

Sekce: **Analytická chemie I.
posluchárna A105, 8:30**

Komise:

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

Členové: Ing. Oldřich Vyhnálek, CSc.
Ing. Jan Koucký, Ph.D.
Ing. Ladislav Tenkl (Nicolet CZ)

Soutěžící: Bártová Lenka
Burianová Jana
Matějková Kristina
Ryntová Eliška
Spálovská Dita
Šerá Luisa
Teubnerová Milada

Sekce: **Analytická chemie II.
místnost A238, 8:30**

Komise:

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

Členové: doc. Ing. Ivan Víden, CSc.
Ing. Antonín Kaňa

Soutěžící: Bc. Adámková Hana
Bc. Hegrová Martina
Bc. Ladislavová Nikola
Bc. Matúšková Kateřina
Bc. Pamánková Pavlína
Bc. Paroulková Karolína
Bc. Strnad Štěpán

Sekce: **Analytická chemie III.
posluchárna A21, 8:30**

Komise:

Předseda: doc. RNDr. Dr. David Sýkora

Členové: Ing. Vadym Prokopec, Ph.D.
Mgr. Alla Synytsya, Ph.D.
Mgr. Filip Dvořák (P-Lab)

Soutěžící: Bc. Číhalová Tereza
Bc. Fagan Patrik
Bc. Grafová Lucie
Bc. Rayová Diana
Bc. Sabreffová Michaela
Bc. Trousil Jiří

Sekce: **Analytická chemie IV.
místnost A236, 8:30**

Komise:

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

Členové: Mgr. Jan Fährnich, CSc.

Ing. Lucie Šťovíčková

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

Soutěžící: Bc. Havlová Šárka
Bc. Krčová Lucie
Bc. Kubulková Zuzana
Bc. Soukupová Dita
Bc. Vlčková Lucie
Bc. Wurmová Ivana

Sekce: **Fyzikální chemie I.
místnost A125 9:00**

Komise:

Předseda: doc. Ing. Michal Fulem, PhD.

Členové: Ing. Štěpán Hovorka, Ph.D.

Ing. Dana Fenclová, CSc.

Soutěžící: Bc. Petr Číhal
Bc. Kristýna Kantnerová
Bc. Lenka Karolyiová
Bc. Miroslav Kludský
Bc. Maja Matoušová

Sekce: **Fyzikální chemie II.
místnost A402 9:00**

Komise:

Předseda: doc. Ing. Pavel Chuchvalec, CSc.

Členové: Ing. Daniel Ondo, Ph.D.

Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.

Soutěžící: Wilhelm Feigl
Bc. Markéta Havlová
Ekaterina Korotenko
Bc. Maryna Pelypenko
Bc. Václav Pokorný
Radek Točík

Sekce: **Fyzikální chemie III.**
místnost A135 (knihovna) 9:00

Komise:
Předseda: prof. Dr. Ing. Pavel Matějka
Členové: prof. Ing. Anatol Malijevský, CSc.
Ing. Jiří Šebek, Ph.D.

Soutěžící: Kryštof Březina
Bc. Veronika Jurásková
Bc. Markéta Pilneyová
Bc. Štěpán Sršeň
Jiří Suchan
Bc. Jakub Trnka

Sekce: **Fyzikální chemie IV.**
posluchárna A20, 9:00

Komise:
Předseda: prof. RNDr. Jiří Kolafa, CSc.
Členové: Ing. Michal Bureš, CSc.
Ing. Ctirad Červinka, Ph.D.

Soutěžící: Bc. Tomáš Belloň
Bc. Jakub Kubečka
Bc. Tomáš Martinek
Bc. Jakub Med
Bc. Vladimír Palivec
Bc. Martin Pospíšil

Sekce: **Chemické inženýrství I.**
posluchárna B142, 8:00

Komise:
Předseda: doc. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.
Členové: Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.
Ing. Michal Vonka
Ing. Martin Leskovjan
Zástupce sponzora

Soutěžící: Mošír Aboeldahad
Jakub Fiala
Jan Haša
Jiří Charvát
Lukáš Chroust
Bc. Petra Janská
Bc. Martina Ježková
Bc. Nicola Susanne Kubečková
Peter Ševčenko
Lukáš Tomaník

Sekce: **Chemické inženýrství II.
posluchárna BS2, 8:00**

Komise:

Předseda: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Členové: Ing. Lenka Schreiberová, CSc.
Ing. Ladislav Konopka
Ing. Anna Pittermannová
Zástupce sponzora

Soutěžící: Martin Kalný
Dominik Kralík
Nazerke Kurospayeva
Ondřej Libánský
Marek Michalko
Jindřich Mrlík
Rudolf Pečinka
Martin Pecha
Bc. Jiřina Pišlová
Bc. Petr Polezhaev
Bc. Ksenia Ponomareva

Sekce: **Chemické inženýrství III.
posluchárna B03, 8:00**

Komise:

Předseda: prof. Ing. Dalimil Šnita, CSc.

Členové: Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D.
Ing. Jan Haidl
Ing. Jan Březina
Zástupce sponzora

Soutěžící: Juraj Petřík
Ivana Pivarníková
Zuzana Ruberová
Milan Solík
Bc. Jan Šmidrkal
Ondřej Šrom
Jiří Štěrba
Bc. Lucie Štiková
Bc. Jakub Tuček
Jitka Urbánková
Otakar Vinklář

- Sekce: **Chemické inženýrství IV.
posluchárna B139, 8:00**
- Komise:
- Předseda: doc. Ing. Michal Příbyl, Ph.D.
- Členové: RNDr. Petr Pokorný, Ph.D.
Ing. Kateřina Punčochová
Ing. Jaroslav Tihon, CSc. (ICPF CAS)
zástupce sponzora
- Soutěžící: Bc. Aleš Ďuriš
Bc. Romana Fojtíková
Bc. Tereza Herinková
Bc. Michal Janda
Bc. Simon Jantač
Bc. Elvira Khafizova
Bc. Anna Krejčí
Bc. Denisa Lizoňová
Bc. Petr Novotný
Bc. Martina Živčáková
-
- Sekce: **Chemické inženýrství V.
místnost B141b, 8:00**
- Komise:
- Předseda: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek
- Členové: Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.
Ing. Jiří Ira
Ing. Petr Stanovský, Ph.D. (ICPF CAS)
zástupce sponzora
- Soutěžící: Bc. Vojtěch Klimša
Bc. Jiří Kolář
Bc. Petr Kovář
Bc. Tomáš Kracík
Bc. Lenka Krajáková
Bc. Pavel Kupka
Bc. Michal Obergruber
Bc. Václav Pelc
Bc. Radim Petříček
Bc. Alexandr Romanov
Bc. Helena Suchanová

Sekce: **Chemické inženýrství VI.
místnost BIII, 8:00**

Komise:

Předseda:

Členové:

prof. Ing. Igor Schreiber, CSc.

Ing. Zdeněk Grof, Ph.D.

Ing. Libor Labík

Ing. Jiří Vejražka (ICPF CAS)

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

Soutěžící :

Bc. Viktorie Čermochová

Bc. Patrik Labík

Bc. Déborah De Masi

Bc. Matěj Novák

Bc. To Quyen Nguyenová

Bc. Marie Prajzlerová

Bc. Ondřej Rycheký

Bc. Patrik Schneider

Bc. Matěj Slavíček

Bc. Anna Zítková

Sekce: **Fyzika a měřicí technika
místnost B220, 8:30**

Komise:

Předseda:

Členové:

doc. Ing. Jaroslav Hofmann, CSc.

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

Dr. Mgr. Jana Jirešová

Ing. Ladislav Fišer, Ph.D.

Soutěžící:

Bc. Petra Vaňková

Bc. Andrea Hujacová

Bc. Pavel Hozák

Bc. Tereza Kordová

Lukáš Pekárek

Bc. Michaela Švarcová

Sekce: **Modelování a řízení systémů**
posluchárna A40, 9:00

Komise:

Předseda: prof. Ing. Jan Náhlík, CSc.

Členové: Ing. Jan Mareš, Ph.D.

Ing. Jan Vrba

Ing. Roman Škultéty (MSD)

Soutěžící: Bc. Dana Balusková
Bc. Michal Dolejšek
Bc. Viktor Mikulášek
Tomáš Rychetský
Bc. Michal Šíma
Bc. Martin Špale

Sekce: **Analýza a zpracování dat**
knihovna ÚPŘT A330, 9:00

Komise:

Předseda: Ing. Jana Finkeová, CSc.

Členové: Ing. Iva Nachtigalová, Ph.D.

Ing. Ondřej Ťupa

Ing. Eva Tělecká (MSD)

Soutěžící: Ivan Čvančara
Kristýna Dánová
Dmitrii Diakonov
Zdeněk Langer
Andrey Stroilov
Mykyta Turenko
Klára Zuntová

Sekce: **Podnikový management a marketing**
posluchárna C11, 8:30

Komise:

Předseda: prof. Ing. Ivan Gros, CSc.

Členové: doc. Ing. Jan Rančák, CSc.

Ing. Olga Kutnohorská, Ph.D.

Ing. Stanislav Kubeš

Soutěžící: Bc. Drobná Natálie
Bc. Krejčí Anna
Bc. Křišťůfková Jana
Ing. Macháč Václav
Mgr. Navarová Adéla
Bc. Nohejl Jan
Bc. Podhradský Adam
Bc. Svobodová Veronika
Bc. Živec Josef

Sekce: **Analytická chemie I.**
posluchárna A105, 8:30

Komise:

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

Členové: Ing. Oldřich Vyhnálek, CSc.
Ing. Jan Koucký, Ph.D.
Ing. Ladislav Tenkl (Nicolet CZ)

Soutěžící: Bártová Lenka
Burianová Jana
Matějková Kristina
Ryntová Eliška
Spálovská Dita
Šerá Luisa
Teubnerová Milada

Sponzoři sekce Analytická chemie I:



OLYMPUS

Your Vision, Our Future



lach:ner



pragolab



CHROMSERVIS

MANEKO
LABORATORNÍ POTŘEBY A TECHNIKA

tevak
LEYBOLD V ČR A SR

VWR

Partner sekce Analytická chemie I:



Analytické cíle pro včasné rozpoznání rakovinných buněk

Autor: Lenka Bártová
Ročník: B3
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.

Rakovina je velmi závažná nemoc současné populace, a proto je výzkum v této oblasti velmi žádoucí a intenzivní. Doposud je jednou z největších nadějí na léčbu chemoterapie, která není však příliš selektivní, což znamená, že mimo rakovinných buněk zasáhne i ty zdravé. Možností, jak tuto situaci do budoucna zlepšit, je využít rozdílů molekulárního povrchu mezi rakovinnými a zdravými buňkami. Úspěšné rozpoznání těchto rozdílů umožní včasnou diagnózu a případně i cílenou léčbu, při které by docházelo k selektivnímu usmrcování pouze rakovinných buněk. Cílem práce je vyhledat v literatuře posledních let právě takové molekulární struktury, kterými se zdravé a rakovinné buňky liší, a mohly by tedy být využity k jejich rozpoznávání.

Studium polymorfních přechodů vybraného antidiabetika pomocí vibrační spektroskopie

Autor: Jana Burianová
Ročník: B3
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka

Předmětem předkládané práce je problematika polymorfních přechodů vybrané aktivní farmaceutické substance ze skupiny antidiabetik. Tato látka tvoří za běžných podmínek polymorfní formy I, II, III a IV. Cílem studie je vibračně spektroskopicky prozkoumat polymorfní přechody v závislosti na zvoleném rozpouštědle a aktivitě vody. Vzorky suspenzí aktivní látky v rozpouštědlech, oddělených filtračních koláčů, referenčních polymorfních forem a rozpouštědel byly proměřeny FT-Ramanovou spektroskopií. Získaná spektrální data byla dále zpracována a vyhodnocena metodami analýzy hlavních komponent a shlukové analýzy umožňujícími porovnat spektra vzorků po interakci s rozpouštědly se spektry čistých krystalových modifikací. V závěru práce jsou diskutována i hlediska, kterými je nutno se zabývat v souvislosti se stabilitou forem z pohledu biodostupnosti, patentové ochrany a ekonomických důvodů.

Stanovení stopových prvků ve vzorcích českého medu

Autor: Kristina Matějková
Ročník: B3
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: prof. Ing. Oto Mestek, CSc.

Med je všeobecně považován za výživově hodnotnou potravinu. Cílem této práce bylo stanovit obsah vybraných kovových prvků, esenciálních i toxických, ve vzorcích českého medu metodou hmotnostní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem a posoudit hodnoty naměřených koncentrací s ohledem na možný vliv na lidské zdraví. Dalším cílem bylo posouzení vztahu mezi naměřenými obsahy prvků a lokalitou původu medu, a to pomocí analýzy hlavních komponent.

Z provedených rozborů vyplývá, že obsah jednotlivých prvků ve zkoumaných vzorcích by neměl být zdraví ohrožující. Dále bylo zjištěno, že geografický původ medu se do jisté míry odráží v jeho složení, vliv však není natolik jednoznačný, aby bylo možné na základě stanovení sledovaných prvků zpětně jednoznačně určit původ medu.

Identifikace konstitučních isomerů dinitroporfyriinů pomocí NMR

Autor: Eliška Ryntová
Ročník: B3
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.

Rakovinná onemocnění bývají nejčastější příčinou úmrtí dnešní populace. Fotodynamická terapie je jednou z možností léčby. Dosud používané fotosenzibilizátory pro tuto léčbu absorbují světlo o příliš krátké vlnové délce (652nm, Foscan), které efektivně proniká pouze 1cm pod kůži. Cílem současného výzkumu je vyvinout lék s vhodnějšími spektrálními vlastnostmi, jaké slibuje derivát bis-spiro- Trögerovy báze, bakteriochlorin s předpokládaným absorpčním maximem 725nm. Tato vlnová délka už spadá do oblasti tzv. „body window“ (650-950nm), tedy záření nejvíce propouštěné lidskou tkání. Příprava bakteriochlorinu se komplikuje obtížným stanovením struktury výchozích polohových isomerů dinitrometaloporfyriinů. Tyto nitroderiváty vznikají neselektivní nitrací příslušného metaloporfyriinu. Cílem mé práce je syntéza, izolace a jednoznačná identifikace všech izomerů dinitrometaloporfyriinů pomocí 1D a 2D NMR, rentgenové strukturní analýzy a hmotnostní spektrometrie. Pro další postup při hledání nového onkologického přípravku je nutné se s těmito strukturami detailně seznámit, až poté přikročit ke zkoumání možností jejich začlenění do molekul Trögerovýchází.

Identifikace nových syntetických drog metodami vibrační spektroskopie

Autor: Dita Spálovská
Ročník: B3
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: doc. Ing. Vladimír Setnička, Ph.D.

Vzhledem k neustálému rozvoji syntézy nových drog, které v České republice dosud nepodléhají nařízení vlády č. 463/2013 Sb., O seznamech návykových látek, je snaha tyto sloučeniny identifikovat, podrobně zkoumat a v krátkém časovém odstupu přidávat na tento seznam. Často jde pouze o chemickou modifikaci již zakázané látky nebo jejího prekursoru, kdy i malá změna struktury může vést k tomu, že látka nespadá do kategorie zakázaných, a tudíž nehrozí žádný postih za její přípravu či prodej. Možné zvýšení počtu psychicky závislých hrozí hlavně kvůli nedostatečné informovanosti o akutních a chronických účincích těchto drog. Cílem práce je naměřit vibrační spektra reálných vzorků nových syntetických drog a vytvořit tak databázi spekter, která by mohla být používána pro identifikaci drog přímo v terénu a pro podrobnou strukturní analýzu. Metody vibrační spektroskopie, zejména pak infračervená a Ramanova, byly zvoleny kvůli spolehlivosti a rychlosti analýzy spojené s jednoduchou přípravou vzorku. Měření probíhá nejen za pomoci sofistikovaných laboratorních přístrojů, ale i mobilních analyzátorů, které mohou být použity přímo v terénu. Rozšíření spektrálních databází drog by mohlo vést k usnadnění boje proti šíření těchto látek.

Stanovení prvků v rostlinných materiálech metodou optické emisní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem a elektrotermickým odpařováním

Autor: Luisa Šerá
Ročník: B3
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: Mgr. Stanislava Matějková

Použití elektrotermického odpařování v optické emisní spektrometrii s indukčně vázaným plazmatem (ICP-OES) umožňuje oproti klasickému vnášení vzorku ve formě aerosolu přímou analýzu pevných vzorků bez nutnosti mineralizace nebo jiných úprav, čímž je zároveň sníženo i riziko kontaminace vzorku. Díky téměř kvantitativnímu přechodu analytů do plazmatu tato metoda vede ke zlepšení detekčních limitů a umožňuje analýzu navážek vzorku v řádu jednotek miligramů. Cílem mé práce bylo najít a optimalizovat podmínky metody ICP-OES s elektrotermickým odpařováním pro přímou multi-elementární analýzu mikro i makrobiogenních prvků v rostlinném materiálu, určit limity detekce a posoudit vliv velikosti navážky na kvalitu získaných výsledků. Dále bylo mým cílem ověřit analýzou certifikovaného rostlinného materiálu přesnost a preciznost této metody. U řady prvků bylo dosaženo výsledků srovnatelných s výsledky publikovanými jinými autory, předmětem další práce bude vylepšení parametrů a linearizace kalibrace u dalších elementů.

Vývoj metodik infračervené spektrometrie pro analýzu gumárenských surovin

Autor: Milada Teubnerová
Ročník: B3
Ústav: Ústav analytické chemie

Školitel: prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka
Konzultant: Ing. Jiří Brejcha, Mitas a.s.

Gumárenské suroviny představují širokou škálu materiálů od chemicky čistých látek až po komplikované směsi. Jedná se o materiály anorganického i organického původu, nízkomolekulární i vysokomolekulární. Například v případě regenerátů se jedná o vícesložkové materiály, kdy se může projevit nedokonalá homogenizace jednotlivých komponent. Vzhledem k odlišné povaze a složení gumárenských surovin je při analýze třeba kombinovat více analytických metod. Infračervená spektrometrie umožňuje rychlé měření a při využití reflektančních technik se minimalizují nároky na úpravu vzorku.

Cílem této práce je vyvinout metodiku vibračně spektrometrické analýzy gumárenských surovin, identifikovat charakteristické pásy v naměřených spektrech, vytvořit a otestovat vlastní knihovnu spekter nejčastěji používaných surovin a taktéž provést multivariační klasifikaci získaných dat zaměřenou na posouzení spektrálních odlišností mezi jednotlivými surovinami.

Sekce: **Analytická chemie II.**
místnost A238, 8:30

Komise:

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

Členové: doc. Ing. Ivan Víden, CSc.
Ing. Antonín Kaňa

Soutěžící: Bc. Adámková Hana
Bc. Hegrová Martina
Bc. Ladislavová Nikola
Bc. Matúšková Kateřina
Bc. Pamánková Pavlína
Bc. Paroulková Karolína
Bc. Strnad Štěpán

Sponzoři sekce Analytická chemie II:



Partner sekce Analytická chemie II:



Studium stability vybraných analogů ghrelinu potenciálně využitelných pro regulaci příjmu potravy pomocí LC-MS

Autor: Bc. Hana Adámková
Ročník: M2
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: doc. Dr. RNDr. David Sýkora

Ghrelín je lipopeptidový hormon, který zvyšuje příjem potravy, což vede k nárůstu tělesné hmotnosti. Je tvořen 28 aminokyselinami a v pozici 3 je na serinovém zbytku kovalentně navázána oktanová kyselina. Tato práce se zabývá studiem stability vybraných lipopeptidů, syntetických derivátů ghrelinu, v plasmě potkanů v závislosti na délce řetězce mastné kyseliny pomocí LC-MS. V těchto nově připravených látkách je esterová vazba mastné kyseliny (charakteristická pro ghrelín) nahrazena stabilnější vazbou amidovou, čímž by mělo dojít k zvýšení stability a prodloužení biologického poločasu látek bez snížení afinity ke ghrelinovým receptorům v organismu. Byl proveden vývoj metod LC-MS pro všechny syntetické analogy s použitím vnitřních standardů a byla optimalizována příprava vzorků pomocí srážecích experimentů s radioaktivně značenými peptidy. Dále byly také stanoveny rozdělovací koeficienty jednotlivých látek a pomocí techniky DLS byla sledována jejich případná tendence k tvorbě micel.

Studium využití stříbrných nanočástic modifikovaných cyklodextrinem k odstraňování aromatických látek z vody

Autor: Bc. Martina Hegrová
Ročník: M1
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.

Tato práce se zabývá využitím stříbrných nanočástic, na jejichž povrch byl imobilizován derivát β -cyklodextrinu z roztoků o různých koncentracích, k odstraňování aromatických látek z vody konkrétně anthracenu, fenanthrenu a naftalenu. K modifikovaným nanočásticím byly přidány aromatické látky a jejich navázané množství bylo stanoveno vysokoúčinnou kapalinovou chromatografií. Analýzou výsledků bylo zjištěno, že navázané množství jednotlivých aromatických látek na modifikované nanočástice závisí na koncentraci derivatizovaného β -cyklodextrinu imobilizovaném na stříbrných nanočásticích a na konkrétní aromatické látce. Následně byla studována možnost opakovaného použití modifikovaných nanočástic.

Tvorba speciální knihovny spekter pro analýzu pachových stop

Autor: Bc. Nikola Ladislavová
Ročník: M2
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: Ing. Oldřich Vyhnálek, CSc.

Cílem projektu je vytváření uživatelských knihoven pro GC/MS, včetně jejich editací, aktualizací a přizpůsobování obsahu vůči nárokům vyplývajícím z povahy výzkumu pachových stop. V rámci specializovaných experimentů jsou univerzální knihovny pro GC/MS nedostačujícím nástrojem pro vyhodnocování naměřených spekter. Většina těchto univerzálních knihoven obsahuje data naměřená na různých kolonách, přístrojích a za použití různých metod měření, což způsobuje odchylky jak ve shodnosti spekter, tak zejména retenčních indexů. Nejvhodnější alternativou pro řešení těchto problémů je tvorba vlastní speciální knihovny spekter, kdy lze zaručit stejné podmínky a nároky měření, včetně registrace látek, které se v univerzálních knihovnách nevyskytují. V rámci této práce je nejčastěji porovnávána knihovna spekter NIST a uživatelská knihovna pachových molekul, která byla vytvořena pro potřeby analýzy lidského pachu.

Separace směsí katinonů kapilární elektroforézou s využitím cyklodextrinů

Autor: Bc. Kateřina Matúšková
Ročník: M2
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: doc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.

V posledních letech se setkáváme stále častěji se syntetickými drogami, které mají silnější účinek než jejich přírodní ekvivalenty. Mezi tyto drogy se dnes řadí i syntetické katinony, které jsou svou strukturou velmi podobné amfetaminu a mají i podobné účinky, neboť podporují uvolňování neurotransmiteru dopaminu. Syntetické katinony není možné detekovat pomocí klasických standardních drogových testů, a proto je zapotřebí využít k jejich stanovení jiné metody, mezi které patří i kapilární elektroforéza.

Tato práce se zabývá v první části optimalizací podmínek, za kterých je možné dané směsi katinonů separovat. Jedná se především o určení optimálního pH a nejvhodnějšího chirálního selektoru na bázi cyklodextrinu. V druhé části je práce zaměřena přímo na separaci směsi katinonů pomocí kapilární elektroforézy s použitím vybraného chirálního selektoru.

Analýza vybraných fytoKANABINOIDŮ v rostlinách rodu *Cannabis* metodou plynové chromatografie ve spojení s hmotnostní spektrometrií

Autor: Bc. Pavlína Pamánková
Ročník: M2
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: doc. RNDr. Dr. David Sýkora

Cílem této práce bylo stanovení vybraných KANABINOIDŮ – tetrahydroKANABINOLU, KANABIDIOLU, dihydroKANABIDIOLU, KANABIGEROLU, KANABINOLU a KANABIDIVARINU v rostlinách rodu *Cannabis* pomocí plynové chromatografie ve spojení s hmotnostní detekcí a optimalizace této metody. Metodika zpracování vzorku, extrakce a měření byla převzata z Kriminálního ústavu Praha. V průběhu práce došlo k modifikaci přejaté metodiky – ke změně rozpouštědla a vnitřního standardu a podmínek GC separace.

Dalším úkolem této práce bylo najít a zmapovat lokality výskytu volně rostoucího konopí na jižní Moravě a určit obsahy jednotlivých KANABINOIDŮ v odebraných vzorcích rostlin. Ze zjištěných hodnot obsahů byl vypočítán průměrný obsah, medián a celkové rozpětí obsahu jednotlivých KANABINOIDŮ. Pro každou rostlinu byl sestaven KANABINOIDNÍ profil. Pomocí analýzy hlavních komponent byly porovnány obsahy KANABINOIDŮ mezi jednotlivými rostlinami, ale i lokalitami. V některých vzorcích rostlin byl překročen zákonem daný limit 0,3% THC.

Rozpustnost pachových molekul

Autor: Bc. Karolína Paroulková
Ročník: M2
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: prof. RNDr. Štěpán Urban, CSc.

