desky UniPi. První část práce je zaměřena na spojení mezi regulovanou soustavou, RaspberryPi a počítačem. Druhá část je zaměřena na kalibraci vstupů a výstupů, jejich filtraci a možnosti přepínání mezi různými způsoby regulace. Obsahem třetí části je identifikace a regulace systému včetně analýzy přechodové charakteristiky.

## Vyhodnocování obličejové symetrie pomocí MS Kinect

Bc. Vojtěch Sedlák (M2)

školitel: prof. Ing. Aleš Procházka, CSc.

Cílem práce je vytvoření aplikace, která umožňuje zobrazovat data ze zařízení Kinect v2 a následně vyhodnocovat symetrii obličeje a jeho jednotlivých částí v souvislosti s rehabilitačními cviky po mozkové mrtvičce. Získání a vyhodnocení těchto dat může být nápomocné v diagnostice neurologických poruch.

## Vývoj prototypu automatického bodotávku

Bc. Michal Šíma (M2)

školitel: Ing. Jan Mareš, Ph.D.

Cílem projektu je vytvoření automatizovaného přístroje pro měření hodnot bodů tání u krystalických látek. Současné přístroje, které jsou pro tuto činnost vytvořené vyžadují po celou dobu asistenci člověka a stojí řádově statisíce korun. Cílem je tedy vytvořit přístroj, který nebude vyžadovat asistenci člověka, za cenu v jednotkách nebo desítkách tisíc. Projekt se skládá z rešerše hardwarových periférií, ze kterých bude bodotávek sestavený (jedná se především o počítač, kameru a senzory), poté z vytvoření skriptů, které budou pořizovat, ukládat a upravovat snímky, tak aby se z nich pomocí obrazové analýzy daly zjistit hodnoty bodů tání u krystalických látek. V dalších částech projektu se bude pokračovat na automatizované regulaci teploty, zkompletování celého přístroje do výsledné podoby a vytvoření uživatelského prostředí pro pohodlné ovládání.

## Regulace hydraulické soustavy

Bc. Marek Šiman (M2)

školitel: Ing. Jan Mareš, Ph.D.

Práce se zabývá implementací a zhodnocením vybraných metod nastavení PI regulátorů jako alternativa k běžně známé metodě Zieglera-Nicholse a jejich vlivu na regulaci hydraulicko-pneumatické soustavy. Efektivnost jednotlivých nastavení PI regulátorů byla vyhodnocena na základě několika kritérií běžně používaných v průmyslové praxi. Součástí práce je i analytická, resp. experimentální identifikace soustavy na základě matematicko-fyzikálního resp. tří-parametrového aproximativního modelu sloužící jako základ pro návrh pokročilých metod řízení, které budou v budoucnu vytvořeny a použity pro regulaci soustavy.

## Vývoj laboratorní úlohy regulace laserového zaměření

Martin Vejvar (B3)

školitel: Ing. Jan Mareš, Ph.D.

Práce se zabývá vývojem laboratorní úlohy pro laserové zaměření. Podstatou práce je sestavit zařízení po softwarové i hardwarové stránce, které je schopno rozpoznat bod řídicího laseru na ploše snímané kamerou, najít jeho pozici a na tuto pozici se zaměřit druhým, servomotory řízeným laserem. Řídicí data pro servomotory jsou získávána a zpracovávána v prostředí Matlab a následně odesílána do mikropočítače Arduino Uno, který se stará o pohyb servomotorů. Výsledkem práce bude zařízení, které je schopno spolehlivě opisovat trajektorii řídicího laseru.

## Využití metod Matching Pursuit a Singular Spectrum Analysis pro zpracování spánkových dat

Bc. Klára Zuntová (M1)

školitel: prof. Ing. Aleš Procházka, CSc.

Práce se zabývá zkoumáním dvou metod – Singular Spectrum Analysis a Matching Pursuit a možnostmi jejich využití v oblasti zpracování EEG signálů pořízených během spánku. Metody jsou studovány za účelem zlepšení klasifikace spánkových stádií. Metoda Matching Pursuit je využito k detekci K-komplexů a spánkových vřetének, jevů typických pro NonREM spánkovou fázi, avšak špatně detekovatelných běžnými metodami časově-frekvenční analýzy. Metoda Singular Spectrum Analysis umožňuje dekompozici signálu do různých frekvenčních pásem, čehož je využito k předzpracování signálu (filtraci) a nadále k extrakci parametrů pro klasifikaci spánkových stádií.

SPONZOR KATEDRY EKONOMIKY A MANAGEMENTU



## Zakladatelský projekt

Bc. Eliška Gálová (M2)

školitel: Ing. Dana Strachotová, Ph.D.

Cílem této práce je vypracování podnikatelského plánu pro provozování internetového obchodu se sportovními potřebami pro plážové sporty. Práce je tvořena z teoretické a praktické části. Teoretická část obsahuje obecné aspekty podnikání, vypracování strategického záměru, provedení potřebných analýz, výběr vhodné právní formy a zakladatelský rozpočet. Praktická část obsahuje vypracovaný podnikatelský záměr na založení konkrétního podniku Beach4Fun s.r.o. pro provoz e-shopu s vybavením pro plážové sporty a pro pořádání sportovních akcí a obsahuje všechny náležitosti podnikatelského plánu pro tento typ podnikání.