Cílem práce je zjistit rozdíly v selektivitě hexanu a dvou polárních rozpouštědel (acetonitrilu, ethanolu) pro extrakci látek obsažených v lidském pachu a vybrání vhodného rozpouštědla pro analýzu vyšších mastných kyselin a jejich esterů. Pach je velmi složitá směs látek. I přes to se podařilo částečně charakterizovat některé látky, které jsou pro pach typické. Jde o látky lipofilního charakteru, které jsou málo těkavé a málo rozpustné ve vodě. Takovými látkami jsou právě vyšší mastné kyseliny a jejich estery.

Na základě předchozích experimentů byla vytvořena modelová směs látek vyskytujících se v lidském pachu. Kromě esterů vyšších mastných kyselin směs obsahovala i aldehydy, ketony, n-alkany a skvalen. Modelová směs byla aplikována na čisté skleněné kuličky, které jsou používány jako odběrový materiál při analýze pachu. Látky byly z kuliček extrahovány různými rozpouštědly. Odebrané podíly rozpouštědel byly odpařeny do sucha a odparky byly rozpouštěny v hexanu. Takto připravené vzorky byly analyzovány na plynovém chromatografu s hmotnostní detekcí. Sledována byla nejen přítomnost látek v závislosti na použitém extrakčním rozpouštědle, ale i výtěžnost extrakce.

Hmotnostně-spektrometrické zobrazování metforminu v řezech vybraných tkání

Autor: Bc. Štěpán Strnad
Ročník: M2
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: doc. Dr. RNDr. David Sýkora

Hmotnostně spektrometrické zobrazování (MSI) je účinným nástrojem pro lokalizaci molekul v biologických tkáních. Zpočátku byla demonstrována především pro lokalizaci peptidů a proteinů. Brzo byla tato metoda aplikována i na nízkomolekulární látky a ve srovnání s tradičními metodami má několik výhod. Při výzkumu a vývoji léčiv je důležité pochopení distribuce léčiva a jeho metabolitů v těle. Tradiční metody neposkytují dostatečnou prostorovou informaci a mohou být i málo specifické. Naproti tomu je MSI citlivou a tzv. „label-free“ metodou (nepoužívá se izotopové značení) vhodnou pro zobrazování léčiv a jejich metabolitů v tkáních.

Cílem této práce je optimalizace metodiky přípravy vzorků pro zjištění distribuce léčiva metforminu v tkáňových řezech ledvin a jater. To zahrnuje přípravu vzorků před nanesením matrice, testování matric z hlediska vhodnosti a interference s analytem. Dále byl studován vliv způsobu nanášení matrice a samotná optimalizace parametrů MSI měření.

Sekce: **Analytická chemie III.**
místnost A236 (knihovna), 8:30

Komise:

Předseda: doc. RNDr. Dr. David Sýkora

Členové: Ing. Vadym Prokopec, Ph.D.

Mgr. Alla Synytsya, Ph.D.

Mgr. Filip Dvořák (P-Lab)

Soutěžící:

Bc. Číhalová Tereza

Bc. Fagan Patrik

Bc. Grafová Lucie

Bc. Rayová Diana

Bc. Sabreffová Michaela

Bc. Trousil Jiří

Sponzoři sekce Analytická chemie III:



Partner sekce Analytická chemie III:



Ověřování pravosti kosmetických výrobků pomocí chiroptických metod

Autor: Bc. Tereza Číhalová
Ročník: M2
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: Mgr. Iryna Goncharová, Ph.D.

Až do 1. poloviny 19. století bylo používání parfémů vyhrazeno pouze pro ty nejbohatší vrstvy společnosti. V dnešní době je naopak používání parfémů zcela běžnou součástí každého z nás. Dříve byly parfémy vyrobené pouze z přírodních látek, zatímco dnes umožňuje parfumářský průmysl obrovské použití syntetických chemikálií. Tento zásadní pokrok ve výzkumu však přináší i svá úskalí. S postupným nárůstem kosmetických produktů na trhu se začaly objevovat i výrobky padělané. Ty však do jisté míry ohrožují lidské zdraví tím, že mohou způsobovat alergické reakce. Z tohoto důvodu je kladen velký důraz na vývoj nových postupů a využití analytických metod, které by umožňovaly odhalit tyto falsifikáty, a určit tak původ a pravost kosmetických výrobků. V této práci byla poprvé využita metoda cirkulárního dichroismu k identifikaci pravosti parfému. K výhodám této metody patří rychlá analýza a malá spotřeba vzorku. Parfémy byly rozeznávány pomocí chirálních selektorů - cyklodextrinů. K analýze byly použity dva typy padělků. První typ představují padělky, které jsou svojí barvou a typem obalu těžko rozlišitelné od originálu. Druhým typem jsou tzv. imitace, které napodobují vůni originálu, ale není tolik kladen důraz na jejich vzhled.

Identifikace a strukturní analýza reálných vzorků kokainu pomocí vibrační a chiroptické spektroskopie

Autor: Patrik Fagan
Ročník: M1
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: doc. Ing. Vladimír Setnička, Ph.D.

Rozšíření drog a fatální následky jejich užívání se v dnešní době stávají čím dál větším problémem. Jednou z velmi rozšířených drog v České republice je kokain, který se řadí mezi tropanové alkaloidy. Čistota vzorků kokainu zabavených mezi narkomany se podle statistik z roku 2011 pohybuje v rozmezí 22–60 %.

Kokain patří mezi opticky aktivní látky, a tudíž byla pro jeho analýzu využita spektroskopie vibračního (VCD) a elektronového cirkulárního dichroismu (ECD) a Ramanovy optické aktivity (ROA). Tyto metody byly dále doplněny infračervenou (IR) a Ramanovou spektroskopií. V této studii byla spektra standardu kokainu a reálných vzorků měřena v deuterované vodě a deuterovaném methanolu. Na základě získaných výsledků byl kokain v reálných vzorcích identifikován, a to i v případech s relativně nízkým obsahem účinné látky. V IR a VCD byl charakteristickým projevem pás 1711–1732 cm^{-1} , jenž náleží valenční vibraci C=O skupiny. V případě ECD tomu byl negativní pás v oblasti 243–252 nm náležící $n - \pi^*$ přechodům aromatického jádra. Dále byla provedena kvantifikace kokainu pomocí integrace ploch hlavních pásů. Naměřená spektra standardu kokainu byla rovněž porovnána s výsledky kvantově chemických výpočtů, což umožnilo detailní přiřazení pásů a odhad zastoupení jednotlivých konformací.

Změny ve struktuře a transportních vlastnostech sérového albuminu vlivem oxidačního stresu

Autor: Bc. Lucie Grafová
Ročník: M1
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: doc. Ing. Vladimír Setnička, Ph.D.

Pojmem oxidační stres je označována nerovnováha mezi tzv. volnými radikály, které vznikají například při dýchání, a antioxidačními mechanismy. Antioxidanty vznikající radikály eliminují a chrání tím buňky těla vlastní. Nebezpečné působení radikálů v organismu se projevuje pozměněním struktury důležitých biomolekul a v důsledku ztráty funkčnosti, v případě proteinů krevního séra jde převážně o transportní funkce. Následkem způsobených škod dochází k rozvoji vážných onemocnění, například Alzheimerovy choroby či infarktu myokardu. Pozměněnou strukturu oxidovaných proteinů jsme díky moderním analytickým metodám schopni zachytit a v budoucnu tak můžeme získat spolehlivý nástroj pro určení míry působení volných radikálů v organismu a diagnostikovat případné onemocnění ještě v raném stádiu, kdy je léčba zpravidla snazší.

Pro studium strukturních změn bude v této práci využito metody elektronového cirkulárního dichroismu spolu s fluorescenční spektroskopií. Oxidační stres je simulován přidavkem oxidačního činidla do roztoku albuminu. Transportní funkce bude sledována změnou intenzity odezvy komplexu albumin-ligand, kterými budou léčiva, jejichž vazba se uskutečňuje v jednom ze tří hlavních vazebních míst ve struktuře proteinu

Spektroskopická analýza krevní plazmy pacientů s Alzheimerovou chorobou

Autor: Bc. Diana Rayová
Ročník: M2
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: doc. Ing. Vladimír Setnička, Ph.D.

Spektroskopická analýza krevní plazmy se zdá být slibnou alternativou pro podporu diagnostiky mnoha onemocnění. Jelikož jsou některá z nich doprovázena změnou konformace chirálních biomolekul, jeví se jako vhodný nástroj jejich studia metody chiroptické spektroskopie. Jedním z takovýchto onemocnění je i Alzheimerova choroba. Její současné diagnostické postupy, jejichž základem je kombinace neurologických a neuropsychologických vyšetření spolu se zobrazovacími metodami, jsou časově i finančně náročné, některá vyšetření jsou značně invazivní a je obtížné odhalit raná stadia tohoto závažného neurodegenerativního onemocnění. V této práci byly analyzovány vzorky krevní plazmy pacientů s Alzheimerovou chorobou a kontrolních jedinců s využitím metod elektronového cirkulárního dichroismu a Ramanovy optické aktivity, které byly doplněny o infračervenou a Ramanovu spektroskopii. Ze získaných spektrálních dat byl vytvořen statistický model pro klasifikaci vzorků dle klinické diagnózy. Dosažené výsledky naznačují slibný potenciál kombinace chiroptické a vibrační spektroskopie pro minimálně invazivní diagnostiku Alzheimerovy choroby.

Moderní metody pro detekci methylačních markerů a jejich význam pro diagnostiku nádorových onemocnění

Autor: Bc. Michaela Sabreffová Bc.
Ročník: M1
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: prof. RNDr. Vladimír Král, D.Sc.

Rakovina je v současné době druhou nejčastější příčinou úmrtí, přičemž téměř každý třetí člověk během svého života onemocní touto chorobou. Jedná se o onemocnění, při kterém dochází k nekontrolovanému růstu buněk a následnému vzniku nádoru. V posledních letech byli vědci schopni daleko lépe pochopit mechanismus vzniku nádorů díky porozumění molekulárním jevům a sekvenci lidského genomu. Ovšem i přes všechny tyto znalosti je prozatím nález úplné léčby stále v nedohlednu, a rakovina tím zůstává nemocí těžko léčitelnou.

V dnešní době při diagnostice nemoci nejsou nápomocny pouze genetické testy, které stanoví, zda pacient má či nemá predispozice pro daný typ rakoviny, ale je zde také jistá možnost testování epigenetických biomarkerů. Analýza těchto biomarkerů prozatím není zavedenou metodou pro klinické využití, ovšem do budoucna má jistě velký potenciál.

Cílem této práce je seznámení s nejnovějšími metodami analýzy epigenetických markerů, komerčními biomarkery a následné kritické zhodnocení jejich využití v praxi. V závěru této práce je uveden příklad analýzy Septinu 9 u pacientů s nádory tlustého střeva.

Nanoformulace rifampicinu pro léčbu tuberkulózy: příprava a fyzikálně-chemická charakterizace

Autor: Bc. et Bc. Jiří Trousil
Ročník: M2
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: prof. RNDr. Vladimír Král, D.Sc.

Uvádí se, že přibližně jedna třetina světové populace je infikována původcem tuberkulózy (*Mycobacterium tuberculosis*). Tuberkulóza je obtížně léčitelná a její výskyt je dlouhodobě na vzestupu. Obtížná léčitelnost tuberkulózy je dána jednak těžko proniknutelným obalem buněk *M. tuberculosis*, tvořeným z velké části hydrofobními mykolovými kyselinami a faktem, že se bakteriální buňky nachází převážně uvnitř makrofágů. V neposlední řadě je terapie komplikována tzv. multirezistentními kmeny *M. tuberculosis*. Ukazuje se totiž, že řada dříve účinných terapií antibiotiky, resp. chemoterapeutiky je u těchto kmenů díky zvýšené rezistenci méně účinná nebo neúčinná.

Relativně novým přístupem je využití nanočásticových lékových forem antituberkulotik podávaných inhalačně, které by byly cíleny přímo do infekčních ložisek, resp. makrofágů.

Příspěvek shrnuje výsledky studie, jejímž cílem byl vývoj terapeutického systému založeného na rifampicinu (antituberkulotikum) enkapsulovaném do biokompatibilních a biodegradovatelných polymerních nanočástic, jeho analytická charakterizace rozptylovými technikami a nalezení elegantního způsobu využívajícího fluorescenci pro *in vitro* sledování interakce nanočástic s vybranými buněčnými liniemi.

Sekce: **Analytická chemie IV.**
Posluchárna A21, 8:30

Komise:

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

Členové: Mgr. Jan Fährnich, CSc.
Ing. Lucie Šťovíčková
Ing. Jan Neuman, Ph.D. (Optik Instruments)

Soutěžící: Bc. Havlová Šárka
Bc. Krčová Lucie
Bc. Kubulková Zuzana
Bc. Soukupová Dita
Bc. Vlčková Lucie
Bc. Wurmová Ivana

Sponzoři sekce Analytická chemie IV:



OLYMPUS

Your Vision, Our Future



lach:ner



pragolab



CHROMSERVIS

MANEKO
LABORATORNÍ POTŘEBY A TECHNIKA

tevak
LEYBOLD V CR A SR

VWR

Partner sekce Analytická chemie IV:



Aplikace povrchem zesílené Ramanovy spektroskopie pro detekci a identifikaci kyseliny gallové

Autor: Bc. Šárka Havlová
Ročník: M2
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: Ing. Vadym Prokopec, Ph.D.

Kyselina gallová je významná biologicky aktivní přírodní látka, která patří mezi rostlinné fenolové kyseliny, mezi deriváty kyseliny benzoové. Má významný pozitivní vliv na lidské zdraví. Vyznačuje se antioxidačními, protizánětlivými, antibakteriálními, antivirovými nebo protirakovinnými účinky. Pomáhá také při kardiovaskulárních nebo neurodegenerativních onemocněních. Člověk ji získává pouze z potravy. V rostlinách se vyskytuje v nízké koncentraci a lze ji studovat v přítomnosti kovových substrátů s vhodnou morfologií povrchu technikami povrchem zesílené vibrační spektroskopie (povrchem zesílenou Ramanovou a infračervenou spektroskopií). V rámci této práce byly dvěma odlišnými experimentálními postupy připraveny zlaté a stříbrné velkoplošné SERS-aktivní substráty. Kyselina gallová byla sorbována na jejich povrch z roztoků o koncentracích 10^{-3} – 10^{-5} mol/l pro zlato a 10^{-3} – 10^{-6} mol/l pro stříbro. Adsorpční chování včetně způsobu prostorové orientace molekuly vůči povrchu substrátů bylo studováno na základě porovnání povrchem zesílených spekter a nezesílených spekter čisté látky.

Vibrační spektroskopie při rozlišení léčiv se stejnou API

Autor: Bc. Lucie Krčová
Ročník: M2
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: Ing. Martin Člupek, Ph.D.

Moderní spektroskopické techniky se v poslední době jeví jako velmi efektivní a citlivé nástroje pro analýzu farmaceutických látek. Spojení vibrační spektroskopie s analýzou hlavních komponent, kdy dochází k vyhodnocení struktury dat (podobností a odlišností), bylo v této práci využito pro rozlišení analogických forem léčiv, tedy léčiv, které mají shodnou aktivní substanci. Toto rozlišování může být přínosem pro farmaceutické firmy při odhalování padělků, odlišení léčiv různých výrobců, nebo při analýze originálních léčiv, jež se uplatňuje při vývoji generik.

V této práci byly analýze Ramanovou spektroskopií podrobeny čtyři druhy analgetik. U dvou přípravků bylo také provedeno mapování pomocí Ramanova mikroskopu. Tímto postupem lze zjistit důležité informace o prostorovém uspořádání analyzovaného vzorku a na jejich základě je možné rozpoznat velikost částic a distribuci aktivních i pomocných látek, z čehož lze odhadnout i technologické postupy použité pro danou formulaci. Výsledkem této práce je pak srovnání jednotlivých metod z hlediska vhodnosti použití při analýze a rozlišení analgetik se stejnou aktivní substancí.

Particle size analysis of pharmaceutical as base for studying disintegration

Autor: Bc. Zuzana Kubulková
Ročník: M2
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka

Particle size measurements are important for scientists, researchers and engineers of both academic and industrial research and development. In the ideal case of particle size characterization, all particles would be identical spheres, have uniform properties such as density, chemical composition, physical properties and opacity. Then all size measurement methods would provide the same result of particle's size (diameter) regardless the principle of the technique used. In the real case most particles are non-spherical; they exhibit different shapes, chemical composition, density, conductivity, refractive index and behaviour in the solution. Above mentioned properties may be caused by different crystal structure of the particles. These differences among the analysed particles can influence variously experimental results when using diverse techniques for particle size determination, such as spectroscopic methods (for example Raman mapping), optical microscopy and hot stage microscopy. The aim of this study is to investigate particle size of active pharmaceutical ingredient in the solid dosage form (tablet) using the above-mentioned techniques.

Využití metod infračervené spektrometrie pro analýzu medu

Autor: Bc. Dita Soukupová
Ročník: M2
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: Ing. Martin Člupek, Ph.D.

Pro analýzu medu jsou nejčastěji využívány metody refraktometrické, kapalinová a plynová chromatografie, optická mikroskopie, volumetrie, gravimetrie, konduktometrie či měření enzymové aktivity. V této práci byl technikami zeslabeného úplného odrazu ve střední infračervené oblasti a transmisní infračervené spektroskopie v blízké infračervené oblasti spektra zkoumán aplikační potenciál metod infračervené spektrometrie pro stanovení hlavních komponent medu a dále pro odlišení jednotlivých druhů medu. Při stanovení hlavních složek medu, tj. fruktosy, glukosy a sacharosy, byla provedena kalibrace metodou vnějšího standardu a metodou standardního přídatku. Spektra byla vyhodnocena metodami klasifikační a regresní vícerozměrné statistické analýzy a analýzou hlavních komponent, pro metodu standardního přídatku byly vyhodnoceny poměry intenzit vybraných pásů.

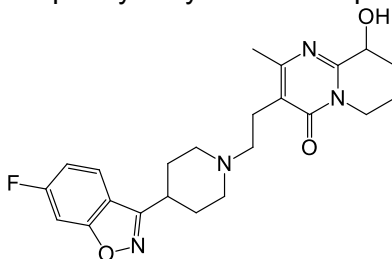
Cílem je poskytnout alternativu k standardně používaným metodám analýzy medu, která je rychlá a vyžaduje jen minimální přípravu vzorku. Stanovení zejména sacharosy je užitečné jako ukazatel falšování medu.

ATR spektra směsí paliperidonu s mastnými kyselinami

Autor: Bc. Lucie Vlčková
Ročník: M2
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: doc. Ing. Kamil Záruba, Ph.D.

Paliperidon (chemicky 9-hydroxyrisperidon) je hlavní biologicky aktivní metabolit antipsychotika risperidonu. Esterifikací OH skupiny paliperidonu je připravován paliperidon-palmitát, využívaný jako dlouhodobě působící antipsychotikum 2. generace.

V této práci, která je součástí projektu na nalezení forem paliperidonu s vlastnostmi ekvivalentními paliperidon palmitátu, byly připravovány směsi paliperidonu s mastnými kyselinami palmitovou a stearovou. Technikou ATR byla měřena infračervená spektra, která byla interpretována srovnáním se spektry čistých složek a publikovanými daty.



Struktura paliperidonu:

THz spektroskopie ve vývoji farmak

Autor: Bc. Ivana Wurmová
Ročník: M2
Ústav: Ústav analytické chemie
Školitel: prof. RNDr. Štěpán Urban, CSc.

Terahertzová spektroskopie je nová perspektivní spektroskopická metoda, která na rozdíl od střední infračervené spektroskopie, reflektující kovalentní charakter chemické vazby, zobrazuje tzv. slabé interakce mezi molekulami a v molekulách. Jedná se o spektroskopii, která může poskytovat informace o vodíkových a Van der Waalsových intra a intermolekulárních silách. V předkládané práci jsou referovány první experimenty s farmaceutickými substancemi a korespondujícími lékovými formami ibuprofenu. Jednoznačně byl pozorován základní interakční pás okolo 35 cm^{-1} , jenž odpovídá odhadům provedenými metodou DFT. První výsledky ukázaly, že je nutné experimentální zařízení rozšířit o chladicí jednotku, která by umožnila měřit vzorky při teplotách kapalného dusíku – velká hustota energetických hladin, odpovídající interakčním módům, je totiž za normálních teplot přepopulovaná a spektrální přechody se při vyšších frekvencích překrývají. Ukázky spekter a podrobnosti o přípravě a měření vzorků, stejně jako teoretické aspekty, budou prezentovány.

Sekce: **Fyzikální chemie I.**
Místnost A125 9:00

Komise:

Předseda: doc. Ing. Michal Fulem, PhD.

Členové: Ing. Štěpán Hovorka, Ph.D.

Ing. Dana Fenclová, CSc.

Soutěžící: Bc. Petr Číhal
Bc. Kristýna Kantnerová
Bc. Lenka Karolyiová
Bc. Miroslav Kludský
Bc. Maja Matoušová

Sponzoři sekce Fyzikální chemie I:



ORLEN GROUP
www.unipetrol.cz



www.nicoletcz.cz

Authorized Distributor



<http://www.pragolab.cz>



www.bercon.cz



www.renishaw.cz

www.maneko.cz

OptiXs

www.optixs.cz

SIGMA-ALDRICH®

[http://www.sigmaaldrich.com/
czech-republic.html](http://www.sigmaaldrich.com/czech-republic.html)

PTIK
INSTRUMENTS
www.brukeroptics.cz

AMEDIS

www.amedis.cz

VWR 
We Enable Science
cz.vwr.com

tevak
LEYBOLD V ČR A SR

www.tevak.cz

MANEKO
LABORATORNÍ POTŘEBY A TECHNIKA

prof. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.

Sorpce a difuze organických látek ve směsných polymerech na bázi triacetátu celulózy

Autor: Bc. Petr Číhal
Ročník: M2
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: Ing. Ondřej Vopička, Ph.D.

Jedním z velice často používaných polymerů pro výrobu separačních membrán je triacetát celulózy (CTA). Bylo objeveno, že vykazuje velice dobrou mísitelnost s polybutylen sukcinátem (PBS), což přináší možnost ovládat vlastnosti poměrem polymerů. V Práci byly stanoveny sorpční vlastnosti polymerních směsí pro methanol a dimethyl karbonát (DMC), k posouzení vhodnosti těchto materiálů pro membránové separace azeotropu.

Sorpční izotermly vykazovaly pokles sorpce methanolu s rostoucím množstvím PBS. U DMC tento jev nebyl pozorován i přes to, že sorpce v čistém PBS je značně nižší než v čistém CTA. Pokles sorpce methanolu závisí na obsahu PBS značně nelineárně, byl proto určen optimální poměr PBS do CTA. Změny difuzivity pro směsné polymery nebyly oproti čistému CTA v rámci chyby měření pozorovány.

Porovnání odhadovaných propustností ukázalo, že přídavek PBS snižuje propustnost membrán pro methanol, ale i tak je propustnost srovnatelná pro obě látky díky nízké difuzivitě DMC. Protože však membrány na bázi CTA obecně vykazují změkčení polymeru methanolem, může směsná membrána potenciálně vykazovat nárůst propustnosti DMC, což bude v nejbližší době zjišťováno směsným experimentem.

(Spektro)elektrochemické studium vlivu elektronové struktury tří izomerních benzendialdehydů na jejich redukci v aprotickém prostředí

Autor: Bc. Kristýna Kantnerová
Ročník: M2
Ústav: Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v. v. i.
Školitel: prof. RNDr. Jiří Ludvík, CSc.

Tato práce se zabývá elektrochemickou redukcí tří izomerních benzendialdehydů – orthoftalaldehydu (benzen-1,2-dikarboxaldehyd, OPA), isoftalaldehydu (benzen-1,3-dikarboxaldehyd, IPA) a tereftalaldehydu (benzen-1,4-dikarboxaldehyd, TPA) v aprotickém prostředí. Zatímco jejich elektrochemické chování ve vodném prostředí a současná kovalentní hydratace způsobená nukleofilním atakem molekul vody jsou v literatuře částečně popsány, studium redukčního mechanismu a případných radikálových meziproduktů těchto biologicky účinných látek zatím nebylo v nevodném prostředí provedeno, ačkoli v buňkách se nevodné prostředí vyskytuje též (např. v tukových buňkách a fosfolipidových membránách).

Redukce byla zkoumána pomocí preparativní elektrolýzy, coulometrie, cyklické voltametrie, DC-polarografie a UV/Vis spekter výchozích struktur i produktů redukce. OPA a TPA poskytují v prvním kroku redukce stabilní radikálové anionty, které byly následně prokázány a charakterizovány pomocí elektronové paramagnetické rezonance (EPR). Pomocí cyklické voltametrie byl studován vliv obsahu vody v rozpouštědle na stabilitu měřených radikálových aniontů OPA, která se zdála být pro stabilitu klíčová. Redukce IPA nevykazuje při cyklické voltametii reverzibilní chování, proto pomocí EPR nebyl zachycen žádný radikálový anion.

Termooxidačná stabilita organických materiálov

Autor: Bc. Lenka Karolyiová
Ročník: M2
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: prof. Ing. Peter Šimon, DrSc.

V práci bola študovaná termooxidačná stabilita za studena lisovaných slnečnicových olejov pomocou diferenčnej kompenzačnej kalorimetrie (DSC). Študovanými materiálmi boli vzorky olejov s prísadou pomarančovej potravinárskej arómy s koncentráciou 20, 40 a 60 mg/L, s prísadou cesnakového éterického oleja (20 mg/L) a extraktu z bazalky (20mg/L). Ako referenčná látka na porovnanie termooxidačnej stability sa použila čistá matrica, t.j. pôvodný olej bez prísad. Spracovaním výsledkov série neizotermických DSC meraní sa získali kinetické parametre dvoch nearrheniovských teplotných funkcií popisujúce termickú oxidáciu olejov, ktoré sa následne použili na výpočet izotermickej indukčnej periódy (IP) pri teplotách 25 a 150 °C. Z výsledkov vyplýva, že všetky prísady majú negatívny vplyv na termooxidačnú stabilitu olejovej matrice. Rozdiely v IP ochutených olejov a čistej matrice sú štatisticky významné pri 150 °C, kedy prímеси spôsobujú približne 20% pokles dĺžky IP. Pri 25 °C sa predikované IP líšia výraznejšie, zároveň však narastá neistota ich odhadu.

Separácia toluénu z cyklických uhľovodíkov použitím **1-ethyl-3-methylimidazolium** **bis(trifluoromethylsulfonyl)imide**

Autor: Bc. Lenka Karolyiová
Ročník: M2
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: Doc. Ing. Karel Řehák, CSc.

Pre získanie dát potrebných pre separáciu aromatických uhľovodíkov od nearomatických uhľovodíkov pomocou extrakčnej destilácie je študovaná rovnováha kvapalina - kvapalina v ternárnom systéme methylcyklohexán + toluen + iónová kvapalina (1-ethyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imid). Cieľom práce je vyvinutie a otestovanie experimentálnej metodiky pre stanovenie rovnováhy v ternárnom systéme a binárnych podsystemov. Pomocou odparovacej metódy a plynovovej chromatografie, boli získané dáta o rovnováhe kvapalina-kvapalina v binárnych systémoch iónovej kvapaliny s toluénom a s methylcyklohexánom pri niekoľkých teplotách a v ternárnom systéme pri 25 °C. Získaná dáta budú následne slúžiť pre posúdenie, či daná iónová kvapalina bude vhodná ako rozpúšťadlo pre extrakčnú destiláciu.

N-Nafiony: sorpční a difuzní testy

Autor: Bc. Miroslav Kludský
Ročník: M2
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: Ing. Ondřej Vopička, Ph.D.

Nafion je polymer tvořený perfluorethylenovým skeletem obsahující vedlejší řetězce zakončené sulfoskupinami. Tento polymer se využívá k membránovým separačním procesům a v alkoholových palivových článcích. Nafionová membrána není však vhodná k separaci všech směsí z důvodu velmi silného kyselého charakteru, který vede ke kyselé katalyzovaným rozkladným reakcím. Jedním z řešení je modifikace polymeru aminy za vzniku derivátů Nafionu, nazvaných zde *N-Nafiony*.

Nafion byl modifikován třemi primárními aminy (benzilamin, ethanolamin a anilin). Takto vytvořené membrány byly testovány na sorpční a difuzní vlastnosti pro methanol, vodu, dimethyl karbonátu (DMC) a *tert*-butyl methyl etheru (MTBE). Dále byl testován, vliv metody přípravy *N-Nafionů* na chemickou strukturu (iontová vs. kovalentní vazba aminu na sulfoskupinu) a tím na vlastnosti polymeru. Modifikace Nafionu primárními aminy účinně zamezily kyselé-katalytickému rozkladu MTBE, pozorovanému u čistého Nafionu, byly stabilní (nehydrolyzovaly ve vodě) a volbou aminu byla realizována cílená modifikace sorpčních a difuzních charakteristik membrány.

Rovnováha kapalina-kapalina v ternárních systémech obsahujících γ -Valerolakton

Autor: Bc. Maja Matoušová
Ročník: M2
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: doc. Ing. Karel Řehák, CSc.

γ -Valerolakton (GVL) je látka, kterou je možno ve velkém měřítku vyrábět z biomasy a která se v blízké budoucnosti může stát významnou surovinou v chemickém průmyslu. Zejména jako rozpouštědlo, aditivum do motorových paliv nebo jako prekurzor při výrobě dalších látek. Z tohoto hlediska jsou informace o vzájemné mísitelnosti GVL a uhlovodíků velmi žádoucí. Bylo zjištěno, že GVL s alifatickými uhlovodíky vykazuje omezenou mísitelnost a že s aromáty se mísí zcela. Jelikož aromáty jsou nemalou součástí motorových paliv, omezená mísitelnost GVL s alifatickými uhlovodíky nemusí být zábranou pro eventuální použití GVL jako aditiva do motorových paliv. Práce se tudíž v první části zabývá stanovením vzájemné mísitelnosti GVL v ternárních systémech GVL + toluen + uhlovodík (jako uhlovodík je zde použit heptan, dekan, dodekan a cyklohexan). Data byla měřena přímou analytickou metodou využívající plynový chromatograf. V druhé části se pak tato práce věnuje termodynamické korelaci experimentálních dat modelem pro dodatkovou Gibbsovu energii.

Sekce: **Fyzikální chemie II.**
Místnost A402 9:00

Komise:

Předseda: doc. Ing. Pavel Chuchvalec, CSc.

Členové: Ing. Daniel Ondo, Ph.D.
Ing. Marcela Dendisová, Ph.D.

Soutěžící: Wilhelm Feigl
Bc. Markéta Havlová
Ekaterina Korotenko
Bc. Maryna Pelypenko
Bc. Václav Pokorný
Radek Točík

Sponzoři sekce Fyzikální chemie II:



ORLEN GROUP
www.unipetrol.cz



www.nicoletcz.cz

Authorized Distributor



<http://www.pragolab.cz>



www.bercon.cz



www.renishaw.cz

www.maneko.cz

OptiXs

www.optixs.cz

SIGMA-ALDRICH®

[http://www.sigmaaldrich.com/
czech-republic.html](http://www.sigmaaldrich.com/czech-republic.html)

PTIK
INSTRUMENTS
www.brukeroptics.cz

AMEDIS

www.amedis.cz

VWR 
We Enable Science
cz.vwr.com

tevak
LEYBOLD V ČR A SR

www.tevak.cz

ΔMANEKO
LABORATORNÍ POTŘEBY A TECHNIKA

prof. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.

Modelování oxidace tryptofanu ve vodném prostředí

Autor: Wilhelm Feigl
Ročník: B3
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: prof. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.

Oxidaci a ionizaci nukleových kyselin a následné děje jsou fenomény během posledních let nemálo zkoumané. Ukazuje se, že na tuto oxidaci může mít velký vliv přítomnost aromatických aminokyselin jako je právě tryptofan, který má strukturu podobnou struktuře bází nukleových kyselin. Aminokyselinám a jejich oxidaci je však věnována relativně malá pozornost. Přitom je čím dál tím zřetelnější, že je to jev zajímavý a biochemicky významný.

Ve své práci zkoumám fotooxidaci tryptofanu v jeho různých formách (kation, anion, nenabitá částice, zwitterion) ve vodném prostředí. Zabývám se jejich fotoemisí a možnosti je pomocí fotoemisní spektroskopie rozlišit. Výsledky jsou srovnány se současnými fotoemisními experimenty prováděnými ve spolupracující laboratoři pomocí techniky kapalných mikrotrysek. K výpočtu využívám kvantově-chemické metody, s použitím různých modelů pro zahrnutí vlivu rozpouštědla.

Termodynamika systému voda + iontová kapalina 1-butyl-1-methylpyrrolidinium 1,1,2,2-tetrafluoroethansulfonát

Autor: Bc. Markéta Havlová
Ročník: M1
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: doc. Ing. Vladimír Dohnal, CSc.

Předkládaná práce se zabývá studiem termodynamického chování systému voda + iontová kapalina [BMPYR][TFES] (1-butyl-1-methylpyrrolidinium 1,1,2,2-tetrafluoroethansulfonát). O této látce neexistují v otevřené literatuře žádné informace (nemá dosud přiděleno abstraktové číslo), a proto byl její komerční vzorek nejprve vakuově přečištěn a charakterizován ^1H a ^{19}F NMR spektroskopii. DSC kalorimetrií byla dále zjištěna teplota tání a teplo tání. Pro vodné roztoky [BMPYR][TFES] byla sledována rovnováha kapalina-pára a stanovena aktivita vody a_w v závislosti na složení a teplotě přístrojem AquaLab4TE. Měření a_w byla provedena pro deset složení pokrývajících celý koncentrační interval a sedm teplot od 288,15 K do 318,15 K. Data byla vyhlazena ve dvou krocích: nejprve teplotní závislosti pro každou izopletu a následně koncentrační závislosti pro každou izotermu. Kvalita a rozsah experimentálních dat dovolily takto vyhodnotit s dobrou přesností derivační termální veličiny (dodatkovou entalpii a dodatkovou tepelnou kapacitu). Adekvátní korelaci $a_w(x_w, T)$ dat poskytl rovněž rozšířený NRTL model, který byl následně využit k výpočtu rovnovážného diagramu kapalina-pevná fáze. Termodynamické chování systému voda + [BMPYR][TFES] je dále krátce diskutováno z pohledu molekulárních interakcí a struktury.

Chemická rovnováha při zplyňování hnědého uhlí

Autor: Ekaterina Korotenko
Ročník: B3
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: doc. Ing. Karel Řehák, CSc.

Zplyňování uhlí je technologie konverze pevného uhlí v hořlavé plyny pomocí parciální oxidace. Nehledě na to, že první technologie byly vyvinuty již před 200 lety, v současnosti zažívá gasifikační průmysl svou renesanci. Zplyňovacím médiem je kyslík a vodní pára vzniklá např. pomocí tepla z vysokoteplotního jaderného reaktoru (HTR). Produktem zplyňování je syntézní plyn, jehož výstupní složení je silně ovlivněno chemickou rovnováhou.

Úkolem práce bylo připravit výpočetní program pro řešení chemické rovnováhy při zplyňování hnědého uhlí. Pro řešení byla zvolena nestechiometrická metoda minimalizace Gibbsovy energie. Dále byl potom definován modelový reagující systém, tj. soubor látek, které je zapotřebí při zplyňování uvažovat. Provedeny byly také první výpočty zaměřené na vliv provozních podmínek (především teploty) na rovnovážné koncentrace složek syntézního plynu a konverzi uhlí. Práce vznikla na požádavek Centra výzkumu Řež, s.r.o.

Stanovení koncentrace analytů pomocí fyzikálních a imunoanalytických metod

Autor: Bc. Maryna Pelypenko
Ročník: M1
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: Ing. Alena Randová, Ph.D.

Cílem této práce bylo určení vhodné metody pro stanovení koncentrace arašídového proteinu ARA H v extraktech komerčně dostupných sušenek. K určení koncentrace byly využity metody jak fyzikálně chemické tak i imunoanalytické. Fyzikálně chemické metody zastupuje měření povrchového napětí (prstencová metoda, metoda visící kapky) a měření hustoty.

Imunoanalytické metody reprezentuje ELISA (Enzym Linked Immuno Sorbent Assay). Tato metoda se vyznačuje vysokou specifitou reakce látek peptidového či proteinového charakteru s antigeny či protilátkami navázanými na pevném nosiči, nejčastěji na mikrotitrační destičce. K vyhodnocení výsledku slouží měření absorbance barevného produktu reakce (A). Tato metoda je vhodná především pro analyty o nízké koncentraci arašídového proteinu.

Výsledkem této práce jsou naměřené veličiny vzorků sušenek a kalibračních roztoků o známé koncentraci proteinu ARA H výše zmíněnými metodami.

Měření tepelných kapacit a teplot skelných přechodů farmakologicky významných systému

Autor: Bc. Václav Pokorný
Ročník: M1
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: doc. Ing. Květoslav Růžička, CSc., Ing. Lukáš Krejčík (Zentiva Group, a.s.)

Předložená práce se zabývá experimentálním a výpočetním stanovením teplot skelného přechodu farmaceutických produktů – tuhých roztoků polymerů s API (aktivní účinnou látkou). Byla vybrána skupina dvaceti polymerů a 1 API.

K výpočtům byly použity 3 nejpoužívanější odhadové metody – Foxova metoda, metoda Gordona a Taylora a metoda Couchmana a Karasze. K těmto predikčním výpočtům je třeba znát některé vlastnosti čistých složek tuhého roztoku – konkrétně teplota skelného přechodu, měrná tepelná kapacita (v obou stavech – sklo i tavenina) a hustota. Tyto vlastnosti byly změřeny a porovnány s literárními údaji.

Odhadové výpočty byly nakonec porovnány s experimentálními hodnotami a byla posouzena vhodnost predikčních metod pro běžnou praxi.

Doporučené hodnoty tlaku nasycených par formamidu a acetamidu

Jméno: Radek Točík
Ročník: B3
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: doc. Ing. Květoslav Růžička, CSc., Ing. Vojtěch Štejfa

V předložené práci jsou uvedeny nově naměřené hodnoty teplot a entalpií fázových přechodů (kalorimetrem TA Q1000), tepelných kapacit (kalorimetrem Setaram μDSCIIIa) a tlaků nasycených par (na aparatuře STAT6 a STAT8) pro formamid (CAS RN: 75-12-7) a acetamid (CAS RN: 60-35-5). Dále byly z literatury vybrány hodnoty tlaků nasycených par a tepelných kapacit studovaných látek. Vybraná literární data byla v této práci srovnávána spolu s nově naměřenými hodnotami tlaků nasycených par a tepelných kapacit. Výsledkem jsou doporučené hodnoty tlaků nasycených par v technologicky významném rozsahu teplot. U formamidu v teplotním rozsahu 253 K až 303 K a u acetamidu od 310 do 360 K.

Sekce: **Fyzikální chemie III.**
Místnost A135 (knihovna) 9:00

Komise:

Předseda: prof. Dr. Ing. Pavel Matějka

Členové: prof. Ing. Anatol Malijevský, CSc.
Ing. Jiří Šebek, Ph.D.

Soutěžící: Kryštof Březina
Bc. Veronika Jurásková
Bc. Markéta Pilneyová
Bc. Štěpán Sršeň
Jiří Suchan
Bc. Jakub Trnka

Sponzoři sekce Fyzikální chemie III:



ORLEN GROUP
www.unipetrol.cz



<http://www.pragolab.cz>



www.nicoletcz.cz



www.labtech.eu

Authorized Distributor



www.pesystems.cz



www.bercon.cz



www.QIA.cz



www.renishaw.cz

www.maneko.cz

OptiXs

www.optixs.cz

SIGMA-ALDRICH®

[http://www.sigmaaldrich.com/
czech-republic.html](http://www.sigmaaldrich.com/czech-republic.html)

PTIK
INSTRUMENTS
www.brukeroptics.cz

AMEDIS

www.amedis.cz

VWR 
We Enable Science
cz.vwr.com

tevak
LEYBOLD V ČR A SR

www.tevak.cz

ΔMANEKO
LABORATORNÍ POTŘEBY A TECHNIKA

prof. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.

Potenciální vazebná místa biogenních ligandů na dimeru insulinu

Autor: Kryštof Březina
Ročník: B2
Ústav: Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i.
Školitel: prof. Mgr. Pavel Jungwirth, DrSc.

Vzrůstající trend v zájmu o chemii insulinu je nepopiratelný. Není divu, její biochemické a medicínské aplikace jsou den ode dne rozmanitější, nicméně jde o procesy značně komplikované, a proto zůstávají místy tajemné a nechávají otevřené dveře výzkumu. V naší skupině se zajímáme o fyzikálně chemické náhledy na skladování insulinu v těle, mechanismus jeho případné aktivace a také zjišťujeme, jak můžeme tuto aktivaci uměle ovlivnit. Tato dílčí práce zkoumá interakce malých nabitých biogenních iontů a molekul, jmenovitě argininu, serotoninu a kationtu zinečnatého, které jsou prokazatelně přítomny při zmíněných přeměnách, s dimerem insulinu a jejich případné vlivy na konformaci proteinu. Dimer je klíčovou formou, protože je přesně v půli cesty mezi hexamerem, v jehož podobě je insulin skladován a aktivní monomerní formou. K teoretickému zkoumání jsme použili metod molekulové dynamiky. Výzkum se pohyboval i v rovině samotných výpočtů – srovnávali jsme různé parametrizace (modely) jednotlivých molekul a sledovali, do jaké míry tyto parametrizace ovlivňují interakce, které jsme porovnávali s praktickými krystalografickými výsledky.

Modelování přenosu náboje v nukleových kyselinách

Autor: Bc. Veronika Jurásková
Ročník: M1
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: prof. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.

V této práci jsem se věnovala modelování fotoemisních spekter cytosinu, představující nejjednodušší bázi nukleových kyselin. Cytosin byl podroben několika dynamickým simulacím v rozsáhlém vodním klastru. Následně byl studován vliv simulace a použitého rozpouštědla na první ionizační energii – byl využit implicitní i explicitní model solvatace a také jejich kombinace. Získané výsledky budou dále aplikovány na studium větších systémů – např. fragmentů DNA. Ionizační energie bází a s nimi související elektrochemické parametry (redoxní potenciály, reorganizační energie) hrají důležitou roli pro pochopení interakce DNA s vysokoenergetickým zářením. Jeho důsledkem je nežádoucí oxidace DNA, vedoucí k mutacím v buňce a následně k nádorovému bujení, příp. smrti buňky. Pro studium vzniku poškození DNA je tedy nutné vědět, které úseky v DNA jsou nejvíce náchylné k oxidaci a jakým způsobem oxidaci ovlivňuje okolí. Bohužel, experimentální studium elektrochemických vlastností těchto systémů ve vodném prostředí není jednoduché. Ionizační energie je však možné měřit pomocí fotoemisní spektroskopie v kapalně fázi a to díky nově vyvíjené metodě kapalných mikrotřisek. Takto získaná spektra ovšem k interpretaci potřebují teoretické zázemí, spolupráce s výpočetní laboratoří je tedy nezbytná.

Fotochemie peroxidu vodíku: Teoretické studium

Autor: Bc. Markéta Pilneyová
Ročník: M1
Ústav: Ústav fyzikální chemie
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. V této práci se zabývám studiem solvatovaného peroxidu vodíku, konkrétně strukturou klastrů peroxidu vodíku a vody a modelováním UV absorpčního spektra solvatovaného peroxidu vodíku. Popisují jednotlivé strukturní parametry malých klastrů v základním stavu a také v excitovaných stavech. UV absorpční spektra modeluji reflexním principem, kdy pro získání jaderné hustoty základního stavu využívám simulace vibrace molekul kolem rovnovážné geometrie pomocí metod molekulové dynamiky se zahrnutím kvantových efektů jader. Následně analyzuji závislost spekter na strukturních parametrech. Nakonec analyzuji strukturu peroxidu vodíku ve vodném roztoku.

Spektroskopie Criegeeého intermediátů

Autor: Bc. Štěpán Sršeň
Ročník: M1
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: prof. RNDr. Petr Slavíček Ph.D.

Tato práce se věnuje pokročilé metodice modelování absorpčních spekter na molekule nejjednoduššího Criegeeého intermediátu CH_2OO . Criegeeého intermediáty představují hlavní cestu pro odstraňování těkavých organických sloučenin z troposféry a jsou tak významné pro atmosférickou chemii. Pro jejich krátkou dobu života je velmi obtížný jejich experimentální popis a je tak podstatné věnovat se jejich teoretickému studiu.

Proto se tato práce zabývá charakterizací základního i excitovaných stavů CH_2OO a modelováním jeho UV absorpčního spektra. Práce se zaměřuje na pokročilé metody modelování absorpčních spekter, pozornost je také věnována studiu duální povahy CH_2OO zahrnující zwitteriontový i biradikálový charakter. Při studiu byl použit model konfigurační interakce, teorie spřažených klastrů, poruchová teorie i teorie funkcionálu hustoty.

Bylo zjištěno, že metody standardně považované za referenční v případě Criegeeého intermediátů selhávají a je nutné použití extrémně výpočetně náročných metod založených na teorii spřažených klastrů se zahrnutím triple excitací. Jako nezbytné se také ukázalo použití relativně kvalitní báze obsahující difúzní funkce. Nejspolehlivější spektrum bylo získáno metodou EOM-CCSD s korekcí na úrovni EOM-CCSDT.

Iontové párování LiCl: nukleární kvantové efekty

Autor: Jiří Suchan
Ročník: B3
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: prof. RNDr. Petr Slavíček, PhD.

Iontové páry představují výpočetně dobře uchopitelné systémy, na kterých můžeme pozorovat vlastnosti jednotlivých komponentů. Metodou mikrosolvatace iontových párů byly kupříkladu zkoumány molekuly HCl či NaCl, přičemž pro korektní popis systému s významně lehčím vodíkovým kationtem musely být zahrnuty kvantové efekty jader. Jako jasným kandidátem pro další výzkum vlivu těchto efektů se ukazuje lithium, třetí nejlehčí prvek. Lithium se díky jeho reaktivitě vyskytuje v řadě sloučenin, které nacházejí významné využití například v elektrochemickém průmyslu či medicíně, a tedy znalost jeho chování je zásadní.

V této práci zkoumám sůl lithia, chlorid lithný, na rozdílných úrovních mikrosolvatace v jak klasickém přístupu, tak kvantovém. Nukleární efekty jader jsou zahrnuty díky aplikaci zobecněných Langevinových rovnic v prováděných výpočtech. Při tomto procesu používám dynamických simulací a technik akcelerované dynamiky, jejichž implementace je dlouhodobým cílem. Jednou z těchto technik je metadynamika, která se ukazuje jako velmi efektivní metoda pro zkoumání profilu volné energie v závislosti na námi zvolených proměnných. V kontextu práce diskutuji, zda je lithium dalším netriviálním prvkem, kde kvantové efekty hrají důležitou roli.

Výpočty trojčasticových složek interakční energie v molekulových krystalech aromatických sloučenin obsahujících halogeny.

Autor: Bc. Jakub Trnka
Ročník: M1
Ústav: Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i.
Školitel: prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc.

Projekt se zabývá kvantovými výpočty párových a trojčasticových složek interakční energie v modelových tetramerech pocházejících z molekulových krystalů derivátů imidazopyrimidinu obsahujících halogeny. Budou zkoumány relativní vlivy halogenových a vodíkových vazeb na párové interakční energie metodou funkcionálu hustoty B3-LYP/def2-TZVPP s Grimmeho empirickou korekcí D3. Trojčasticové a čtyřčasticové interakční členy budou počítány funkcionálem BH-LYP/def2-QZVP také s Grimmeho emp. korekcí D3. Cílem projektu je kvantifikovat velikost vícečasticových složek interakční energie ve studovaných molekulových krystalech.

Sekce: **Fyzikální chemie IV.**
Posluchárna A20, 9:00

Komise:

Předseda: prof. RNDr. Jiří Kolafa, CSc.

Členové: Ing. Michal Bureš, CSc.
Ing. Ctirad Červinka, Ph.D.

Soutěžící: Bc. Tomáš Belloň
Bc. Jakub Kubečka
Bc. Tomáš Martinek
Bc. Jakub Med
Bc. Vladimír Palivec
Bc. Martin Pospíšil

Sponzoři sekce Fyzikální chemie IV:



ORLEN GROUP
www.unipetrol.cz



www.nicoletcz.cz

Authorized Distributor



<http://www.pragolab.cz>



www.bercon.cz



www.renishaw.cz

www.maneko.cz

OptiXs

www.optixs.cz

SIGMA-ALDRICH®

[http://www.sigmaaldrich.com/
czech-republic.html](http://www.sigmaaldrich.com/czech-republic.html)

PTIK
INSTRUMENTS
www.brukeroptics.cz

AMEDIS

www.amedis.cz

VWR 
We Enable Science
cz.vwr.com

tevak
LEYBOLD V ČR A SR

www.tevak.cz

ΔMANEKO
LABORATORNÍ POTŘEBY A TECHNIKA

prof. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.

Fotodynamika freonů: *ab initio* výpočty a neadiabatické simulace

Autor: Bc. Tomáš Belloň
Ročník: M2
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: prof. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.

Tato práce je zaměřena na studium fotodynamických vlastností CCl₂F₂ pomocí metod výpočetní chemie. CCl₂F₂ je také označován jako CFC-12 nebo freon-12 a v současné době představuje hlavní sloučeninu, která poškozuje ozónovou vrstvu. S využitím *ab initio* přístupu jsem optimalizoval geometrii základního stavu molekuly CCl₂F₂. Tato geometrie byla následně použita jako parametr pro simulaci vibrací základního stavu molekuly metodou kvantového termostatu. Geometrie získané touto simulací představovaly výchozí geometrii pro molekulovou dynamiku, přičemž pozornost jsem věnoval kinetické energii fragmentů, které vznikly poté, co molekula CCl₂F₂ absorbovala záření. Pro výpočet excitačních energií disociace CCl₂F₂ jsem použil metodu CASSCF. Tato metoda však zpravidla poskytuje vyšší energie než experiment, a proto je třeba tyto energie korigovat s ohledem na experimentálně naměřené hodnoty. Hlavním úkolem bylo nalezení vhodné korelační funkce a vhodných parametrů, které v kombinaci s metodou CASSCF poskytnou výsledky odpovídající experimentálním hodnotám.