## Optimalizace zkušebny, expedice a příjmu v nkt cables s.r.o.

Bc. Ivan Getta (M2)

školitel: Ing. Dana Strachotová, Ph.D.

Nkt cables je předním světovým dodavatelem v odvětví energetiky. Navrhuje, vyrábí a nabízí kabely a řešení pro elektrickou infrastrukturu, stavebnictví, železniční a automobilovou dopravu. Praktická část je rozdělena na práci na dvou pracovištích. Prvním pracovištěm je zkušebna a úkolem bylo provedení miniauditů pořádku a čistoty, miniauditů vizualizace, miniauditů údržby strojů, provedení měření směn, vytvořit snímky pracovního dne, charakterizovat plýtvání, přinést návrhy na zlepšení, charakterizovat výkon jednotlivých směn, vytvořit chronometráž procesu, stanovit normy pro zaměstnance. Druhým pracovištěm je expedice a příjem a úkolem na příjmu a expedici bylo stejně provedení miniauditů pořádku a čistoty, miniauditů vizualizace, miniauditů údržby strojů, provedení měření směn, vytvořit snímky pracovního dne, charakterizovat plýtvání, přinést návrhy na zlepšení.

## Využitie Kirkpatrickovho modelu pre hodnotenie efektivity vysokoškolského vzdelávania

Bc. Jana Golianová (M1)

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

Predložená práca sa zaoberá hodnotením efektívnosti vzdelávania so špecifikáciou na vzdelávanie na vysokých školách. Jadro práce je tvorené podrobnou analýzou štyroch úrovní Kirkpatrickovho modelu a to Reakcia, Učenie, Správanie a Výsledky. Praktická časť je koncipovaná ako návrh zmien, ktoré by pri zavedení do praxe zabezpečili zvýšenie efektívnosti vzdelávania. Použitým nástrojom je Dreyov postup. Ten najskôr definuje požadovaný výsledok, kroky sa navrhujú pri spätnom prechádzaní jednotlivých úrovní Kirkpatrickovho modelu.

## Aplikace metod Business a Competitive Intelligence ke sledování konkurence a hledání nových obchodních vazeb

Bc. Viera Kováčová (M2)

školitel: Ing. Ivan Souček, Ph.D.

Cílem práce je pomocí metod Business Intelligence vyhledat nové obchodní příležitosti pro společnost BASF na tuzemském trhu. Teoretická část práce obecně popisuje metody BI a praktická část se zaměřuje na analýzu produktového portfolia společnosti Lučební Závody Draslovka a.s.

## Lokalizace skladových prostor společnosti VERKON s.r.o.

Bc. Anna Menčíková (M2)

školitel: Ing. Jakub Dyntar, Ph.D.

Předložená práce se zabývá problematikou distribučního systému, konkrétně lokalizačními modely. Cílem práce je umístění skladových prostor společnosti VERKON s.r.o., která se zaměřuje na distribuci a maloobchodní prodej laboratorního a technického skla, pomůcek, přístrojů a chemikálií. K nalezení umístění skladu je použit model pro tzv. lokalizaci jednoho objektu v neomezeném počtu míst.

## Analýza kvalitativních parametrů gumárenských surovin a směsí

Bc. Jaroslav Novotný (M2)

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

Tato práce v úvodu představí společnost Mitas a.s., v teoretické části jsou popsány suroviny, které se používají na výrobu gumárenských směsí. Praktická část zkoumá fyzikálně-technické parametry surovin používaných ve výrobě a následná analýza popisuje vývoj parametrů vybraných směsí.

## Strategické řízení podniku

Bc. Filip Šimáček (M2)

školitel: doc. Ing. Jan Rančák, CSc.

Předložená práce posuzuje a hodnotí investiční projekt společnosti Oberthur Technologies s.r.o jako nástroj realizace její strategie na trhu v oblasti personalizace plastových karet. Stěžejní část tvoří stanovení hodnoty diskontní sazby a analýza citlivosti uvažované investice.

## Analýza zpoždování dodávek přírodního kaučuku pro firmu Mitas a.s.

Bc. Hana Vacková (M2)

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

Práce se věnuje problematice zpoždování dodávek přírodního kaučuku pro firmu Mitas a.s. V úvodu je popsán cíl a metody použité pro zpracování dat. Cílem práce je vyhodnotit zpoždování dodávek jednotlivých dodavatelů a zjistit, jestli zpoždování ovlivňuje i spekulace dodavatelů s cenami přírodního kaučuku. V teoretické části byla vypracována rešerše předchozího výzkumu na téma zpoždování dodávek v námořní dopravě a rešerše týkající se vyhodnocování spolehlivosti dodavatelů. V praktické části byla pomocí bodových a krabicových grafů vyhodnocena spolehlivost jednotlivých dodavatelů. Získané výsledky jsou komentovány v závěru, kde jsem navrhla doporučení pro řešení problému.