Popis ionizace solvatovaných molekul: Vývoj metod QM:QM

Autor: Bc. Jakub Kubečka
Ročník: M1
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: prof. RNDr. Petr Slavíček Ph.D.

Ve své práci se zaměřuji na efektivní přístupy výpočtu ionizačních energií pro komplexní systémy ve vodném roztoku. Metody teoretické chemie zaznamenaly v posledních desítkách let velký pokrok ve schopnosti kvantitativně modelovat strukturu, energetiku a reaktivitu molekul. Přesto stále narážíme na problém se škálováním výpočetní náročnosti s velikostí systému. Ionizace a obecněji oxidace představují typický problém vyžadující výpočty pro velmi rozsáhlé systémy, neboť při změně náboje jsou ovlivněny i velmi vzdálené molekuly. Výpočet ionizační energie molekuly obklopené desítkami či stovkami molekul rozpouštědla plně kvantovým způsobem není prakticky realizovatelný. Používají se proto jednodušší techniky, jako například QM/MM metoda (kvantová mechanika (QM) v kombinaci s molekulovou mechanikou (MM)), ve které se systém rozdělí na molekuly rozpouštědla a rozpouštěnce, jsou řešeny na různé úrovni výpočtu. Ve své práci implementuji pokročilejší způsob typu QM:QM, v rámci kterého jsou postupně počítány na QM úrovni jednotlivé fragmenty systému, které na sebe působí prostřednictvím elektrostatických sil. Ukazuje se, že výpočet ionizace solvatovaných molekul vyvíjenou metodou QM:QM by mohl výrazně snížit výpočetní náročnost.

Simulace vlivu vnitřní dynamiky polymerů v kontextu fluorescenční korelační spektroskopie

Autor: Bc. Jakub Kubečka
Ročník: M1
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: RNDr. Peter Košovan, Ph.D.

Fluorescenční korelační spektroskopie (FCS) je experimentální metoda, pomocí které lze studovat difúzi fluorescenčně značených částic. Existující analytické modely, na základě kterých se FCS měření zpracovávají a získávají se pomocí nich z experimentu veličiny charakterizující dynamické vlastnosti částic v roztoku, které jsou odvozeny za předpokladu normální difúze bodových částic. Pro zředěné roztoky malých molekul lze tuto aproximaci bez problémů použít. Při použití zředěných roztoků makromolekul (DNA apod.), by však mohla vnitřní dynamika makromolekuly výrazně ovlivnit výsledky z experimentu získané pomocí výše uvedené analytické metody. V této práci zkoumáme pomocí simulací, jak jeden z jednoduchých makromolekulárních modelů (Rouseův model, tj. bodové částice spojené harmonickými potenciálem) ovlivňuje vztah mezi středním kvadratickým posunutím (MSD) a zdánlivým středním kvadratickým posunutím (MSD^*) získaným z autokorelační funkce FCS $G(\tau)$ ze stejné trajektorie. Na základě tohoto srovnání lze usuzovat na spolehlivost výše zmiňovaného postupu vyhodnocení experimentálních dat a jejich interpretace v kontextu subdifúze.

Vápenatý ion ve vodném prostředí: Molekulové simulace hydratace a iontového párování

Autor: Bc. Tomáš Martinek
Ročník: M2
Ústav: Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i.
Školitel: prof. Mgr. Pavel Jungwirth, DrSc.

Vápenaté ionty hrají důležitou roli v řadě technologických i biochemických procesů. Chování těchto iontů v roztocích je významně ovlivněno jejich relativně vysokou nábojovou hustotou, která také komplikuje správný popis jejich interakcí v molekulově-dynamických simulacích. Pro zkoumání iontového párování vápenatého kationtu jsme jako základní model simulovali jeho asociaci s chloridovým aniontem ve vodném prostředí a získali profil volné energie spojený s tímto procesem. Protože asociace s protiontem je ovlivněna silnou hydratací vápenatého iontu, zkoumali jsme detailně jeho interakci s molekulami vody první solvatační vrstvy. Porovnali jsme výsledky dvou metodicky rozdílných přístupů. První, klasická molekulová dynamika umožňuje dostatečně dlouhé simulace, avšak je zatížena empirickým charakterem parametrizace silového pole. Vyzkoušeli jsme několik používaných silových polí a pokusili se navrhnout nová a lepší. Druhý přístup, ab initio molekulová dynamika v principu neduhů empirických parametrizací netrpí, na druhou stranu jsou její simulační časy na hranici možností a je třeba počítat s relativně velkou statistickou neurčitostí výsledků. Získaná data jsme nakonec porovnali s experimentálními daty neutronového rozptylu, získanými na výzkumném reaktoru v Grenoblu.

Reactivity of hydrated electron in water nanoparticles

Autor: Bc. Jakub Med
Ročník: M2
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: prof. RNDr. Petr Slaviček, Ph.D.

Ionization of molecules leads typically to a heavy fragmentation. Recently, a novel soft ionization techniques based on ionization of solvated electron formed upon alkali metal deposition on molecular clusters was suggested. This technique was proposed and used as a sizer for small aerosols. Furthermore, presence of solvated electron can lead to chemical interactions within the system. Then this approach can be used to study reactivity of various small aerosols.

In this paper, I will present study of sodium atom interaction with pure and doped water clusters by methods of quantum chemistry and molecular dynamics simulations. We observe different behaviour for pure and doped water clusters. While only pure water clusters preserve solvated electron structure, the other systems of interest showed further reactions leading to formation of molecular anions.

Ion structure around neutral molecules and its consequences in electrophoresis

Autor: Bc. Vladimír Palivec
Ročník: M2
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.

Capillary electrophoresis is an electrochemical method which can be utilized to study ion specific interactions. Neutral molecules, which are used as a markers, should not move under influence of electrical field. However, upon solvation in a salt solution, they do. Ions bind a solute with different strength and this difference leads to local excess or depletion of a charge. This non-isotropic distribution of ions around a solute leads to acceleration of the neutral molecule. In present study we have focused on the simplest substance with an amide bond (formamide) and its analogues. By means of molecular dynamic simulations we investigated local structure of two different salts – NaCl and CaCl₂ around the solutes. These finding are then presented in terms of experimentally measurable quantity – electrophoretic mobility and compared to experimental results.

Capillary condensation in slit pores: novel Kelvin-like equation and density functional theory

Autor: Bc. Martin Pospíšil
Ročník: M2
Ústav: Ústav fyzikální chemie
Školitel: Mgr. Alexandr Malijevský, Ph.D.

Study of fluid phase equilibria in confining geometries such as micro- and nanoscopic pores is important both from fundamental as well as applied perspective. Understanding of the fluid behavior in nanopores is vital for design of microdevices in modern nanotechnologies.

The aim of our work is to extend the well-known Kelvin equation for the phase equilibrium inside infinite pores to finite and indeed microscopic dimensions. The proposed equation describes the phase equilibrium in the slit-like pores of planar geometries which is applicable both below and above the wetting temperature of the corresponding planar wall.

The analytic predictions were tested against the numerical results obtained from a (classical) density functional theory. The comparison reveals a good quantitative agreement between the two approaches.

Sekce: **Chemické inženýrství I.
posluchárna B142, 8:00**

Komise:

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

Členové: Ing. Lukáš Valenz, Ph.D.

Ing. Michal Vonka

Ing. Martin Leskovjan

Zástupce sponzora

Soutěžící: Mošír Aboeldahad

Jakub Fiala

Jan Haša

Jiří Charvát

Lukáš Chroust

Bc. Petra Janská

Bc. Martina Ježková

Bc. Nicola Susanne Kubečková

Peter Ševčenko

Lukáš Tomaník

Sponzoři sekce Chemické inženýrství I

ŠKODA



ZeNTIVA
SPOLEČNOST SKUPINY SANOFI



SILON
Fibres • Compounds



Lonza

Příprava lékových forem pomocí nanomletí

Autor: Mošír Aboeldahab
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Šoós Miroslav, Ph.D.

Velká skupina léčiv jsou molekuly, které mají malou rozpustnost ve vodě, z čeho plyne jejich nízká dostupnost v lidském těle. Účinným způsobem na zvýšení této biodostupnosti je zmenšení velikosti částic léčiva. Cílem této práce byla příprava nanočástic metodou top-down pomocí technologie mokrého mletí ve vibračním mlýnu. Studována byla účinnost vibračního mlýnu při různých podmínkách mletí, jako je frekvence vibrací mlýnu, velikost použitých kuliček a koncentrace surfaktantu. Získané distribuce velikosti částic byly charakterizovány pomocí statického a dynamického rozptylu světla jako i měření elektroforetické mobility. Získaná data potvrzují možnost použití metody nanomletí při přípravě nanočástic léčiva o velikosti pod 1 mikron s dobrou stabilitou.

Fluidní systémy pro elektrochemickou charakterizaci nanostrukturovaných materiálů

Autor: Jakub Fiala
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.

V této práci je popsán návrh a konstrukce fluidního zařízení schopného charakterizovat elektricky vodivé nanostrukturované materiály syntetizované v „bulku“. Měření elektrochemických vlastností těchto materiálů se v současnosti omezuje na slisované tablety, přičemž výsledky měření nelze spolehlivě vyhodnotit. Užití fluidního zařízení dovoluje elektrochemicky charakterizovat nanostrukturované materiály ve formě lože vytvořeného na podpurném filtru. Toto uspořádání umožňuje plně využít velkého mezifázového povrchu nanostrukturovaných materiálů například k adsorbci látek přítomných v okolní tekutině. V současné době se zabýváme elektrochemickou charakterizací nanostrukturovaných vodivých polymerů na bázi polypyrolu. Tento systém bude v budoucnu použit ke studiu interakcí biomolekul jako proteinů nebo nukleových kyselin s různými typy nanostrukturovaných materiálů (vodivé polymery, grafen, zlaté nanočástice a podobně) s cílem vytvořit nové biosenzory pro dané molekuly kompatibilní s technologiemi lab-on-a-chip systémů.

Liposome poly-L-lysine SPIONs complexes for active release

Autor: Jan Haša
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek PhD.

Liposomes are spherical hollow particles formed by a phospholipid bilayer. Their structure enables encapsulating many kinds of water-soluble substances, which can be released by several mechanisms such as temperature or osmotic pulses. The use of liposomes faces several obstacles such as stability under varying external conditions, effectivity of the preparation methods, encapsulation efficiency and suitability of release mechanism for a particular use. This work investigates the possibilities to synthesize electrostatically stabilised liposome/iron oxide nanoparticle complexes that are able to release the encapsulated content by magnetic induction and should be stable under physiologically relevant conditions. This paper studies negatively charged dipalmitoylphosphatidylglycerol (DPPG) and cholesterol (Chol) liposomes along with iron oxide nanoparticles (SPIONs) in interaction with positively charged poly-L-lysine (PLL). This system shows a good promise of synthesizing functional complexes as poly-L-lysine has been proven for liposome stabilisation and SPIONs stabilisation as well. The most important factor of controlled synthesis of hetero-complexes with a defined size appears to be the charge ratio between each constituent element of the complex. Therefore, the PLL SPION interaction and liposome PLL interaction had been studied separately, before studying complexes of all three.

Vanadová redoxní průtočná baterie: studie membrán a vývoj monitorovacího systému

Autor: Jiří Charvát
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Pocič Jaromír, Ph.D.

Vysoký podíl elektřiny z nestabilních obnovitelných zdrojů v energetickém mixu je silně motivujícím faktorem vývoje nových stacionárních úložišť energie. Vanadová redoxní průtočná baterie (VRFB) se jeví jako ideální stacionární uložisko díky snadno modifikovatelné kapacitě, dlouhodobé životnosti a vysoké účinnosti. Cílem této práce je rozsáhlá optimalizační studie, vedoucí k výběru vhodné iontové výměnné membrány, která by zásadním způsobem mohla snížit cenu technologie VRFB. Hlavní použitou metodou je měření permeace iontů VO_2^+ skrz membránu a tato permeace charakterizuje samovybíjení baterie, které snižuje účinnost. Dalším cílem práce je vývoj monitorovacího systému VRFB umožňujícího charakterizovat stav nabití baterie na základě analýzy elektrolytu pomocí konduktometrie, spektrofotometrie a měření Nernstova potenciálu. Výsledky této práce ukazují vliv tloušťky a ekvivalentní hmotnosti membrány na selektivitu membrány. Na základě měření byly vybrány různé komerční membrány vhodné pro další testování. Také se podařilo vyvinout monitorovací systém, který byl ověřen měřeními modelových nabíjecích/vybíjecích cyklů v laboratorním článku s čistými elektrolyty. Tyto výsledky budou využity pro kalibraci monitorovacího systému. Systém bude instalován ve vyvíjené baterii o výkonu 2 kW a kapacitě 10 kWh.

Elektrochemická charakterizace jednotlivých iontově-výměnných částic

Autor: Lukáš Chroust
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
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 technik umožňujících měření elektrochemických a elektrokinetických vlastností jednotlivých iontově-výměnných částic. Převážná část prezentované práce je věnována vývoji a optimalizaci výrobních technik, které umožňují zkonstruovat potřebný experimentální systém pro charakterizaci iontově-výměnných částic, např. silikonová formička na zapouzdření částic akrylátem tak, aby stále umožňovaly iontovou výměnu. Dále byl vytvořen vlastní měřicí systém, do kterého se takto připravené jednočásticové membrány upevní a lze je sledovat pod fluorescenčním mikroskopem. Byla též získána první experimentální data. 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. Získané poznatky se ve finální fázi projektu využijí k návrhu zařízení pro point-of-care diagnostiku.

Studium kolektivního chování kapek dekanolu pomocí robota Evobot

Autor: Bc. Petra Janská
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jitka Čejková, PhD.

„Umělá biologie“ je vědní obor zabývající se studiem neživých systémů, které se chovají jako živé. Nedávno bylo zjištěno, že organické kapky mají podobné vlastnosti jako živé buňky, mohou se např. řízeně dělit či spojovat nebo se pohybovat chemotakticky v koncentračních gradientech. Naše laboratoř se zaměřuje na studium chování dekanolových kapek v prostředí dekanoátu sodného. Bylo ukázáno, že kapky dekanolu jsou schopné následovat přísady soli či hydroxidů, podobně jako se živé buňky pohybují v koncentračních gradientech. Dosud byly zkoumány jednotlivé kapky, předložená práce si však klade za cíl studovat populaci kapek. V přírodě se mnohobuněčné organismy skládají z většího počtu buněk, které jsou jednotlivě specializované a vzájemně mezi sebou spolupracují. Mnoho biologických systémů, jako jsou kolonie bakterií či řas, má tzv. kolektivní chování, kdy jsou jednotlivé buňky ve vzájemných vazbách a dohromady vytváří celek, který vystupuje jako samostatně řízený objekt. I v případě kapek byly pozorovány jevy podobné chování populace buněk. Experimenty s kapkami jsou obvykle prováděny manuálně a kapky dekanolu jsou pipetovány. Bude ukázáno, jak lze ke zjednodušení provádění experimentů využít robota Evobot - robotickou platformu založenou na systému open-source.

Kontrolované uspořádávání zlatých nanočástic do nanokomplexů

Autor: Bc. Martina Ježková
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.

Zlatu je věnována velká pozornost již po tisíciletí, kdy bylo a je využíváno jako materiál nejen v makroskopické podobě, ale i v podobě mikro- a nanoskopické. Se současným rozvojem nanotechnologií se pozornost upíná přímo na nanočástice zlata, které nabízejí širokou škálu možných aplikací odvíjejících se především od plasmonové rezonance, která je pro kovové částice typická. Pomocí zárodečně-růstové metody byly syntetizovány nanotyčinky zlata, dále pak kulové nanočástice, které byly samouspořádány emulzní metodou do dutých kulovitých mikroskopických útvarů. Částice a z nich vytvořené agregáty byly charakterizovány pomocí DLS, TEM, SEM a UV-VIS spektroskopie. Tyto nové superstruktury mohou být dále uspořádávány do větších celků, povrchově modifikovány navázáním proteinů, nukleových kyselin, syntetických polymerů apod. V lidském organismu mohou cíleně doručovat léčiva, najít uplatnění ve fototermální terapii a v neposlední řadě také jako biosenzory. Díky zmiňovaným vlastnostem mají velký aplikační potenciál v oblasti theranostiky. Mimo biomedicínské zaměření by pak mohly být zlaté agregáty využity například v oblasti fotovoltiky.

Odhad doby havarijního úniku CNG z osobního automobilu

Autor: Bc. Nicola Susanne Kubečková
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

Stlačený zemní plyn (CNG - Compressed Natural Gas) se stává v současné době velmi oblíbeným alternativním palivem pro osobní automobily. Otázkou stále zůstává bezpečnost CNG vozidel a možný únik plynu při havárii nebo technickém selhání. Hlavním problémem je těžko predikovatelný průběh havarijního úniku CNG z nádoby, a to značně komplikuje práci zásahovým jednotkám. V osobních automobilech je zemní plyn uchováván v jednom nebo více zásobnících, ze kterých je plyn následně veden vysokotlakým potrubím k motorovému prostoru. Každá z tlakových lahví má multifunkční uzavírací ventil s tepelnou pojistkou, která zabraňuje destrukci nádrže v důsledku vzrůstajícího tlaku uvnitř nádoby vlivem teploty okolí. Po překročení dané teploty (110 °C) dochází k roztavení materiálu uvnitř pojistky, a tím k uvolnění bezpečnostních otvorů, což dovolí plynu unikat ven z nádoby. Příspěvek je zaměřen na odhad doby úniku CNG z tlakové nádoby za použití klasické teorie výtoku reálných plynů ze zásobníků malým otvorem. Dále se zabývá modelováním teplotního pole vně a uvnitř nádoby pomocí počítačové dynamiky tekutin (CFD). Výsledky jsou porovnány s experimentálními daty naměřenými během velkorozměrových zkoušek požárů CNG automobilů v Ralsku v roce 2014.

Magneto-fluorescenční kompozity na bázi glukonových mikročástic

Autor: Peter Ševčenko
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D

Alternativou k syntetické přípravě mikročástic pro enkapsulaci a řízené uvolňování účinných látek je izolace vhodných mikročástic z přírodních zdrojů a jejich následná modifikace, která dodá materiálu další funkce a zvýší jeho atraktivitu pro následné využití. Cílem předložené práce je příprava a charakterizace kompozitních magnetických glukonových mikročástic obsahujících lipidové kompartmenty pro řízené vylučování účinné látky „na dálkové ovládání“ pomocí radiofrekvenčního ohřevu. Glukonové mikročástice byly získány sérií izolačních kroků z kvasinek. Uvnitř glukonových mikročástic byli vytvořeny lipidové kompartmenty obsahující karboxyfluorescein. Takto vytvořeným částicím byly pomocí různých metod uděleny magnetické vlastnosti, ve snaze o dosažení ohřevu pomocí vysokofrekvenčního magnetického pole a následného vyloučení enkapsulované látky do okolí. Pomocí UV-Vis spektrometrie byl učen obsah oxidů železa v částicích. Následně byla pomocí statického rozptylu světla sledována distribuce velikostí částic, která byla porovnána s mikroskopií a aglomeráty byli dále studovány pomocí metody SEM. Účinnost rádio-frekvenčního ohřevu byla vyhodnocena pomocí měření změny teploty suspenze připravených částic v puffru a rychlost uvolňování obsahu byla měřena pomocí fluorescenční spektrometrie.

Conductivity during emulsion copolymerization as a tool for determination of polymer particle size

Autor: Lukáš Tomaník
Ročník: B2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Polymer latexes produced by emulsion polymerization are widely used in paintings, adhesives and coatings. Real time optimisation of their production processes is a great challenge and it can become to be a significant benefit for current polymerization industry. We suggest a probe for conductivity measurements as a suitable on-line sensor, which might enable the on-line optimisation. Firstly, we determined with several measurements the percentage of present polymer phase in the latex. Then, we studied the dependency of the sample conductivity with respect to the fraction of organic phase in the emulsion, which is closely related to the amount of dissolved monomer inside the particles. Another point of our interest was the influence of temperature on conductivity, so the probe can be used at various temperature conditions. Our results suggest that conductivity probes are suitable as a cheap sensor for measuring average particle size in the latex and to determine the amount of dissolved monomer inside polymer particles. This approach will be used to improve several optimisation methods.

Sekce:	Chemické inženýrství II. posluchárna BS2, 8:00
Komise:	
Předseda:	doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.
Členové:	Ing. Lenka Schreiberová, CSc. Ing. Ladislav Konopka Ing. Anna Pittermannová Zástupce sponzora
Soutěžící:	Martin Kalný Dominik Kralík Nazerke Kurospayeva Ondřej Libánský Marek Michalko Jindřich Mrlík Rudolf Pečinka Martin Pecha Bc. Jiřina Pišlová Bc. Petr Polezhaev Bc. Ksenia Ponomareva

Sponzoři sekce Chemické inženýrství II

ŠKODA



ZeNTIVA
SPOLEČNOST SKUPINY SANOFI



SILON
Fibres • Compounds



LOVOCHEMIE a.s.
LOVOSICE



Lonza

Preparation of spherical multi-crystals for controlled particle dissolution

Autor: Martin Kalný
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Aleš Zadražil, PhD.

Crystallization is one of the most important processes in pharmaceutical industry, as it determines the size distribution of produced crystals and therefore downstream processing properties (e.g. flow-ability, compressibility). However, most crystalline active pharmaceutical ingredients (APIs) prepared by standard crystallization processes have poor properties and have to go through various energy-intensive operations such as comminution, milling, sieving and granulation, before being tableted. Alternative approach is to produce spherical crystal agglomerates (SAs), which have improved downstream processing properties, bioavailability and can also be directly compressed into tablets. In the presented work, we demonstrate a microfluidic-based method using extractive crystallization for producing monodisperse SAs with better dissolution rate. We also demonstrate use of this method for producing single crystals and composite particles with potential use in the pharmaceutical engineering. The effect of extraction rate and droplet size on the morphology of the SAs was studied. Characterization of the produced particles was done by optical microscopy, scanning electron microscopy (SEM) and x-ray micro-tomography. Release kinetics of the produced SAs were measured by conductimetry and compared to that of single crystals, in order to demonstrate their improved bioavailability.

Elektrokinetická separace biomolekul pro point-of-care diagnostiku

Autor: Dominik Kralík
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.

Glukózové nebo těhotenské testy jsou typické příklady systémů, které můžeme zařadit do skupiny tzv. „point-of-care“ diagnostických či screeningových testů. S příchodem mikrofluidiky jako inženýrského a technického nástroje pro manipulaci s biologickými vzorky nastal v této oblasti bouřlivý rozvoj s cílem vyvinout testy na včasnou a rychlou detekci celé řady nemocí, jako např. rakoviny, nemocí třetího světa a podobně. Tyto většinou mikrofluidní aparáty pracují tak, že separují vzorky krve, moči či dalších tekutin a detekují nějakou látku či molekulu zodpovědnou například za vznik nemoci. V této práci vyvíjíme elektrokinetický mikrofluidní separátor, který využívá vlastností iontově-výměnných membrán a jejich chování v elektrickém poli a dále skutečnosti, že biomolekuly jsou molekuly nesoucí elektrický náboj. V současné době se věnujeme optimalizaci podmínek elektrokinetické separace, kdy místo skutečných biomolekul využíváme fluorescenčních nebo absorpčních barviv či nabitých barviv (fluorescein, kongo červen a bromkresolová zeleň). V příspěvku bude stručně představen princip elektrokinetického separátoru, jeho výroba a experimentální výsledky dosažené s použitými barvivy.

Towards understanding of electrokinetic behavior of ion-exchange membranes

Autor: Nazerke Kurospayeva
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D.

Heterogeneous ion exchange membranes are widely used in electroseparation processes 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 in/in the membrane and the mobile ions in the electrolytes. When connected in DC electrical field, these membranes exhibit very interesting electrokinetic behavior. This electrokinetic behavior and its relation to the composition of these membranes are the main subjects of our research. We developed an experimental system that allows measurement of basic electrochemical characteristics of these membranes and at the same time optical and fluorescent observation of processes occurring in the adjacent electrolyte layers. The system is designed in such a way that the membranes can be first characterized with micro X-ray computed tomography or energy dispersive X-ray spectroscopy. Finding the links between the structure and the exhibited behavior is the main motivation of our work. The knowledge of this research will later be used for designing novel biosensors for point-of-care diagnostics that are based on the effects of biomolecules on the electrokinetics displayed by these membranes.

Vývoj systému dávkování paliva pro zinko-vzduchový palivový článek

Autor: Ondřej Libánský
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jaromír Pociďč, Ph.D.

Význam mobilních i stacionárních úložišť elektrické energie v dnešní době roste a nejinak tomu bude i v blízké budoucnosti. Konvenčním řešením využívající sekundární baterie začínají konkurovat palivové články. Největší úsilí bylo prozatím věnováno konstrukci vodíkového palivového článku, jehož většímu rozšíření brání vysoké výrobní náklady a vysoká energetická náročnost výroby vodíku. Přímým konkurentem vodíkové technologie jsou palivové články zinek-vzduch, které používají zinek jako palivo, protože je levný, netoxický a dobře recyklovatelný. Nedílnou součástí komerčního řešení zinko-vzduchových palivových článku je systém dávkování paliva. Dokonce i při laboratorním vývoji těchto článků je třeba čerpat zinkovou suspenzi do článku řízeně, aby nedocházelo k ucpávání systému, které může vést až k poškození jednotlivých částí. Cílem mé práce byl návrh, konstrukce a ověření funkčnosti systému dávkování paliva umožňujícího následný vývoj zinko-vzduchových palivových článků. S ohledem na možné budoucí zvětšování měřítka je základem vyvíjeného řešení ejektor vlastní konstrukce, který by dovoľoval použití odstředivých čerpadel místo peristaltických pump.

Electrospinning of solution of PVDF in DMAc and DMF

Autor: Marek Michalko
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Ing. Miroslav Šoóš, Ph.D.

Electrospinning is a very robust and easy method for production of materials in the form nanofibers. These can be consequently used for production of porous mats, filters, scaffold for tissue engineering etc. In this work effect of various properties of the polymer (PVDF) - solvent mixture, such as between viscosity, molecular weight and its concentration, organic solvent type (DMAc or DMF) and air moisture, on the diameter of the nanofibers will be investigated. Combination of various techniques will be used to characterize polymer-solvent mixture as well as produced nanofibers. Obtained data will be used to understand the influence of every parameters and their combination on the electrospinning process.

Vliv tepelné aktivace a kontaminace elektrolytem na uhlíkovou plst' pro vanadové redoxní průtočné baterie

Autor: Jindřich Mrlík
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Vanadová redoxní průtočná baterie je slibný systém pro akumulaci velkých množství elektrické energie. Ta je realizována elektrochemickými reakcemi mezi jednotlivými oxidačními stavy vanadu ($2+$ a $3+$ na záporné elektrodě a $4+$ a $5+$ na elektrodě kladné). Významná ztráta účinnosti baterie je způsobena pomalou kinetikou elektrodových reakcí, která se projevuje vysokým přepětím, které je třeba překonávat při nabíjení baterie a které snižuje vnitřní napětí baterie při vybíjení. Elektrody jsou nejčastěji tvořeny uhlíkovou plstí o velkém měrném povrchu. Pro dosažení dobré smáčivosti plsti vodnými elektrolyty je nezbytná tepelná úprava, jejíž účinek se však pro jednotlivé typy uhlíkových plstí výrazně liší. Hlavním cílem práce bylo nalezení optimálních podmínek teplotní úpravy plsti s cílem zvýšit intenzitu elektrodových reakcí. Pro elektrochemickou charakterizaci byla navržena a sestrojena elektrochemická cela, ve které byla prováděna cyklovoltametrická měření. Optimalizace podmínek teplotní úpravy plsti umožnila zvýšení účinnosti baterie a tedy snížení investičních nákladů technologie. Druhým cílem práce bylo studium kontaminace povrchu vláken plsti oxidem křemičitým, ke kterému dochází při elektrochemické výrobě vanadového elektrolytu, a možností uvedení plsti do počátečního stavu.

Vliv obsahu platinových kovů na účinnost adsorpce a redukce NO_x v automobilovém katalyzátoru

Autor: Rudolf Pečinka
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

V současnosti je kladen stále větší důraz na kvalitu životního prostředí, tudíž i na kvalitu ovzduší. V Evropské unii je pro automobily platný systém emisních norem EURO, v jejichž rámci jsou limity škodlivin postupně snižovány. Proto je třeba nadále vyvíjet nové účinnější technologie, které ve značné míře spoléhají na využití katalyzátorů. Cílem této práce je porovnat účinnost adsorpce a redukce oxidů dusíku (NO_x) na dvou automobilových katalyzátorech stejného typu, které se liší pouze množstvím platinových kovů obsažených v aktivní vrstvě. Porovnávanými vzorky byly průmyslové automobilové katalyzátory s ukládáním NO_x (NSRC). Tento typ katalyzátoru je používán pro motory spalující převážně chudou směs (s přebytkem kyslíku), například pro vznětové (dieselové) motory. Katalyzátor pracuje na principu periodické adsorpce NO_x během delší (několikaminutové) chudé fáze a jejich následné redukce během krátké (několikasekundové) bohaté fáze, kdy motor přechodně spaluje směs s přebytkem paliva. Měření bylo prováděno na laboratorní aparatuře řízené počítačem. Vzorek katalyzátoru byl uložen ve vytápěném průtočném reaktoru a vstupní plynná směs o požadovaném složení byla připravována pomocí regulátorů průtoku ze syntetických plynů. Výsledky ukazují mírně vyšší účinnost katalyzátoru s větším obsahem platinových kovů, tento efekt se však projevuje pouze v omezeném rozsahu teplot. Je tedy patrné, že prosté navyšování množství drahých kovů v katalyzátoru nevede k zásadnímu zlepšení funkce katalyzátoru.

Vývoj kompozitních uhlíkových bipolárních desek pro vanadové redoxní průtočné baterie

Autor: Martin Pecha
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D.

Vanadová redoxní průtočná baterie (VRFB) patří díky své bezpečnosti, vysoké účinnosti, životnosti a variabilitě designu mezi perspektivní stacionární úložiště elektrické energie. V sériovém uspořádání jsou sousedící články VRFB vzájemně odděleny prostřednictvím uhlíkové bipolární desky (CBP). Jejimi klíčovými parametry jsou vysoká elektrická vodivost, mechanická odolnost a chemická stabilita v prostředí kyselých elektrolytů. Vysoká cena a omezené rozměry komerčně dostupných CBP v současnosti představují významnou překážku ve vývoji účinných a cenově kompetitivních VRFB. V této práci je představen vývoj a optimalizace polypropylen-uhlíkové kompozitní bipolární desky. Na základě našich požadavků byly ve spolupráci s TIU Plast, a.s. (Neratovice) připraveny desítky CBP s různou formou a obsahem uhlíkových plniv. U připravených vzorků byly změřeny hodnoty odporů v příčném a podélném směru, jež poskytují komplexní informaci o vodivosti vzorku. Za tímto účelem byly navrženy a sestaveny univerzální aparatury umožňující přesná a reprodukovatelná měření odporů. Morfologie připravených desek byla studována pomocí mikroskopie atomárních sil, skenovací elektronové mikroskopie nebo počítačové mikrotomografie. Bylo zjištěno, že složení a struktura CBP hrají významnou roli při dosažení požadovaných vlastností.

Studium dynamiky adheze bublin v roztocích neonických surfaktantů

Autor: Bc. Jiřina Pišlová
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Pavlína Basařová

Adheze bubliny na povrch pevné částice je proces využívaný v mnoha průmyslových aplikacích. Příkladem může být například separační proces označovaný jako flotace, který využívá interakce bublin s částicemi. K separaci dochází na základě rozdílné smáčivosti separovaných látek. Flotace se využívá k separaci uhlí, minerálních rud, ale nově i k separaci směsí plastických hmot. Nejdůležitější částí celého procesu je adheze bubliny na částici, která je významně ovlivněna přítomností flotačních činidel – povrchově aktivních látek. Tato práce byla zaměřena na experimentální studium dynamiky adheze bubliny v roztocích neonických surfaktantů, jejichž hydrofilní část nenese žádný náboj a hydrofobní část je obvykle tvořena dlouhým uhlovodíkovým řetězcem. Pomocí vysokorychlostní kamery byla snímána adheze bublin při adhezi v roztocích o různých koncentracích a rovněž bylo měřeno dynamické povrchové napětí a dynamické smáčení. Bylo zjištěno, že jako flotační činidla nejlépe vyhovují surfaktanty s jednoduchou strukturou a krátkým hydrofobním řetězcem (terpineol). Naopak v roztocích polyetylen glykol etherů dochází k pomalému zachycení bubliny a bublina je nestabilní.

Elektrochemická charakterizace vícefázových toků v mikrofluidních zařízeních s protilehlými elektrodami

Autor: Petr Polezhaev, Bc.
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jiří Lindner, Ph.D.

Práce se zabývá elektrochemickou charakterizací (měřením impedance) jednofázových (deionizovaná voda, roztoky KCl) a vícefázových toků (segmentovaný tok kerosin/voda, kerosin/roztok KCl) v mikrofluidním zařízení z PMMA s protilehlými elektrodami. Protilehlé uspořádání elektrod přináší efektivnější měření elektrochemických veličin v mikrozařízení díky zcela jinému rozložení elektrického pole než u planárních uspořádání. V teoretické části práce je uveden popis detekčních metod v mikrofluidních zařízeních, zejména metod využívajících pole stejnosměrného či střídavého proudu. Dále je uveden popis dvoufázového toku (Taylorův tok, segmentovaný tok) a jeho aplikace v buněčné biologii, biochemii, chemické analýze a analýze potravin, proteomice atd. U charakterizace jednofázových toků se zaměřujeme na měření odporu (impedance) v závislosti na čase, průtoku, koncentraci KCl, frekvenci a amplitudě střídavého proudu. U charakterizace segmentovaného (dvoufázového) toku se zaměřujeme na změny odporu (impedance) s časem a mění se koncentrací roztoku KCl, změny oproti hodnotám jednofázových toků a výpočet velikostí segmentů z průběhu časových závislosti odporu či impedance a znalosti průtoku a průřezu mikrokanálku.

Studium fluktuací pH glukózového senzoru

Autor: Bc. Ksenia Ponomareva
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Lenka Schreiberová, CSc.

Cílem projektu je studium fluktuací signálu glukózového senzoru, který hladinu glukózy měří skrze hodnotu pH díky enzymatické oxidaci glukózy v přítomnosti enzymu glukózaoxidázy (GOx) a dvou substrátů – kyslíku a ferrikyanidu *in vitro* v míchaném průtočném reaktoru, který simuluje *in vivo* podmínky okolí GOx senzoru na bázi ferrikyanidu v případě zvýšené hladiny cukru v důsledku diabetu. Výsledky experimentů ukázaly, že tento reakční systém vlivem substrátové kompetice mezi ferrikyanidem a kyslíkem vykazuje fluktuace, přeskoky z jednoho oscilačního režimu na druhý, bistabilitu a kvazi-periodické oscilace způsobené excitabilitou, tzn. malé mechanické vzruchy způsobené peristaltickým čerpadlem vyvolávají v systému velkou chemickou odezvu v podobě hodnot pH. V systému *in vivo* by implantovaný elektrodový systém podobně reagoval na pulsy způsobené srdcem, což by vedlo k falešným údajům o hladině glukózy v krvi. Utlumit fluktuace hodnot pH se podařilo použitím vyšší koncentrace ferrikyanidu a vyšší koncentrace enzymu GOx. Předpokládáme, že nastavení parametrů mimo rámce parametrického prostoru odpovídající excitabilitě umožní použití tohoto systému pro spolehlivé stanovení obsahu cukru v krvi na implantovaných senzorech.

Sekce:	Chemické inženýrství III. posluchárna B03, 8:00
Komise:	
Předseda:	prof. Ing. Dalimil Šnita, CSc.
Členové:	Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D. Ing. Jan Haidl Ing. Jan Březina Zástupce sponzora
Soutěžící:	Juraj Petrík Ivana Pivarníková Zuzana Ruberová Milan Solík Bc. Jan Šmidrkal Ondřej Šrom Jiří Štěrba Bc. Lucie Štiková Bc. Jakub Tuček Jitka Urbánková Otakar Vinklář

Sponzoři sekce Chemické inženýrství III

ŠKODA



ZeNTIVA
SPOLEČNOST SKUPINY SANOFI



SILON
Fibres • Compounds



Lonza

Microfluidic preparation of double emulsion for droplet-based polymerase chain reaction

Autor: Juraj Petřík
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Aleš Zadražil, PhD.

The aim of this work is to prepare stable system designed for remotely controlled polymerase chain reaction (PCR). PCR amplifies specific sequences of DNA by repeating a cycle of different temperatures and it is one of the most ubiquitous research tools in many fields such as biotechnology, medicine or forensic science. There is a growing need for methods that can handle smaller sample volumes, and that could operate in other environments than the heated chamber of the thermocycler. A novel method of carrying out PCR in micro-droplets is explored in this work. To obtain a remote control over the system, iron oxide nanoparticles (NPs) are used as they can be navigated to targeted location by applying magnetic field and increase local temperature by radio-frequency heating. Since the presence of the NPs may have a negative effect on PCR via the adsorption of crucial reaction components, a proposed system was designed as a double emulsion water-in-oil-in-water (w/o/w), prepared in a microfluidic device. The inner water phase, containing PCR buffer, is separated from the oil phase with dispersed hydrophobic NPs (~20 nm). In the first step, the thermal stability of double emulsion, exposed to different temperatures, is tested by measuring the release of an encapsulated model substance of vitamin B12 (UV/vis spectrophotometry).

Manipulation with nanoscale objects using microelectrode array

Autor: Ivana Pivarníková
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Electric field is a widely used tool for the manipulation with micro- and nano- scale objects (particles and cells). Up to date, the motion of the objects was achieved by applying electric potential between a pair of electrodes, but the total number of electrodes used was relatively small. Here we present a microelectrode array (128x128 electrodes) for the particle manipulation in a way that was not possible before. As nano-objects, 100 nm small hollow particles liposomes with phospholipid bilayer were used. In order to enable manipulation with liposomes in the electric field, negatively charged DPPG liposomes with encapsulated fluorescence dye were synthesized. The electro-migration in the electric field was tested in a cell equipped with two gold-plated copper electrodes. The confocal microscopy was used to monitor the accumulation of liposomes on the positive electrode. When the polarity of electrodes was reversed, the migration of liposomes away from the electrode was observed. The microelectrode array was used to create a time-dependent 2D electric field. A pattern of negative electrodes in the shape of a rectangle with a square of positive electrodes in its centre was encoded. The negatively charged liposomes were pushed towards the positive centre. This has led to the local increase of the concentration around the positive electrode.

Příprava strukturovaných mikročástic pomocí mikrofluidních čipů

Autor: Zuzana Ruberová
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Příprava chemických robotů jakožto distributorů léčiv je nadějným cílem pro aplikaci v lékařské praxi. Jedná se o mikroskopické, synteticky vyrobené mikročástice, které jsou schopny pohltit aktivní látku, uchovat ji požadovanou dobu a na základě změny prostředí (teploty) ji vypustit do daného místa (orgánu). Pomocí mikrofluidiky se nám podařilo tyto částice vyrobit a zmenšit tak, aby jejich velikost dosahovala velikosti červených krvinek (do 10 μm), neboť se jedná o zásadní požadavek při intravenózním podání léků. Částice byly připraveny pomocí mikrofluidního čipu, výběrem vhodného poměru disperzní a dvou kontinuálních fází. Disperzní fáze obsahuje roztok alginátu (přírodní polymer, schopnost přeměny na hydrogel), železné mikročástice (magnetické vlastnosti, možnost radiofrekvenčního ohřevu) a liposomy (schopné enkapsulovat aktivní látku, při zvýšení teploty ji vypustit). Kontinuální fáze jsou olejové, z nichž jedna obsahuje vápenaté ionty způsobující gelaci alginátu a tím tvorbu částic. Výsledkem práce jsou částice v požadované velikosti (do 10 μm) a tvaru (kulaté).

Experimentální studium zkratových proudů ve vícečláňkové vanadové průtočné baterii

Autor: Milan Solík
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jaromír Pociďč, Ph.D.

Současným trendem v energetickém managementu jsou chytré přenosové soustavy. Nutností pro budování lokálních sítí jsou účinná a levná stacionární úložiště energie. Stacionární úložiště energie lze též použít pro stabilizaci dodávek elektřiny z obnovitelných zdrojů a tím umožnit rozšíření jejich instalované kapacity. Vanadová redoxní průtočná baterie (VRFB) je slibným kandidátem pro stacionární úložiště elektrické energie. Mezi přednosti této technologie patří vysoká účinnost cyklu, nezávislost kapacity na výkonu baterie a odolnost vůči vzájemné intoxikaci elektrolytů. Jedním z problémů bránících masivnějšímu uplatnění průtočných baterií jsou zkratové proudy, které tečou mezi jednotlivými články v baterii. Tyto nežádoucí proudy snižují Coulombickou účinnost baterie a mohou dokonce nevratně poškodit některé komponenty. Součástí zvětšování měřítka systému je proto rovněž optimalizace návrhu bateriového svazku vedoucí k minimalizaci zkratových proudů.

V této práci byly experimentálně zkoumány zkratové proudy v laboratorní tříčláňkové baterii s variabilním designem rozvaděče elektrolytu a měnitelným ohmickým odporem mezi jednotlivými články. Cílem bylo prozkoumat vliv proudového zatížení VRFB na vznik a velikost zkratových proudů.

Vývoj programu pro měření k_{La} ve fermentorech

Autor: Bc. Jan Šmidrkal
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha

Fermentory, aerované mechanicky míchané tanky, patří mezi často používané průmyslové aparáty. Jednou z důležitých transportních charakteristik popisující fermentory je objemový koeficient přestupu hmoty k_{La} . V rámci modernizace přístrojového vybavení na laboratorním fermentoru bylo třeba vytvořit nový program pro řízení procesu a sběr dat. K vytvoření programu bylo použito prostředí LabVIEW, které využívá grafický programovací jazyk. Programování probíhá pomocí vkládání a propojování jednotlivých bloků. Požadovaný program má sloužit k měření a zapisování analogových signálů z kyslíkových sond a tlakoměru a k zobrazení jejich časového průběhu. Program vysílá digitální signály k ovládání solenoidových ventilů a instrukce pro obsluhu k dalším zásahům do technologie. Součástí vytvořeného programu je i jeho jasné ovládání s barevnými kontrolkami a indikátory. Funkčnost programu byla ověřena na testovacích experimentech ve viskózní vsádce a porovnává s dříve získanými výsledky k_{La} . Do budoucna bude program použit pro měření k_{La} ve dvofázových viskózních systémech kapalina-plyn a také v třífázových systémech kapalina-plyn-pevná fáze.

Size and shape characterization of active pharmaceutical ingredient

Autor: Ondřej Šrom
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Ing. Miroslav Šoóš Ph.D.

Analysing API (active pharmaceutical ingredient) characteristics such as particle size distribution and shape properties are very important for efficiency of the production process. Attributes mentioned have strong influence on drug releasing characteristics. In my work, API's properties are obtained by using static light scattering (SLS), optical microscopy and scanning electron microscopy (SEM) techniques. The main reason of using more techniques is the ambiguous character of SLS data obtained, since they are strongly dependent on the particle shape. Nevertheless, the SLS technique is in comparison with SEM and optical analysis substantially faster and also analysing enormous number of particles, ensuring its statistical sufficiency. Therefore, understanding of SLS data interpretation is of great importance. In this work, the SLS measuring technique (together with SEM and optical analysis) is used for investigation of drug dissolution process.

Transportní omezení ve vícevrstvých automobilových katalyzátorech

Autor: Jiří Štěrba
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, PhD.

Za účelem snížení množství emisí spalovacích motorů jsou do výfukového potrubí zařazeny automobilové katalyzátory, které zajišťují snižování obsahu oxidů dusíku (NO_x), oxidu uhelnatého a uhlovodíků. Pevné částice jsou odstraňovány filtrem pevných částic. Pro splnění dnešních emisních limitů již často nestačí využít pouze jeden typ katalyzátoru, ale je nutné použít několik konvertorů řazených sériově za sebou. Toto zvyšuje rozměry a výrobní náklady celého systému – řešením může být nanesení více aktivních vrstev na jeden monolit katalyzátoru, což může kromě snížení prostorových nároků také zlepšit sdílení tepla. S rostoucí tloušťkou porézních vrstev se však může projevit difúzní omezení transportu plynů, které sníží celkovou účinnost katalyzátoru. Tato práce se zaměřuje na experimentální zkoumání tohoto omezení ve vícevrstvých katalyzátorech. Byly porovnány dvě sady vzorků katalyzátorů – na první byla nanесena pouze aktivní vrstva katalyzátoru LNT, na kterém jsou opakovaně adsorbovány a redukovány NO_x . Na druhé sadě byla stejná aktivní vrstva překryta vrstvou inertní a byl studován vliv transportního omezení způsobeného touto inertní vrstvou na funkci katalyzátoru LNT, a to jak na oxidaci CO a uhlovodíků, tak na adsorpci a redukci NO_x .

Porovnání měření koeficientu přestupu hmoty dynamickou metodou s použitím optické a polarografické kyslíkové sondy

Autor: Bc. Lucie Štiková
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Michal Kodač, Ph.D.

Koeficient přestupu hmoty je důležitou charakteristikou dějů, při kterých dochází ke sdílení hmoty - vyjadřuje míru intenzity sdílení hmoty mezi dvěma fázemi. K jeho zjišťování jsou používány kyslíkové sondy, jejichž měření je porovnáváno v tomto experimentu. Optická sonda zjišťuje přítomnost kyslíku nepřímo jako důsledek zhášení fluorescence fluoroforu. V současné době je tato sonda hojně využívána, neboť je snadno použitelná a poměrně levná. Měření však ukázalo, že její univerzálnost se projevuje podhodnocením k_{La} naměřených v kapalině. Pro zjišťování k_{La} v kapalině se tak jako lepší varianta ukazuje použití polarografické sondy. Její příprava může být poměrně náročná, citlivost sondy na kyslík je zde ovlivněna zejména výběrem vhodné membrány. Nevýhoda přípravy je však vykompenzována dobrými výsledky.

Vliv surfaktantů na adresování olejových kapek

Autor: Bc. Jakub Tuček
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: prof. Ing. Michal Přibyl, PhD.

Prostorové adresování kapek v mikrofluidních čípech může být efektivně použito pro syntézu chemických látek v malých objemech nebo v biomedicínské praxi k separaci bílkovin, nukleových kyselin či jiných biomolekul. Tato práce je zaměřena na adresování olejových kapek v přítomnosti především ionogenních surfaktantů pomocí elektrického pole. Surfactanty jsou obvykle organické nesoiměrné molekuly s amfifilním charakterem. Amfifilní charakter je dán chemickým složením těchto molekul, které se skládají z hydrofilní polární části (hlavička) a z nepolární hydrofobní skupiny (ocásek). Ve vodě rozpuštěné surfaktanty se tedy snadno adsorbují na fázových rozhraních typu plyn-voda, olej-voda a podobných. Na fázovém rozhraní dochází k orientaci hydrofobní části surfaktantu do plynné (olejové) fáze, zatímco hydrofilní hlavička zůstává ve fázi vodné. V rámci práce je zkoumán vliv ionických a neionických surfaktantů na pohyb olejové kapky v koncentračním gradientu surfaktantů a dále v elektrickém poli. Přítomnost surfaktantů na mezifázovém rozhraní může ovlivnit polaritu a velikost povrchového náboje olejové kapky v závislosti na použitém surfaktantu. Podařilo se charakterizovat působení koncentračního gradientu různých surfaktantů na pohyb olejové kapky, který je založen na Marangoniho efektu. Další experimentální studie zaměřená na vliv elektrického pole k adresování olejových kapek v přítomnosti surfaktantů ukázala, že Marangoniho efekt má na pohyb kapek výrazně vyšší vliv než samotné elektrické pole. Výsledky těchto experimentů společně s jejich diskuzí tvoří hlavní náplň této práce.

Studium transportu liposomů přes kožní bariéru

Autor: Jitka Urbánková
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D.

Topická aplikace liposomů má již dlouhou tradici a je využívána jak v dermatologických tak kosmetických přípravcích. Liposomy mají schopnost zvýšit penetraci účinné látky do hlubších vrstev kůže a cíleně směřovat účinnou látku do místa terapeutického působení. Mechanismus tohoto působení liposomů dosud není zcela objasněn. Cílem této práce bylo prozkoumat vliv různého složení, náboje a velikosti liposomů na průnik fluorescenčně značené látky do kůže. Pro in vitro experimenty byla využita Franzova cela, do které byla vložena prasečí kůže a aplikován vzorek fluorescenčně značených liposomů. Po 20 hodinové penetraci, byla kůže vyjmuta a dále vyhodnocena pomocí dvou metod: obrazové konfokální mikroskopie a kvantifikační metody tzv. Tape strippingu. Kombinace těchto dvou metod pomohla podhalit mechanismus účinku liposomů na kůži.

Investigation of protein-nanoparticle affinity by advanced analytical methods

Autor: Otakar Vinklář
Ročník: B3
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

The use of drug delivery systems employing nanoparticle carriers is spreading rapidly. In some cases, undesirable opsonization of these particles with blood proteins occurs after intravenous administration which leads to lowering the plasmatic half-life and accumulation of nanoparticles in Reticulo-Endothelial System.

In this work opsonization is reduced by employing stealth surface modifications e.g. additional covalently bound poly (ethyleneglycol) (PEG) and poly N-(2-Hydroxypropyl) methacrylamide (pHPMA) chains with different surface density.

The data from UV spectrometry and sodium dodecyl sulfate - polyacrylamide gel electrophoresis (SDS-PAGE), which were employed to determine unspecific binding of serum proteins to the model silica nanoparticles (characterized by Transmission electron microscopy (TEM) and Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR)) in *in vitro* experiments with blood serum will be shown and discussed in the presented work.

Sekce:	Chemické inženýrství IV. posluchárna B139, 8:00
Komise:	
Předseda:	doc. Ing. Michal Příbyl, Ph.D.
Členové:	RNDr. Petr Pokorný, Ph.D. Ing. Kateřina Punčochová Ing. Jaroslav Tihon, CSc. (ICPF CAS) zástupce sponzora
Soutěžící:	Bc. Aleš Ďuriš Bc. Romana Fojtíková Bc. Tereza Herinková Bc. Michal Janda Bc. Simon Jantač Bc. Elvira Khafizova Bc. Anna Krejčí Bc. Denisa Lizoňová Bc. Petr Novotný Bc. Martina Živčáková

Sponzoři sekce Chemické inženýrství IV

ŠKODA



ZeNTIVA
SPOLEČNOST SKUPINY SANOFI



SILON
Fibres • Compounds



Lonza

AFM characterization of adhesive forces on polyethylene

Autor: Bc. Aleš Ďuriš
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Adhesive properties of polymers significantly influence the agglomeration of polymer particles, which occurs as an undesirable effect in the manufacturing process of polyethylene. Agglomeration poses a big problem in fluidized bed reactors, in which polymers are produced, since it can cause wall sheeting or plugging of the reactor and consequently lead to the shut-down of the reactor, which is connected with large economical losses. In this contribution are the adhesive properties of polyethylene studied using the atomic force microscopy (AFM). The theory behind the force spectroscopy measurement and the interpretation of results is discussed. We studied the temperature dependence of the adhesive forces in order to improve our knowledge of the adhesion mechanism that is related to the sheeting process in industrial reactors. The polymer-polymer adhesive interaction was studied for the sake of the qualitative comparison to the interaction between the AFM tip and the polymer. For this purpose, we produced cantilevers with single attached polymer micro-particle. This allows us to use them as a probe in AFM measurements to study the adhesive interaction between polyethylene and various surfaces.

Příprava suspenzí léčivých látek pomocí vysokotlaké homogenizace

Autor: Bc. Romana Fojtíková
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Ing. Šoóš Miroslav, Ph.D.

V současné době se ve farmakoterapii objevuje stále více léčivých látek, které jsou ve vodě špatně rozpustné (téměř 40% používaných léčivých látek). Jeden z možných způsobů zvýšení biologické dostupnosti léčivé látky je zmenšení velikosti částic, což vede ke zvýšení efektivity těchto látek a umožňuje jejich parenterální (injekční) podání ve formě suspenzí. Obzvláště u depotních forem léčivých látek, tedy u látek s prodlouženým uvolňováním, je parenterální podání zásadní pro správnou aplikaci. V této práci se zaměřujeme na přípravu injekční suspenze látky v depotní formě, která je určena k léčbě neurodegenerativního onemocnění. Pro přípravu suspenze této látky používáme metodu vysokotlaké homogenizace, která umožňuje redukovat velikost částic pomocí aplikace vysokého tlaku. Zvyšování aplikovaného tlaku v systému způsobuje nárůst smykového napětí, které vede k rozpadu částic v turbulentním toku. V této studii byl zkoumán vliv homogenizačního tlaku a počátečního složení na stabilitu a velikost částic výsledné suspenze. Vlastnosti suspenzí byly následně charakterizovány řadou analytických metod (DLS, SLS, optická mikroskopie, SEM, měření kontaktních úhlů). Vysokotlakou homogenizací jsme získali stabilní suspenzi s částicemi o velikosti kolem 1 μm , což ukazuje, že tato metoda je vhodná pro medicínské účely.

Použití Voroného diagramu pro modelování transportu hmoty a tepla

Autor: Tereza Herinková, Bc.
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Zdeněk Grof, Ph.D.

Voroného diagram, nebo také Voroného teselace, je matematický nástroj, který používáme pro rozdělení prostoru pomocí předem dané množiny bodů. Voroného teselace je využívána v různých vědeckých odvětvích, například v biologických, chemických či geografických modelech, ale také v počítačové grafice či kybernetice. Široké uplatnění nachází i v řešení různých geometrických problémů. Koncept diskrétních elementů DEM (Discrete Element Method) původně vyvinutý pro granulární systémy se dá využít i pro modelování reakčně-transportních dějů v systémech, kde dochází k výrazným změnám tvaru. Příkladem takového děje je vylučování farmaceuticky aktivní látky z tablety doprovázené botnáním a následně i kompletním rozpuštěním tablety. Pro modelování rychlosti transportu pomocí DEM je problematické určení plochy mezi sousedními elementy. Zde je možno využít Voroného teselace k vyjádření těchto jednotlivých elementů jako Voroného buněk tvořených mnohostěny. Cílem práce bylo sestavit program, který z diskrétních elementů (tj. souřadnic středů koulí) provede 3D Voroného teselaci a vypočítá plochy mezi sousedními buňkami.

Strategie pro zvýšení konverze škodlivin v automobilovém katalyzátoru pomocí řízených oscilací složení výfukového plynu

Autor: Bc. Michal Janda
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Automobilové katalyzátory jsou v dnešní době nejrozšířenější technologií pro přeměnu škodlivin vycházejících ze spalovacích motorů osobních automobilů. Toxický oxid uhelnatý (CO), zbytky nespálených uhlovodíků (HC) a oxidy dusíku (NO_x) jsou konvertovány na zdraví neškodnou vodu, oxid uhličitý a dusík. Se zvyšujícími se nároky na dosahovanou účinnost rostou i náklady na výrobu katalyzátorů. Je třeba hledat také strategie pro co nejefektivnější řízení provozu katalyzátoru, tak aby bylo dosaženo co nejvyšší konverze. Tato experimentální práce zaměřuje na zvyšování účinnosti provozu katalyzátoru zejména při nižších teplotách, odpovídajících prvním minutám po startu automobilu. Za takových podmínek jsou katalytické reakce pomalé a konverze je omezena reakční kinetikou. Pomocí řízených oscilací kyslíku ve výfukovém plynu lze dosáhnout při stejné teplotě vyšších konverzí škodlivin než v případě konstantního složení. Vliv amplitudy a periody koncentračních oscilací ve výfukovém plynu na konverze CO, HC a NO_x je zkoumán při použití trojcestného katalyzátoru (TWC) a trojcestného katalyzátoru se schopností adsorbovat oxidy dusíku (TWNSC). Optimální parametry oscilací jsou diskutovány v souvislosti s adsorpční kapacitou katalytického povrchu.

Development of methodology for the experimental characterization of electrostatic charging of polymer powders

Autor: Bc. Simon Jantač
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Charging of objects caused by their mutual friction is called triboelectric charging and is still poorly understood. Triboelectric charging is responsible for severe industrial problems, occurring mainly during the production and storage of insulating powders like polyethylene (PE), flour or drugs. Specifically PE is produced in fluidized-bed reactors, where PE particles charge due to collisions with the reactor wall and with themselves. Such charged particles can form wall sheets and choke the reactor. In order to better understand the triboelectrification, we complemented our previously built apparatus (slide and Faraday's pail) with high speed camera and measured particle-wall charging dynamics. We observed more extensive charging at higher temperatures. This increase can be explained by temperature-dependent elastic properties of particles (bigger contact area) or by the excitation of electrons on the particle surface. To determine which of these effects affects the charging the most, we measured the particle elasticity (restitution coefficient) as a function of temperature. Our results of temperature dependent charging provide not only the important information for industry, but when combined with the measurements of particle elasticity represented by restitution coefficient they broaden our insight into the charging mechanism itself.

Studium adresování kapek pomocí elektrického pole v systému dvou nemísitelných vodných fází

Autor: Bc. Elvira Khafizova
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: prof. Ing. Michal Příbyl, Ph.D.

Cílené adresování kapek v mikrofluidních čípech představuje důležitý nástroj k uskutečňování analýz biologických vzorků, kultivace buněk, výrobu speciálních chemikálií nebo malých částic. K adresování kapek ve složitých mikrostrukturách lze s výhodou využít vnějšího elektrického pole vloženého mezi počáteční a cílové místo. Nejčastěji používaným dvoufázovým systémem v mikrofluidních aplikacích je systém voda – organické rozpouštědlo, který však není vhodný pro bioaplikace, protože biologické látky mohou v přítomnosti organických rozpouštědel denaturovat. Proto dobrou volbou pro aplikace s biologickým materiálem je využití chemického systému se dvěma nemísitelnými vodnými fázemi. Cílem této práce je studium adresování kapek pomocí elektrického pole v systému dvou nemísitelných vodných fází, které jsou tvořeny vodným roztokem polyethylenglykolu (PEG) se střední molekulovou hmotností 4000 g/mol a vodným roztokem hydrogen-fosforečnanu draselného a dihydrogenfosforečnanu draselného s hodnotou $\text{pH} = 7$. Z experimentů v otevřeném čipu plyne, že se kapka směsi fosforečnanů na povrchu PEGu vlivem stejnosměrného elektrického pole pohybuje k záporně nabitě elektrodě. V této práci se studuje chování dvoufázového systému v uzavřeném čipu štěrbinového typu v závislosti na orientaci a intenzitě elektrického pole.

Studium růstu buněk na polymerních strukturách

Autor: Bc. Anna Krejčí
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, PhD.

3D buňkové modely představují propojení mezi *in vitro* 2D buňkovými kulturami v podobě monovrstvy buněk a *in vivo* zvířecími modely. Zatímco 2D kultury nedostatečně mimikují podmínky v živém organismu, nevýhodami zvířecích modelů jsou kromě etických problémů i vysoké finanční náklady a komplexnost živého organismu. Proto se tato práce zabývá kinetikou růstu buněk na polymerních strukturách vytvořených na 3D tiskárně z biokompatibilního materiálu – kyseliny poly-L-mléčné. Na kultivaci byly použity dvě buňkové linie kolorektálního karcinomu: HT-29 buňky a DLD1 buňky. Růst buněk na strukturách byl pozorován mikroskopem a viabilita buněk měřena metodou barvení trypanovou modří. Buňky rostly na povrchu struktur bez potřeby modifikace povrchu kontinuálně po dobu 2 týdnů, následně porostly celý povrch a vytvořily několik vrstev. Z těchto polymerních struktur porostlých buňkami bude v dalším kroku vytvořen 3D perfuzní model tkáně pro studium specifické adheze povrchově modifikovaných nanočástic na povrch rakovinných buněk.

Vplyv povrchovej funkcionalizácie na interakciu nanočastíc s biomolekulami

Autor: Bc. Denisa Lizoňová
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Chemický robot je multikomponentná nano/mikro častica vyvíjaná pre účely cieleného transportu liečiv, či diagnostiku patologických procesov (rakovina) v organizme. Schopnosť tejto častice nájsť a naviazať sa na nádor je sprostredkovaná interakciou protilátky s antigénom prítomným na bunkovej membráne. Pokiaľ však dochádza k adsorpcii krvných proteínov na povrch častíc (opsonizácia), značne sa znižuje ich plazmatický polčas (vychytávanie makrofágmi a ukladanie v orgánoch retikuloendoteliálneho systému ako napríklad pečeň a slezina) a nemôžu tak efektívne plniť svoj účel. Táto práca sa zaoberá skúmaním vplyvu povrchovej úpravy modelových fluorescenčných kremičitých nanočastíc na adsorpciu krvných proteínov na ich povrch. Porovnávané je pokrytie kovalentne naviazanými reťazcami polyetylén glykolu (PEG) o rôznej dĺžke (M_w 2000 a 5000) a pokrytie kopolymérom N-(2-hydroxypropyl) metakrylamidu (pHPMA). Ďalej je skúmaná možnosť kovalentného naviazania monoklonálnej protilátky IgG M75 (protilátka proti karbonickej anhydráze IX preexprimovanej na hypoxických tumoroch, ako napríklad kolorektálny karcinóm) na modifikované častice a schopnosť týchto častíc viazať sa na antigén (ELISA-like test).

Hydrodynamické režimy toku v ejektoru

Autor: Bc. Petr Novotný
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Michal Kordač, Ph.D.

Ejektorové systémy nacházejí uplatnění zejména jako proudová čerpadla a vývěvy, jejich potenciál je však rozsáhlejší. Ejektor je možno s výhodou použít jako vysoce účinný distributor plynu v g-l reaktorech, probublávaných kolonách aj. Charakteristiky přestupu hmoty v ejektoru – k_{La} , jež dosahují řádově 10 s^{-1} – jsou však v literatuře poměrně vzácné. Proto se v naší laboratoři intenzivně věnujeme komplexní studii vlivu geometrických a tokových parametrů ejektoru na přestup hmoty. Při měření k_{La} s některými námi používanými tryskami bylo zjištěno neobvyklé hydrodynamické chování ejektoru. Při specifickém průtoku kapaliny dochází ke skokovému nárůstu přisávání plynu, jež zatím nebylo nikde publikováno.

Cílem prezentované práce bylo nalézt příčiny tohoto jevu. Takřka detektivní prací byla identifikována klíčová místa trysek, jež způsobují toto anomální chování. Experimenty na mnou vyrobených tryskách bylo potvrzeno, že přítomnost skokové změny režimu toku je podmíněna ostrou hranou mezi konusem a hrdlem trysky. Ukazuje se, že tento zdánlivě drobný rozdíl v provedení vnitřního povrchu trysky může zásadně ovlivňovat hydrodynamické chování celého ejektoru, dokonce i výrazněji, než speciální prostředky k tomu určené (swirl).

Design a príprava magneticky riadených nanoreaktorov

Autor: Bc. Martina Živčáková
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Mgr. Jaroslav Hanuš, PhD

Nanoreaktory na bázi lipozómových agregátov predstavujú systém, ktorý umožňuje prevádzať definované vymedzené chemické reakcie v nanomerítke. Zvolením vhodného typu lipidu, polyméru a aktívnej zložky môžeme získať stabilné reaktory, ktoré budú riadené vonkajším podnetom. Ako základný systém sme zvolili nabitý lipozómy agregované pomocou opačne nabitého polyméru. Úlohu aktívneho spúšťača majú magnetické nanočastice, ktoré majú za úlohu porušiť membránu lipozómov na základe rádiovýkvenčného ohrevu. Prvým študovaným systémom bol DPPG s chitosánom. Pri tomto systéme sme ukázali, že funguje agregácia lipozómu s opačne nabitým polymérom, ale problémom bola zlá rozpustnosť chitosánu pri neutrálnom pH. Druhý študovaný systém pozostával zo záporne nabitého lipidu - DPPG v kombinácii s cholesterolom v pomere 8:1. Ako polymér sme zvolili poly-l-lysín, ktorý je kladne nabitý polymér. Ako aktívnu zložku sme použili citrátom stabilizované magnetické nanočastice. Študovali sme štruktúru daných komplexov, ale i schopnosť vylúčenia enkapsulovanej látky, pričom hlavným cieľom bolo nájsť vhodný pomer všetkých troch komponentov tak, aby agregáty boli stabilné a reagovali na rádiovýkvenčný ohrev.

Sekce:	Chemické inženýrství V. místnost B141b, 8:00
Komise:	
Předseda:	doc. Dr. Ing. Juraj Kosek
Členové:	Ing. Zdeněk Slouka, Ph.D. Ing. Jiří Ira Ing. Petr Stanovský, Ph.D. (ICPF CAS) zástupce sponzora
Soutěžící:	Bc. Vojtěch Klimša Bc. Jiří Kolář Bc. Petr Kovář Bc. Tomáš Kracík Bc. Lenka Krajáková Bc. Pavel Kupka Bc. Michal Obergruber Bc. Václav Pelc Bc. Radim Petříček Bc. Alexandr Romanov Bc. Helena Suchanová

Sponzoři sekce Chemické inženýrství V

ŠKODA



ZeNTIVA
SPOLEČNOST SKUPINY SANOFI



SILON
Fibres • Compounds



Lonza

Agregace mikročástic připravených rozprašovacím sušením

Autor: Bc. Vojtěch Klimša
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

V současném farmaceutickém, či potravinářském průmyslu je problémem neefektivnost doručení aktivní látky na místo určení. Důvodem je vysoké naředění během transportu, vysoká reaktivita a krátký poločas rozpadu. Tato práce si za cíl klade tento problém překonat a navrhnout způsob, jak produkovat účinnou látku v dostatečném množství a kontrolovaným způsobem *in situ*, tj. přímo na místě určení z neaktivního prekursoru. Vytvořením částic s opačným povrchovým nábojem a následnou řízenou agregací těchto dvou typů nosičů pak lze poskládat výsledný mikročásticový reaktor. Pro tvorbu částic byly zvoleny bio-polymery alginát sodný a chitosan. Částice byly připraveny metodou rozprašovacího sušení nekonvenční třífázovou a klasickou dvoufázovou tryskou. Experimentální studie, jež je objektem prezentované práce, mapuje vliv procesních parametrů na strukturu a stabilitu připravených mikročástic a rychlost tvorby a charakter agregátů v závislosti na poměru použitých částic, či míře zesíťování polymerů.

Polymeric foams: digital reconstruction and morphology study

Autor: Bc. Jiří Kolář
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Polymeric foams have a broad range of usage from disposable packaging of fast-food, the cushioning of furniture to insulation material. Foams can be created by a number of processes. The most important ones are foam expansion, extrusion and reaction foaming. The resulting foam can be described as a polymeric matrix with air bubbles or air tunnels incorporated in it, which is known as either closed-cell or open-cell structure. Application properties of foams are closely related to its morphology and used materials. For heat transfer, sound propagation modeling and prediction of properties in general, it is necessary to have the digital representation of the inner structure of polymeric foams. The majority of reconstruction algorithms are based on Voronoi tessellation. However, foam structures prepared by a simple Voronoi tessellation do not respect Plateau's law for angles between cell walls. On the other hand completely symmetric models like Kelvin or Weaire-Phelan foams are barely reached in real polymeric foams, which usually show distribution of cell sizes. Therefore we pursued developing a method for generating 3D foam structure with placed emphasis on similarity to real foams. We used simulated annealing and program for minimization of surface energy to obtain foam with desired cell size distribution. Finally, generated and real foams were compared.

Vývoj experimentálních zařízení pro studium toku tekutých kovů (Ga, In, Hg) v elektrickém a magnetickém poli

Autor: Bc. Petr Kovář
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: prof. Ing. Dalimil Šnita, CSc.

V rámci této práce byly zkoumány vlastnosti eutektické slitiny gallia a india, která je za laboratorních podmínek v kapalném stavu. Byly také diskutovány možnosti využití této slitiny, především možnost využití Lorentzovy síly, způsobené přítomností elektrického a magnetického pole, jako možného principu pro čerpání a dávkování elektronově vodivých tekutin v mikrofluidních zařízeních (elektromagnetohydrodynamické čerpadlo). Dále byly vyvíjeny a zkoumány aparatury využívající Lorentzovy síly k čerpání elektronově vodivých tekutin.

Využití reverzní osmózy ke zpracování primárního chladiva v jaderných reaktorech

Autor: Bc. Tomáš Kracík
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha

V jaderných reaktorech je využíván vodný roztok kyseliny borité ke chlazení primárního okruhu a absorpci uvolněných neutronů. Kvůli potřebě recirkulace vodného roztoku kyseliny borité je nutné sledování koncentrace přidávaných látek (draslík, amoniak) a čištění od radioaktivních částic, které v primárním chladivu vznikají. Vodný roztok primárního okruhu může být čištěn reverzní osmózou. Účinnost reverzní osmózy je závislá na koncentraci sledované složky a pH. Cílem práce bylo zkoumání schopnosti čištění roztoku kyseliny borité od radioaktivních látek pomocí reverzní osmózy a sledování změny koncentrací složek ve vystupujících prouděch (retentátu a permeátu). Přítomnost radioaktivních látek byla simulována přidáním neaktivních prvků do vsádky - konkrétně stroncia a cesia. Experimenty studující schopnost čištění roztoku kyseliny borité proběhly na poloprovozní aparatuře ve spolupráci s Centrem Výzkumu Řež. Vzorke na analýzu jednotlivých složek byly odebírány v pravidelných intervalech během celého měření, aby mohla být zkoumána nejenom výsledná změna koncentrace, ale i průběh koncentrace v čase. Změny koncentrace byly zatím vyhodnoceny pro kyselinu boritou, amoniak a draslík, částečně také pro stroncium a cesium. Experimenty ověřený popis reverzní osmózy může přispět k úspoře nákladů při čištění primárního chladiva jaderných elektráren.

Sorpce kapalných penetrantů v polyolefinech

Autor: Bc. Lenka Krajáková
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Polyolefiny, zejména polyetylen (PE) a polypropylen (PP), jsou materiály s velmi užitečnými a spotřebitelsky zajímavými vlastnostmi, a proto patří na první příčky v produkci syntetických polymerů. Výroba polyetylenu katalytickou polymerací probíhá buď plynně-disperzními nebo kapalně-disperzními procesy. Termodynamika sorpce kapalných penetrantů je relevantní pro kapalně-disperzní polymerační procesy. Otevřená literatura ale neobsahuje systematicky proměřená sorpční data pro kapalně penetranty pro široké rozmezí hustot PE. V mojí práci jsou popsány sorpční experimenty pro zjištění rozpustnosti kapalného penetrantu (n-hexanu) v PE. Na základě nové metodiky měření sorpce byly provedeny experimenty pro širokou škálu vzorků PE a teplot. Další část práce je věnována bobtnání vzorků PE v kapalně fázi. Bobtnací experimenty v kapalně fázi vyžadovaly úpravu stávající videomikroskopické aparatury a také vývoj nových postupů pro měření a vyhodnocování dat. Na vzorcích PE s různou hustotou byla proměřena závislost bobtnání PE na jeho hustotě, která je dána různým obsahem krystalické a amorfni fáze. Výsledky měření jsou zajímavé nejen z pohledu samotného výzkumu, ale zároveň slouží i jako vstupní data pro kontrolu a optimalizaci samotného výrobního procesu.

Využití disipativní částicové dynamiky pro studium koalescence a reologie v emulzních systémech

Autor: Bc. Pavel Kupka
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství chemického inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

V této práci se zaměřujeme na studium emulzních systémů, které jsou předmětem zkoumání či výroby v nepřeberném množství aplikací. Jde o systémy dvou a více navzájem špatně mísitelných kapalných složek. Příklady emulzí lze nalézt v potravinářství, ve farmacii, v barvách a ve výrobě plastických hmot. Stabilita emulzních systémů je ovlivněna koalescencí a rozpadem dispergovaných částic. Oba tyto jevy se odehrávají na velice malých prostorových a časových měřítkách (na tzv. meso-měřítku), kde jsou experimentálně téměř neměřitelné. Rozhodli jsme se přistoupit k těmto důležitým jevům pomocí počítačového modelování, konkrétně jsme využili metodu Disipativní částicové dynamiky (DPD). Jde o stochastickou simulační metodu zaměřenou na jevy odehrávající se právě na meso-měřítku. DPD pracuje s diskretizovanými elementy částic velkých pouze několik molekul dané látky a ty pak spolu interagují konservativními, disipativními a náhodnými silami. V současné době jsme schopni popsat charakteristický čas koalescence a ukázat vliv surfaktantů na povrchové napětí a stabilizaci dispergovaných částic. Nyní je výzkum zaměřen na studium viskozity, která silně ovlivňuje chování emulzních systémů a jakožto přímo měřitelná veličina je dobrým nástrojem pro validaci modelu. Ta je vyhodnocována v systémech se stříhovým polem pomocí tensoru napětí, díky němuž dokážeme vyhodnotit i složitější chování, již neodpovídající Newtonovským tekutinám.

Modelování hoření v programu FireFOAM

Autor: Bc. Michal Obergruber
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

V požárním bezpečnostním inženýrství se stále častěji začíná využívat numerických modelů společně s matematickým modelováním tekutin CFD pro předpověď vzniku a šíření požárů. Modely poskytují informace o množství uvolněného tepla, teplotním poli a rozložení tlaku a používají je při práci vyšetřovatelé příčin, preventisté popř. odborníci na návrh stabilních hasicích zařízení v budovách. Cílem příspěvku je ukázat možnosti využití open-source modelovacího nástroje FireFOAM na příkladu kontejneru ve výcvikovém středisku HZS ve Zbirohu. V rámci výcviku se hasiči seznamují a zdokonalují v technikách hašení v uzavřených prostorech za různých podmínek, zde simulovaných jako odlišné výkony hořáků umístěné v kontejneru. Řešeným problémem je návrh různých situací, se kterými se můžou hasiči při výcviku potkat a tak zabezpečit podmínky tak, aby při nich nedošlo k újmě na zdraví. Jedná se především o působení plamene a vzniklého radiačního tepla na zásahový oděv. Bude ukázáno, jak může program FireFOAM předpovědět teplotní pole vzniklé z hořáků na propan v uzavřených místnostech.

Mathematical modelling of flow and diffusion inside iGC column

Autor: Bc. Václav Pelc
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Commonly used method to determine thermodynamic and transport properties of newly developed materials is inverse gas chromatography. It works on a similar principle as the classic gas chromatography, but instead of composition analysis of gaseous phase, we use known gases to estimate properties of the column's filling. Mathematical model of the column helps to understand physical processes in the system, and it also allows to determine the tested properties. Our model is represented by a combination of Navier-Stokes equations to describe gas flow and diffusion equation of a gas pulse inside column as well as in the sample. To evaluate such model we use software FEniCS – mathematical software, which solves systems of PDE using a finite element method. Comparison between a solution of a simple previously analysed system and its solution obtained by FEniCS was made. Furthermore, an exemplary model of a circumfluence of an elementary solid body was studied with the spread after injecting a short pulse of another gas into the system. This work might be used to develop a rigorous model of processes in the inverse gas chromatography column. The model should allow us to carry out a parametric study, compare the results to experimentally obtained data and to better estimate parameters of various column fillings.

Měření osmotického tlaku koncentrovaných roztoků kyseliny borité

Autor: Bc. Radim Petříček
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha

V chladících okruzích jaderných elektráren je třeba v chladicí vodě (demineralizovaná voda) udržovat přesné koncentrace kyseliny borité, které je nutno v čase měnit. Tento požadavek souvisí s klesající aktivitou jaderného paliva během každé kampaně, kdy je třeba plynulými změnami koncentrace kyseliny borité štěpnou reakci moderovat. Cílem prováděného výzkumu je příprava řízení poloprovozní membránové separace, aby bylo možno efektivně vést experimenty v jaderné elektrárně. K tomu je třeba numerického modelu membránové separace kyseliny borité z jejích roztoků, ve kterém je stěžejním problémem správný výpočet osmotického tlaku kyseliny borité, která má v závislosti na koncentraci a pH roztoku značně složité chování a její osmotický tlak nelze spolehlivě teoreticky předpovědět.

Testování 3D tiskárny Objet30

Autor: Bc. Alexandr Romanov
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: prof. Ing. Šnita Dalimil, CSc.

Tato práce je zaměřena na testování 3D tiskárny Objet30. Tiskárna je založena na metodě PolyJet, která vytváří postupně 3D objekty pomocí tekutého fotorezistu, nanášením vrstvy po vrstvě a následným vytvrzením pomocí UV-záření. Byla provedena řada testů: odolnost materiálů, omezení tiskárny, typ povrchu při tisku. Výsledkem práce byly různé objekty: mikrofluidní zařízení, závit pro připojení šroubu UNF 1/4" 28, šroub a matice, forma na odlevání kanálku. Každý objekt byl vytvořen pomocí programu AutoCAD, který je vhodný pro 3D modelování. V práci jsou rovněž diskutované jiné programové prostředky pro 3D modelování.

Vliv nečistot na chování bubliny v roztocích ionických povrchově aktivních látek

Autor: Bc. Helena Suchanová
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Pavlína Basařová

V průmyslu se často setkáváme s vícefázovými systémy, jako jsou absorpční kolony, vícefázové reaktory nebo různé separační procesy, jako např. flotace. Klíčovým procesem je interakce bubliny s pevnou částicí. Dynamiku a stabilitu adheze bubliny na pevný povrch přitom ovlivňuje přítomnost povrchově aktivní látky (surfaktantu), a to i v nepatrném množství. V průmyslových aplikacích se většinou používají surfaktanty s určitým množstvím příměsí a nečistot. Tyto nečistoty však mohou výrazně ovlivnit dynamiku adheze bubliny i stabilitu zachycení bubliny na pevném povrchu. Cílem této práce je studium vlivu nečistot na chování ionických povrchově aktivních látek. Byly testovány dva surfaktanty, kationický dodecyltrimethylamonium bromid (DTAB) a anionický dodecylsulfát sodný (SDS). Pro roztoky s koncentrací surfaktantu nad i pod kritickou micelární koncentrací byl měřen smáčecí úhel, dynamické povrchové napětí a průběh adheze bubliny. Bylo potvrzeno atypické chování systému v okolí kritické micelární koncentrace, které je způsobeno právě přítomností nečistot.

Sekce: **Chemické inženýrství VI.**
místnost BIII, 8:00

Komise:

Předseda: prof. Ing. Igor Schreiber, CSc.

Členové: Ing. Zdeněk Grof, Ph.D.
Ing. Libor Labík
Ing. Jiří Vejražka (ICPF CAS)
Ing. František Plát, Ph.D. (Škoda Auto)

Soutěžící :

Bc. Viktorie Čermochová
Bc. Patrik Labík
Bc. Déborah De Masi
Bc. Matěj Novák
Bc. To Quyen Nguyenová
Bc. Marie Prajzlerová
Bc. Ondřej Rychecký
Bc. Patrik Schneider
Bc. Matěj Slavíček
Bc. Anna Zítková

Sponzoři sekce Chemické inženýrství VI

ŠKODA



ZeNTIVA
SPOLEČNOST SKUPINY SANOFI



SILON
Fibres • Compounds



Lonza

Micro-scale object positioning by electromagnetic actuation system based on LabVIEW

Autor: Bc. Viktorie Čermochová
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Chemical computing, the idea of manipulating matter in a certain way based on a movement of micro-droplets rather than electrons (as used in a conventional computer), could possibly serve as a fast chemical analysis tool. The high goal is to reach the point of "individual on a chip," systematic test of a thousands of parallel chemical interactions on a small scale. In this research, a fully functioning electromagnetic actuation (EMA) system for a manipulation of micro-droplets with two degrees of freedom on a water-air interface is proposed and fabricated. The system consists of a custom-made experimental setup using a set of four air-cored solenoids and a self-developed control algorithm written in LabVIEW software. For the manipulation, magnetic micro-droplets formed from kerosene (stabilized by TWEEN 65) containing iron-oxide nanoparticles (expected size of approximately 10 nm), were synthesized. The EMA system proved to be a robust system for a navigation of droplet of variable size (diameter 100 μm - 1 mm). Furthermore, the LabVIEW-based algorithm was enhanced to perform faster and serve wider range on manipulation tasks. The system enables a user to freely switch between locomotion tasks (user-defined target position, user-defined trajectory or gamepad control) and so gives a wide range of potential future applications.

Vývoj a testování katalyzátoru s membránou pro separaci a přednostní oxidaci CO v přítomnosti propanu

Autor: Patrik Labík, Bc.
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Ing. Petr Kočí, PhD.

Katalyzátory s membránou se v průmyslu využívají k selektivnímu potlačení určité reakce nebo posunu chemických rovnováh. Nacházejí tak uplatnění například při výrobě organických anhydridů, kde je potřeba přednostně oxidovat vznikající oxid uhelnatý v přítomnosti propanu nebo n-butanu. CO je zde vedlejším produktem, který inhibuje kinetiku hlavní katalytické reakce. K separaci dochází v důsledku rozdílných difuzivit CO (rychlejší difuze) a C_3H_8 skrz membránu. Protože je difuzivita složek závislá i na teplotě, vzniká teplotní „provozní okno“, kdy je CO již zoxidováno a C_3H_8 ještě prakticky nereaguje. Jako selektivní membrána se využívá velmi tenká vrstva zeolitu (krystalický hlinito-křemičitan) s přesně definovanými póry. Ta překrývá katalytickou vrstvu z γ -aluminy obsahující palladium. Cílem této práce je zjistit, zda by mohla jako selektivní membrána sloužit i vrstva tvořená z jiného materiálu než ze zeolitů, která by měla pouze srovnatelné difuzní omezení. V této práci byla jako selektivní membrána použita tlustší porézní vrstva tvořená částicemi $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$. Strukturní informace o připravených vzorcích byly stanovovány pomocí rastrovací elektronové mikroskopie. Měření difuzivity a konverze plynů byly provedeny v laboratorním reaktoru.

Effect of co-solvents on the morphology of microcellular polystyrene foams prepared with supercritical CO₂

Autor: Bc. Déborah De Masi
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Polystyrene (PS) foams are used as packaging materials and mainly as thermal insulators. Currently, the researcher and industry focus on the improvement of their heat insulation properties in order to save material and energy. Heat insulation properties can be improved by decreasing the cell size below 10 μm and by preparing the so-called microcellular foams. However, the prepared microcellular foams have often an insufficient porosity, i.e., lower than 90 %. In this work, we use co-solvents to increase the foam porosity. PS foams were prepared by the Pressure Induced Foaming method using supercritical CO₂ (scCO₂) and a co-solvent (pentane or cyclopentane), and further characterized with SEM. The presence of co-solvents increased the porosity by the occurrence of larger cells and formation of interconnected open cells. Although the cell size of smaller cells in the foam bulk has not changed significantly, the overall cell size distribution was broader and the morphology became inhomogeneous, which was more visible for cyclopentane. On the other hand, the use of co-solvents enabled us to prepare homogenous microcellular foams at lower impregnation temperatures, which has not been possible before just with the use of scCO₂, and this opens a new way for the process innovation.

Chemotaxis of decanol droplets in aqueous solutions

Autor: Bc. To Quyen Nguyenová
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jitka Čejková, PhD.

Biological chemotaxis is a natural way for cells and organisms to perform an oriented movement in the chemical gradient. Positive chemotaxis occurs if the movement is in the direction of the growing concentration. If the movement is in the opposite direction, the chemotaxis is called negative. For example, chemotaxis is the way of obtaining food (e.g. glucose) for bacteria. The goal of this work is to describe non-biological positive chemotactic movements of decanol droplets in the gradient of different chemicals in the sodium decanoate solution. The movement mechanism is based on the Marangoni effect. The transportation of various objects is also included in this paper. The chemotaxis could be used as a future transferring mechanism for objects or even a chemical delivery. To show the complexity of the system, the ability of the decanol droplet to solve simple mazes is demonstrated.

3D - printing of pharmaceutical tablets

Autor: Bc. Matěj Novák
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Production of tablets using 3D printers is a novel method of pharmaceutical formulation. Though still in the research&development phase, since recently it already has its first commercial application. The main advantage of this approach is, that every single tablet can be printed to meet the needs of a specific patient, both the dosage and dissolution rate can be controlled by the composition and porosity of the tablet, furthermore, two or more drugs can be present in one tablet. The aim of this project is to print pharmaceutical tablets, using Fused Deposition Modeling, a commercially available 3D printing technology. To do this, a printable filament must be produced first, made from biocompatible polymer matrices, plasticizers and active pharmaceutical ingredients. This is achieved by using hot-melt extrusion. The first model filaments contain Hydroxypropylcellulose, triacetin as a plasticizer and Ibuprofene as a model drug. After the fabrication, the filament has to be analyzed by UV/IR spectroscopy in order to determine the remaining content of the drug, the dissolution properties and mechanical characteristics need to be investigated in order to evaluate the printability and biocompatibility of the filament. Furthermore, 3D models of tablets were prepared using modeling software and first printing attempts were conducted.

In vitro model srážení účinné látky v gastrointestinálním traktu

Autor: Bc. Marie Prajzlerová
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, PhD.

Cílem práce bylo zjistit chování dvou účinných látek (angl. Active Pharmaceutical Ingredient – API), pomocí řízené pH titrace, která simulovala průchod tablety gastrointestinálním traktem a následné zkoumání vlivů pomocných látek (polymerů) na zlepšení biologické dostupnosti těchto léčiv. Obě zkoumané API jsou ve vodě téměř nerozpustné, ale jsou rozpustné v kyselém pH. Dokáží se tedy rozpustit v žaludku, nicméně ve střevech, kde by mělo dojít k jejich absorpci do těla, se vlivem vyššího pH vysráží a velké částice přes střevní stěnu neprojdou. Studie se tedy zabývá možnostmi ovlivnit velikost sražených částic tak, aby mohlo dojít k jejich absorpci. Jako polymery byly zvoleny polyvinylpyrrolidon (PVP K30) a Soluplus. Oba polymery vykazovaly odlišný vliv nejen vzhledem k vlastní struktuře, ale také vzhledem ke struktuře účinné látky. Schopnost polymeru PVP zpomalovat srážení částic se u jednotlivých API poměrně výrazně lišila, zatímco amfifilní polymer Soluplus, který je schopen tvořit micely, dokázal obě studované API solubilizovat a při vyšších koncentracích v roztoku dokonce srážení předejít. Zjištěných vlivů obou polymerů by se dalo využít při formulaci pevné lékové formy.

Cultivation of spheroids in liquid marbles

Autor: Bc. Ondřej Rycheký
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jitka Čejková, Ph.D.

The liquid marble is a droplet of liquid encapsulated in the hydrophobic powder. The shell prevents the liquid core from leaking and it is porous for gas exchange. However nothing else can go through the shell. Due to the non-adhesive shell it could be rolled on a solid surface or it can float on another liquid. These properties promise great opportunities for applications like a sensor, micro-reactor or bioreactor. This study focuses on the usage of liquid marble as a unique tool for cell cultivation. Unfortunately currently used two-dimensional (2D) structures of cells do not behave in the same way as the cells inside the body. Nowadays it is a big deal with cultivation of cells into the 3D structures, because it could be a bridge between *in vivo* and *in vitro* conditions. Inside of the liquid marble it is possible to reach 3D spheroids formation (cells agglomerates), which can be used for drug tests. 3D cells cultivation via liquid marble is cost-effective, with a high yield and small size distribution of spheroids.

Experimental study of polymers using TD-NMR

Autor: Bc. Patrik Schneider
Ročník: M2
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Polymers are one of the most common materials and have a broad range of applications (constructions, car industry, medicine, packaging, etc.), but their inner morphology on meso-scale is often not fully understood. The final properties of materials (sorption, density, melting point, etc.) depend on the morphology. Thus, for the optimization of the industrial production and the innovation of new polymer products, it is necessary to have proper methods for the morphology characterization and to observe the morphology changes during the sorption processes. In this work, we employ the time-domain nuclear magnetic resonance (TD-NMR) for the characterization of polymer emulsions. We also performed dynamic sorption experiment of polystyrene sample in organic solvent. Using several pulse sequence methods, we obtain T_1 and T_2 characteristic relaxation constants of components in the polymer. From the knowledge of these constants we identify the present phases and determine their content in the emulsion samples. This is done by evaluating the contribution of each component to the total NMR signal. Additionally, using the TD-NMR data, we were able to distinguish between several types of polymer morphologies. Thus, TD-NMR can be further used for the characterization of polymer morphology needed in the on-line control of industrial reactors.

Řízení disperze nanočástic kovu během přípravy porézního katalyzátoru

Autor: Bc. Matěj Slaviček
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Porézní materiály jsou často používány v nejrůznějších aplikacích jako adsorbenty či nosiče katalyzátorů. Požadované vlastnosti můžeme dále zlepšit impregnací kovových nanočástic. Pro dosažení vysoké aktivity adsorbentu či katalyzátoru je třeba kov dispergovat do vnitřních pórů v podobě co nejmenších nanočástic. Mezi nejčastěji studované porézní materiály patří MCM-41 a SBA-15 na bázi siliky (mezoporézní SiO_2). Vyznačují se úzkou distribucí velikostí a pravidelným uspořádáním pórů. Během přípravy lze pomocí micelárních šablon řídit velikost vzniklých pórů. Bylo připraveno několik vzorků s rovnoběžně uspořádanými póry o průměru od 3 do 10 nm. Vzorky byly následně impregnovány roztokem dusičnanu nikelnatého, sušeny a kalcinovány, což vedlo ke vzniku nanokrystalků čistého niklu, příp. oxidu nikelnatého. Byl studován vliv velikosti pórů substrátu a koncentrace impregnačního roztoku na velikost, rozmístění a chemické složení krystalů. Tyto parametry byly zjišťovány pomocí rentgenové difrakce a transmisní elektronové mikroskopie. Velikost krystalů se ve většině případů zvětšovala s rostoucí velikostí pórů. V případě několika vzorků se však část krystalů kovu vytvořila i na vnějším povrchu částic nosiče mimo vnitřní póry, což je nežádoucí. Dále bylo zjištěno, že s klesající velikostí pórů klesá redukovatelnost oxidu nikelnatého na nikl.

Modelling of nanoparticle deposition including electrostatic interactions

Autor: Bc. Anna Zítková
Ročník: M1
Ústav: Ústav chemického inženýrství
Školitel: Doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

The recent nanotechnology boom can be seen in many areas. Nanoparticles and their layers are produced by different devices build on different bases. Electrospray device, as the name suggests, uses the electric field for the creation of nanoparticles. Its main advantages are the cheap fabrication and operation. Although electrospraying has a lot of important advantages, there is also one crucial disadvantage. The morphology as well as the properties of deposited layers are strongly dependent on the operational conditions and hardly predictable. Our goal is to change this situation. We have developed the mathematical model of nanoparticle deposition. Parametric studies were done using the model and the obtained results show (besides other things) the importance of the after-deposition effects on the final morphology of the layer, so the model was extended about the description of the discharging.

Because there is no established description of the nanoparticle discharging in the literature, we decided to build the model on a phenomenological basis. It computes the transferred charge based on the charge difference. Results of the discharging process and its influence on the particle deposition are also presented in this work.

Sekce: **Fyzika a měřicí technika**
místnost B220, 8:30

Komise:

Předseda: doc. Ing. Jaroslav Hofmann, CSc.

Členové: doc. RNDr. Jaroslav Julák, CSc. (1. LF UK)

Dr. Mgr. Jana Jirešová

Ing. Ladislav Fišer, Ph.D.

Soutěžící:

Bc. Petra Vaňková

Bc. Andrea Hujacová

Bc. Pavel Hozák

Bc. Tereza Kordová

Lukáš Pekárek

Bc. Michaela Švarcová

Sponzor sekce Fyzika a měřicí technika



Energiově disperzní spektroskopie vodivých polymerů s magnetickými vlastnostmi

Autor: Bc. Petra Vaňková
Ročník: M2
Ústav: Ústav fyziky a měřicí techniky
Školitel: Ing. Dušan Kopecký, Ph.D.

Energiově disperzní spektroskopie (EDS) využívá energie svazku elektronů ze skenovacího elektronového mikroskopu a detektoru rentgenového záření pro kvantitativní a kvalitativní analýzu složení vzorku. Působením svazku primárních elektronů na povrch vzorku dochází k vyražení tzv. sekundárních elektronů z nižších slupek atomového obalu a nahrazování těchto elektronů elektrony z vyšších slupek. Při tomto ději dochází k vyzáření fotonů o charakteristické energii, odpovídající určitému prvku periodické tabulky.

Cílem práce je elementární analýza organických vodivých polymerů s magnetickými vlastnostmi pomocí EDS. Tyto materiály se vyznačují relativně vysokou elektrickou vodivostí, specifickým povrchem, nízkou hustotou a přítomností organických i anorganických komponent. Obtíže, které s sebou může přinést jejich analýza a následné vyhodnocování, jsou spojeny zejména se správnou přípravou vzorku a vhodným nastavením primárního svazku elektronů. V rámci práce proto také byla provedena sada experimentů, jejichž cílem bylo získat zkušenosti s přípravou vzorků takto složitých systémů.

Tajemství mrtvé vody odhaleno

Autor: Bc. Andrea Hujacová
Ročník: M1
Ústav: Ústav fyziky a měřicí techniky
Školitel: doc. Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D., doc. Ing. Karel Holada, Ph.D.,
doc. RNDr. Jaroslav Julák, CSc.

Cílem této práce je identifikace látek ve vodě exponované nízkoteplotnímu plazmatu (tzv. mrtvé vodě či plazmatem aktivované vodě), které jsou zodpovědné za její toxicitu. Experimentálně byla zjištěna toxicita mrtvé vody a dále byl zkoumán její vliv na eukaryotní buňky, konkrétně buňky myšího neuroblastomu. Mrtvá voda vykazovala kyselé pH ve všech případech. Toto pH však není původcem toxicity, což prokázala neutralizace mrtvé vody pomocí HEPES pufru, po jehož přidání ke vzorku toxicita přetrvává. Dále byla u exponované vody stanovena koncentrace peroxidu vodíku, na který se práce zaměřila. Porovnávána byla toxicita mrtvé vody a peroxidu vodíku při stejných ředěních, kdy oba testované roztoky vykazovaly stejnou míru toxicity. Po přidání katalasy toxicita mrtvé vody vymizela, po přidání MnO₂ významně klesla. Pro vyvrácení vlivu peroxodusité kyseliny jako látky zodpovědné za toxicitu, byl stanoven její vliv v kyselém prostředí exponované vody.

Regulace vlhkosti v laboratorní aparatuře

Autor: Bc. Pavel Hozák
Ročník: M2
Ústav: Ústav fyziky a měřicí techniky
Školitel: doc. Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.

Příspěvek se zabývá návrhem regulace vlhkosti vzduchu v laboratorní aparatuře, která byla realizována pro účely testování dekontaminačních vlastností nízkoteplotního plazmatu generovaného v elektrických výbojích při různé vlhkosti. Vzduch je z okolí čerpán do aparatury pomocí čerpadla, za kterým se proud vzduchu dělí na dvě větve, přičemž jedna větev je vedena přes probublávačku s vodou a slouží tak jako zdroj vzduchu o relativní vlhkosti 100 %. Druhá větev je vedena přes sušící komoru se silikagelem a slouží jako zdroj suchého vzduchu. Regulace vlhkosti je zrealizována škrcením jednotlivých větví vzduchu pomocí dvou servo mechanismů a mícháním suchého a vlhkého vzduchu v požadovaném poměru. V rámci návrhu regulátoru byly změřeny statické a přechodové charakteristiky celé soustavy, přičemž bylo zjištěno, že díky škrticím mechanismům je soustava nelineární. Z tohoto důvodu byl k regulaci zvolen PID regulátor s nekonstantním zesílením a jeho návrh metodou gain scheduling. Regulátor byl implementován s využitím mikroprocesoru Atmel ATmega32, který přímo ovládá škrticí mechanismy a slouží zároveň jako rozhraní pro komunikaci s PC. K jednoduchému ovládání aparatury a nastavení vlhkosti bylo vytvořeno uživatelské rozhraní v prostředí MATLAB.

Ošetření plastových obalů v potravinářství proti mikrobiální kontaminaci použitím plazmatu

Autor: Bc. Tereza Kordová
Ročník: M1
Ústav: Ústav fyziky a měřicí techniky
Školitel: Ing. Josef Khun, Ph.D.

Nízkoteplotní plazma a peroxid vodíku jsou metody dekontaminace, se kterými se lze v dnešní době setkat v medicíně i v potravinářství. Aplikace peroxidu vodíku má však limitované použití (s ohledem na zdravotní rizika), proto je vhodné zabývat se zvýšením jeho dekontaminačního účinku, aniž by musela být zvýšena koncentrace či množství této látky. Podle studií, které se zabývají nízkoteplotním plazmatem a jeho kombinováním s dalšími metodami či látkami, lze předpokládat zlepšení dekontaminační účinnosti nízkoteplotního plazmatu, pokud je zkombinován s aerosolem peroxidu vodíku. V této práci je zkoumána účinnost prostorové dekontaminace plastových dutých obalů působením kombinace výše zmíněných metod. Modelovými mikroorganismy jsou zvoleny následující plísňe: *Cladosporium sphaerospermum*, *Aspergillus niger*, *Aspergillus oryzae*, *Alternaria* sp. DBM 4004, *Eurotium* sp. DS 14, *Eurotium* sp. DS 161 a *Trichoderma atroviride*.

Výukové pomůcky pro demonstraci elektřiny a magnetismu

Autor: Lukáš Pekárek
Ročník: B2
Ústav: Ústav fyziky a měřicí techniky
Školitel: doc. Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.

Cílem naší práce je zatraktivnit výuku fyziky na VŠCHT. Rádi bychom studentům zpřístupnili praktickými ukázkami fyzikální jevy představované jinak pouze v teoretické rovině. Modely jsou navrženy a konstruované s důrazem na jednoduchost. To umožňuje studentům snadné pochopení demonstrováných jevů. Díky tomuto spojení teorie s praktickou ukázkou si studenti snáze zapamatují podstatu daného fyzikálního jevu a bude pro ně jednodušší tyto znalosti aplikovat v dalším studiu i životě. Výsledkem práce jsou demonstrační experimenty pro jednofázový elektrický motor, třífázový motor, síly mezi rovnoběžnými vodiči, jimiž protéká proud, jednopólový elektrický motor a silové působení nehomogenního magnetického pole na vodivý závit.

Možnosti využití nízkoteplotního plazmatu při léčbě kožních mykóz

Autor: Bc. Michaela Švarcová
Ročník: M2
Ústav: Ústav fyziky a měřicí techniky
Školitel: Ing. Hana Soušková, Ph.D.

Nízkoteplotní plazma je studováno pro své dekontaminační účinky již řadu let. Bylo prokázáno, že plazma letálně snižuje vitalitu jednobuněčných mikroorganismů v rámci desítek vteřin. V posledních letech je tento výzkum zaměřen také na inaktivaci mikromycet, především dermatofytů, které dokážou vyvolat mykotická onemocnění. Mykotická onemocnění vyvolaná dermatofyty jsou v populaci obvyklá a jsou léčitelná antimykotiky, která velmi zatěžují játra. Antimykotická léčba není tedy pro vhodná pro všechny, tudíž by bylo nízkoteplotní plazma pro dané pacienty řešením.

Tato práce popisuje klinickou studii léčby kožní mykózy na morčatech. K dispozici bylo 40 morčat, 20 morčat bylo neinfikovaných a 20 infikovaných dermatofytem *Trichophyton mentagrophytes*. Každá tato skupina byla rozdělena na 10 morčat léčených nízkoteplotním plazmatem a 10 neléčených. Průběh mykózy infikovaných jedinců byl mikrobiologicky vyhodnocován odebráním stěrů a otisků na agarová média v pravidelných intervalech.

Dle těchto odběrů je možné zhodnotit, že plazma vykazuje léčebný charakter. U léčených morčat mykóza proběhla v mírnější formě, což bylo hodnoceno jak mikrobiologicky tak i makroskopicky.

Sekce: **Modelování a řízení systémů**
posluchárna A40, 9:00

Komise:

Předseda: prof. Ing. Jan Náhlík, CSc.

Členové: Ing. Jan Mareš, Ph.D.

Ing. Jan Vrba

Ing. Roman Škultéty (MSD)

Soutěžící:

Bc. Dana Balusková

Bc. Michal Dolejšek

Bc. Viktor Mikulášek

Tomáš Rychetský

Bc. Michal Šíma

Bc. Martin Špale

Sponzor sekce Modelování a řízení systémů



Matematické modelování fermentací s více substráty pro produkci rekombinantních proteinů

Autor: Bc. Dana Balusková
Ročník: M2
Ústav: Ústav počítačové a řídicí techniky
Školitel: Ing. Jana Finkeová, CSc.

Prvním z cílů této práce bylo vytvoření rešerše, která vysvětluje a nastiňuje biochemické pozadí procesu fermentace s více substráty za účelem produkovat rekombinantní protein. Proces vytváření proteinů v živém organismu je součástí procesů, které se souhrnně nazývají centrální dogma molekulární biologie. V práci jsou vysvětleny pojmy jako je genová exprese a s tím související pojmy jako jsou transkripce a translace, které představují základní schéma vzniku proteinů v buňce. V rešeršní části práce jsou také popsány a vysvětleny matematické modely a podle čeho rozlišujeme různé typy.

Dalším cílem předložené práce bylo sestavit matematický model a pomocí tohoto modelu simulovat dynamické chování fermentace ve vsádkovém reaktoru, kdy kvasinky *Pichia pastoris* rostou na směsi dvou substrátů: glukózy a metanolu. Průběh fermentačního procesu je simulován v prostředí programu Matlab na základě sestavených diferenciálních rovnic a výsledky simulačních výpočtů jsou vyneseny do grafu.

Regulace teploty a průtoku vzduchu v termodynamickém tunelu

Autor: Bc. Michal Dolejšek
Ročník: M2
Ústav: Ústav počítačové a řídicí techniky
Školitel: Ing. Jan Mareš, Ph.D.

Cílem projektu je porovnání a prověření způsobů regulace teploty a průtoku vzduchu v termodynamickém tunelu.

Aparatura se skládá z tunelu, větráčku na vstupu do tunelu a topného tělesa uvnitř tunelu. Akčními veličinami jsou příkony větráčku a žárovky, měřenými pak teplota na povrchu žárovky, svítivost žárovky a průtok vzduchu tunelem.

První částí práce byla úprava elektrického zapojení, nastavení komunikace s řídicím modulem a výběr a instalace vhodného teplotního čidla.

Další částí práce byl návrh a aplikace konkrétních variant regulátorů. Jako základní varianta byla zvolena PID regulace teploty žárovky změnou jejího příkonu. Prvotní nastavení parametrů bylo provedeno empiricky, dále metodou Åströma a Hägglunda. Vzhledem k nelinearitě systému bylo následně nastavení regulátoru optimalizováno metodou Gain scheduling.

Vytvoření aplikace pro ovládání kvadrokoptéry

Autor: Bc. Viktor Mikulášek
Ročník: M2
Ústav: Ústav počítačové a řídicí techniky
Školitel: Ing. Jan Mareš, Ph.D.

Tato práce se zabývá tvorbou aplikace pro ovládání kvadrokoptéry AR.Drone 2.0 od firmy Parrot. S využitím zvolených knihoven bude vytvořena komplexní aplikace, jejímž úkolem je (i) komunikace s uživatelem, (ii) vizualizace proměnných a (iii) komunikace s ovládací jednotkou. Tvorba aplikace je cílena pro následné použití drona na zpracování obrazu a jeho řízení pomocí této analýzy. Součástí práce je i rešerše současných vědeckých i populárních přístupů k práci s drony ve světě.

Ovládání robotického manipulátoru s využitím metod obrazové analýzy

Autor: Tomáš Rychetský
Ročník: B3
Ústav: Ústav počítačové a řídicí techniky
Školitel: Ing. Jan Mareš, Ph.D.

Projekt je svou tematikou zaměřen na ovládání robotického manipulátoru pomocí analýzy obrazu. Práce je především zaměřena na analýzu informace ze dvou synchronně běžících kamer, výpočet středových souřadnic objektů ze dvou pořízených a analyzovaných obrazů a nakonec výpočet úhlů mezi jednotlivými částmi manipulátoru ve 3D. Projekt částečně navazuje na předešlou práci, která se zabývala zpracováním obrazu z jedné kamery v reálném čase. Řízení manipulátoru bude předmětem další práce.

Využití Dijkstrova algoritmu pro optimalizaci cesty

Autor: Bc. Michal Šíma
Ročník: M1
Ústav: Ústav počítačové a řídicí techniky
Školitel: Ing. Jan Mareš, Ph.D.

Cílem projektu je vytvořit komplexní aplikaci v programovacím jazyce Java, který bude sloužit k vyhledávání nejkratší cesty mezi vybranými učebnami v budovách VŠCHT Praha (konkrétně A a C). Projekt lze rozdělit na tři dílčí části. Nejprve je třeba získat data, ze kterých se vytvoří graf, v němž vrcholy představují učebny (případně další vybrané místnosti ve škole), hrany reprezentují chodby, případně schodiště či výtahy ve škole. V druhé části je třeba naprogramovat Dijkstrův algoritmus v již zmíněném jazyce Java. Algoritmus bude umět vyhledat nejkratší cestu mezi místnostmi školy, dále bude možno vyhledat nejbližší WC dle pohlaví, učebny a posluchárny. Ke každému výsledku vypíše, kudy nejkratší cesta vede a jak je dlouhá. Všechny výsledky budou prezentovány ve srozumitelné formě prostřednictvím mobilní aplikace, což by se dalo požadovat za závěrečnou část projektu.

Aplikace systému Android pro komunikaci s PLC

Autor: Bc. Martin Špale
Ročník: M2
Ústav: Ústav počítačové a řídicí techniky
Školitel: Ing. Jan Mareš, Ph.D.

Příspěvek se zabývá vývojem aplikace pro mobilní zařízení s OS Android. Smyslem aplikace je ovládání a vzdálená správa PLC (programovatelného logického automatu). Aplikace umožňuje sledování a modifikaci proměnných v PLC, tzv. „PLC tagů“ a jejich logování do SQL databáze. Tímto je zaručeno ovládání řízeného procesu v reálném čase z mobilního zařízení. Komunikace mezi zařízeními je realizována dvěma způsoby, a to výměnou SMS telegramů s připojeným GSM/GPRS modulem a prostřednictvím webového prohlížeče (PLC obsahuje HTTP server). Práce dále vysvětluje modulární skladbu programu, strukturu použitých API a návrh uživatelského rozhraní aplikace.

Sekce: **Analýza a zpracování dat
knihovna ÚPŘT A330, 9:00**

Komise:

Předseda: Ing. Jana Finkeová, CSc.

Členové: Ing. Iva Nachtigalová, Ph.D.

Ing. Ondřej Ťupa

Ing. Eva Tělecká (MSD)

Soutěžící:

Ivan Čvančara

Kristýna Dánová

Dmitrii Diakonov

Zdeněk Langer

Andrey Stroilov

Mykyta Turenko

Klára Zuntová

Sponzor sekce Analýza a zpracování dat



MSD

Pokročilé techniky při návrhu a implementaci Java aplikací s grafickým uživatelským rozhraním

Autor: Ivan Čvančara
Ročník: B2
Ústav: Ústav počítačové a řídicí techniky
Školitel: RNDr. Pavel Cejnar

Objektově orientovaný programovací jazyk Java vyvinutý společností Sun Microsystems patří mezi populární programovací jazyky. Jeho největšími přednostmi jsou přenositelnost napříč platformami a dostupné pokročilé knihovny, což programátorům v mnoha směrech usnadňuje práci.

Na základě průzkumu dostupných knihoven byl proveden výběr těch nejvhodnějších, jež splňují požadované funkčnosti (např. práce s XML soubory, komunikace s web serverem). Tyto knihovny byly použity pro tvorbu aplikace a jejího uživatelského rozhraní.

Práce analyzuje možnosti jednotlivých knihoven grafického uživatelského rozhraní při jejich použití v aplikacích generujících větší množství komponent až za běhu. Následně se práce věnuje analýze možností komunikace a výměny dat mezi Java aplikací a přidruženými webovými aplikacemi včetně alternativní komunikace přes poštovní servery. Součástí práce je ukázková modelová aplikace pro zadávání informací o studentech, hodnocení testů a ukládání výsledků testů do studijního informačního systému implementující výše zmíněné techniky.

Analýza metod klasifikace příznaků v polysomnografii

Autor: Kristýna Dánová
Ročník: B3
Ústav: Ústav počítačové a řídicí techniky
Školitel: prof. Ing. Aleš Procházka, CSc.

Práce je věnovaná obecné mezioborové oblasti zpracování a analýzy vícekanálových dat s aplikací na záznamy dat z polysomnografie. Popis obecných metod spektrální analýzy, diskrétní Fourierovy transformace a číslicové filtrace je následován detekcí vlastností spánku analýze EEG záznamů v průběhu vybraných spánkových stádií pro detekci jeho nepravidelností. Práce zahrnuje rovněž přehled nejnovějších publikací z této oblasti. Navržené algoritmy jsou ověřeny pro vybrané jedince vyšetřované ve spánkové laboratoři fakultní nemocnice v Hradci Králové. Vybrané metody jsou ověřeny ve výpočetním prostředí systému MATLAB s popisem v LATEXu. Závěry práce zahrnují i zaměření další práce orientované na klasifikaci nepravidelností spánku, analýzu spánkových stádií, rozbor přesnosti diagnostických metod a ověření spolehlivosti výsledného modelu.

Sběr a zpracování dat z webového serveru SIS VŠCHT Praha

Autor: Dmitrii Diakonov
Ročník: B3
Ústav: Ústav počítačové a řídicí techniky
Školitel: Ing. Iva Nachtigalová, Ph.D.

Autoři webových aplikací musí často řešit situaci, kdy nemají přístup do databáze cizí webové aplikace, ale přesto chtějí informace v ní obsažené zobrazovat na svých stránkách stejně, jako cizí webová aplikace. V daném případě je proto nutné ke sběru dat využít parsování zdrojového kódu webových stránek cizí aplikace. Cílem práce je proto odzkoušet analýzu kódu stránek webové aplikace SIS VŠCHT Praha a na základě ní navrhnout a odzkoušet způsob / metodu sběru a zobrazování vybraných informací (konkrétně o projektech a závěrečných pracích vypisovaných Ústavem počítačové a řídicí techniky) z této aplikace na stránkách webové aplikace uprt.vscht.cz, běžící pod redakčním systémem Drupal 7.x a webovém serveru Apache.

Analýza a identifikace vybraných částí rostlin ve 2D obrazových snímcích

Autor: Zdeněk Langer
Ročník: B2
Ústav: Ústav počítačové a řídicí techniky
Školitel: RNDr. Pavel Cejnar

Práce je zaměřena na zpracování obrazových dat pořizovaných při analýze vývoje rostlin. Předmětem vstupních obrazových dat, fotografií pořízených různými fotoaparáty, jsou listy rostlin. Součástí práce byla analýza potenciálně vhodných algoritmů pro segmentaci obrazových dat, z nichž vybrané algoritmy jsou implementovány v aplikaci s GUI realizované v programovacím jazyce C#. V rámci předběžného zpracování vstupního obrazu aplikace umožňuje poloautomatické otáčení, ořezání/odstranění částí obrazu, úpravu vyvážení bílé a úpravu vlastností souboru. Pro identifikaci objektů v obraze aplikace využívá vybrané algoritmy na detekci hran jako např. Cannyho hranový detektor nebo Houghovu transformaci. Hlavním výstupem aplikace je maska výběru, kterou je možné samostatně uložit v několika grafických formátech. Aplikace také registruje všechny provedené kroky při úpravách obrazu a je možné je uložit do samostatného souboru pro pozdější dodatečné úpravy.

Analysis of Kinect System Properties

Autor: Andrey Stroilov
Ročník: B3
Ústav: Ústav počítačové a řídicí techniky
Školitel: Ing. Jan Mareš, Ph.D.

Microsoft invented the Kinect originally for games consoles, but nowadays Kinect is used for different purposes among which the 3D scanning is. The main aim of the project is to examine and evaluate the possibility of 3D scanning and 3D printing the simple object. Theoretical research is focused on the using of Kinect 2.0 in different branches especially in 3D scanning and 3D printing. The experimental part deals with choosing the right distance to scan the object and actually scanning the object for 3D printing.

Možnosti moderních textových editorů pro editaci kódů webových stránek

Autor: Mykyta Turenko
Ročník: B3
Ústav: Ústav počítačové a řídicí techniky
Školitel: Ing. Iva Nachtigalová, Ph.D.

V dnešní době se pro tvorbu hypertextových stránek používají dva typy editorů: WYSIWYG editory, ve kterých se edituje obsah stránek ve tvaru, v jakém jej interpretují uživatelské agenty (např. ve formě, jak jej zobrazují vizuální prohlížeče na monitoru počítače nebo displeji mobilního telefonu), anebo textové editory, ve kterých se edituje zdrojový hypertextový a příp. další kód. Cílem práce je proto provést podrobnou rešerši a vzájemné srovnání moderních textových editorů/procesorů, které v dnešní době zvládnou daleko více než "obyčejný" poznámkový blok.

Posouzení spánkového cyklu v závislosti na spánkové poruše

Autor: Bc. Klára Zuntová
Ročník: B3
Ústav: Ústav počítačové a řídicí techniky
Školitel: prof. Ing. Aleš Procházka, CSc.

Člověk průměrně stráví až třetinu svého života spánkem. Poruchy spánku, mezi které se řadí např. syndrom neklidných nohou, syndrom spánkové apnoe, insomnie nebo chronická obstrukční plicní nemoc, postihují čím dál větší zlomek populace. Za účelem analýzy spánku je spánek zaznamenáván na polysomnografu ve spánkové laboratoři, kde je nadále klasifikován a segmentován expertem.

Teoretická část této práce je věnována představení spánkových poruch, zabývá se jejich dělením a diagnostikou.

Praktická část práce se soustředí v první řadě na nastudování zastoupení spánkových stádií (Bdění, NonREM1–NonREM3, REM) pro jednotlivé poruchy, a to pro ruční i automatickou segmentaci. Současně s tím je krátce studována shoda mezi ruční a automatickou segmentací.

Dále je zaměřena na posouzení vlastností spánkových stádií v závislosti na diagnostikované poruše a věku.

Práce se rovněž zabývá zpřístupněním dat a automatizací zpracování jednotlivých souborů.

Sekce: **Podnikový management a marketing
posluchárna C11, 8:30**

Komise:

Předseda: prof. Ing. Ivan Gros, CSc.

Členové: doc. Ing. Jan Rančák, CSc.

Ing. Olga Kutnohorská, Ph.D.

Ing. Stanislav Kubeš

Soutěžící:

Bc. Drobná Natálie

Bc. Krejčí Anna

Bc. Křišťůvková Jana

Ing. Macháč Václav

Mgr. Navarová Adéla

Bc. Nohejl Jan

Bc. Podhradský Adam

Bc. Svobodová Veronika

Bc. Živec Josef

Sponzorem sekce je MITAS a.s.



Legislativa potravinářské výroby

Autor: Bc. Drobná Natálie
Ročník: M2
Ústav: Katedra ekonomiky a managementu
Školitel: doc. Ing. Stanislava Grosová, CSc.

Součástí českého právního řádu se stala evropská legislativa dnem vstupu České republiky do Evropské unie, tj. 1.5. 2004. Před vstupem do EU musela ČR přizpůsobit svůj právní řád EU. Přijetí sekundárních norem, které měla ČR povinnost implementovat do svého právního řádu, pokračovalo každoročně i po vstupu do EU. Na národní úrovni upravuje potravinářskou legislativu zejména zákon č. 110/1997 Sb., o potravinách a tabákových výrobcích a k němu navazující vyhlášky. Na potravinářské podniky se rovněž vztahují evropská legislativní opatření, která jsou podrobněji rozepsána v práci. Nařízení jsou platná v souladu s cílem dosáhnout vysoké míry ochrany zdraví spotřebitelů a zaručit jejich práva na informace, aby byli spotřebitelé patřičně informováni o potravinách, které konzumují.

Cílem práce je zjistit, jakými českými i evropskými legislativními opatřeními v oblasti potravin se musí řídit společnost Bonavita, spol. s r. o., jaké české vyhlášky byly zcela nahrazeny evropskými a zároveň zhodnocení, do jaké míry odpovídá vybraná řada výrobků Bonavita nařízení Evropského společenství č. 1924/2006, o výživových a zdravotních tvrzeních při označování potravin. Označování výživové hodnoty vybrané výrobkové řady Bonavita je následně porovnáno s označováním vybraných konkurenčních výrobků.

Analýza materiálového toku a plýtvání

Autor: Bc. Krejčí Anna
Ročník: M2
Ústav: Katedra ekonomiky a managementu
Školitel: Ing. Dana Strachotová, Ph.D.

V současné době tvrdého konkurenčního prostředí se musí podniky snažit získat konkurenční výhody. Je třeba využívat nejen nových technologických postupů, ale také racionalizovat a zefektivňovat již existující procesy. Proto se práce zabývá pohybem materiálu a identifikací plýtvání v toku materiálu po podniku. Měření probíhalo formou snímku pracovního dne, kdy byly analyzovány činnosti operátorů a rozděleny na přidávající hodnotu, nepřidávající hodnotu a činnosti nezbytné. Z náměrů činností bylo pak plýtvání vyčísleno na čas, kdy neprobíhá přidávání hodnoty. Dále byly zhodnoceny vizuální prvky pracoviště a navržena nápravná opatření. Cílem této práce bylo vytvořit vstupní monitoring procesů a odhalení potenciálu pro zlepšení, což následně bude podkladem pro zavedení principů Lean ve zkoumaném podniku.

Analýza mlékárenského průmyslu po zrušení mléčných kvót prostřednictvím Porterova modelu

Autor: Bc. Křišťuková Jana
Ročník: M2
Ústav: Katedra ekonomiky a managementu
Školitelé: Mgr. et Mgr. Ing. František Sudzina, Ph.D.

Práce analyzuje mlékárenský průmysl po zrušení mléčných kvót, ke kterému došlo v České republice 1. 4. 2015. Jako nástroj pro analýzu konkurenčního prostředí je využit Porterův model. Cílem práce je podrobná analýza jednotlivých hybných sil působících v mlékárenském odvětví jak na producenty mléka, tak na zpracovatele mléka.

Výsledkem práce je definování hodnoty každé hybné síly, znázorněné na pětibodové škále identifikující důležitost dané síly, k níž autorka dospěla po pečlivém zvážení veškerých relevantních skutečností majících vliv na zkoumanou sílu.

Koncept internetového obchodu s chemikáliemi

Autor: Ing. Macháč Václav
Ročník: M2
Ústav: Katedra ekonomiky a managementu
Školitel: Ing. Jiří Klečka, Ph.D.

Tato práce se zabývá návrhem internetového obchodu pro společnost Brenntag CR s.r.o., která patří mezi nejvýznamnější distributory chemikálií na českém průmyslovém trhu. V rámci práce bylo provedeno dotazníkové šetření, které mělo za cíl zjistit, jak v současnosti firmy na českém trhu nakupují chemikálie, jak by je nakupovat chtěly a zda firmy mají zájem o možnost nakupovat chemikálie pomocí e-shopu. Výsledky ukazují, že polovina oslovených firem by o nákup chemikálií přes e-shop měla zájem. Součástí práce je i analýza již existujících internetových obchodů na českém, slovenském, polském a německém trhu a na trhu Velké Británie a Severního Irska. Bylo zjištěno, že většina firem působících na těchto trzích neumožňuje svým zákazníkům nákup chemikálií přes e-shop. Navíc existující internetové obchody mnohdy nepůsobí profesionálním dojmem a jejich nabídka je často velmi omezená. Na základě provedeného výzkumu byl sestaven koncept internetového obchodu s chemikáliemi, který počítá s obsluhou průmyslových i koncových zákazníků. Součástí návrhu je popis významných funkcí, jejich vzájemná provázanost a dále rozvržení hlavních stránek e-shopu.

Podniková kultura z hlediska genderové dimenze

Autor: Mgr. Navarová Adéla
Ročník: M2
Ústav: Katedra ekonomiky a managementu
Školitel: Mgr. Ing. Marek Botek, Ph.D.

Podniková kultura je aspekt, na který se v současnosti zaměřuje pozornost mnoha firem, protože ovlivňuje spokojenost, loajalitu a v konečném důsledku efektivitu a produktivitu práce zaměstnanců. V této práci je důraz kladen především na problematiku genderové rovnosti v zaměstnání, což je prvek, který dosud není v rámci podnikové kultury příliš akcentován. Dále je popsána podstata podnikové kultury, její prvky a dimenze.

Praktické aplikace podnikové kultury, její podoba a síla byly sledované ve dvou výrobních organizacích, Lego Group a Mitas a.s.

Vývoj ceny kaučuku

Autor: Bc. Nohejl Jan
Ročník: M2
Ústav: Katedra ekonomiky a managementu
Školitel: Mgr. et Mgr. Ing. František Sudzina, Ph.D.

Příspěvek je zaměřen na vývoj ceny kaučuku na burze komodit. Konkrétně se zabývá, jak vybrané vnější vlivy ovlivňují vývoj ceny přírodního kaučuku na světových trzích. V této práci je zkoumáno, zda existuje nějaká závislost mezi vývojem cen jiných komodit nebo faktorů a cenou přírodního kaučuku. Práce byla realizována ve spolupráci se společností Mitas a.s., která se zabývá výrobou pneumatik, a je předním českým výrobcem pneumatik specializující se především na zemědělské a stavební stroje, vysokozdvizné vozíky a motocykly.

Cílem práce je zjistit, zda mezi vývojem vnějších faktorů a vývojem ceny přírodního kaučuku existuje nějaká korelace, která by se dala využít v praxi. Konkrétně by to znamenalo, přibližné předvídání, jak se bude vyvíjet cena kaučuku na burze podle chování vnějšího faktoru. Taková znalost by vedla ke konkurenční výhodě, snížení nákladů na nakupovaný materiál a v konečném důsledku i ke zvýšení zisků.

Analýza výrobní linky BMW v závodě Eissmann Automotive

Autor: Bc. Podhradský Adam
Ročník: M2
Ústav: Katedra ekonomiky a managementu
Školitel: Ing. Dana Strachotová, Ph.D.

Eissmann Automotive Česká republika, s.r.o. je výrobní podnik vyrábějící různé komponenty do interiérů automobilů.

Práce se zabývá analýzou jedné z výrobních linek, ve které se kaširují kůží područky do různých typů vozidel BMW. U této linky je dlouhodobý požadavek na zvýšení kapacity výroby. Na základě opakovaného snímku části pracovního dne pracoviště, u kterého se mělo nacházet úzké místo výroby, byly podány návrhy na zlepšení funkce tohoto pracoviště. Po aplikaci návrhů na zlepšení byla funkce pracoviště znovu přezkoumána pomocí opakovaného snímku části pracovního dne a vyhodnocena.

Zrušení kvót pro výrobu a vývoz mléka

Autor: Bc. Svobodová Veronika
Ročník: M2
Ústav: Katedra ekonomiky a managementu
Školitel: doc. Ing. Stanislava Grosová, CSc.

Práce se zabývá vývojem trhu v oblasti mléčného průmyslu, především problematikou zrušení kvót pro výrobu a vývoz mléka. Práce popisuje, co to vlastně mléčné kvóty jsou, proč byly zavedeny a naopak jaké důvody vedly Evropskou unii k jejich zrušení.

Důležitý je také vývoj výkupních cen mléka. V teoretické části práce nalezne čtenář informace o jednotlivých milnících na trhu, které by mohly/měly ovlivnit výkupní cenu mléka, v části praktické poté detailnější rozbor výkupních cen a nalezení přesného vlivu jednotlivých situací na změny výkupních cen.

Vyhodnocení závislosti vlastností přírodního kaučuku na lokalitě a ročním období

Autor: Bc. Živec Josef
Ročník: M2
Ústav: Katedra ekonomiky a managementu
Školitel: Ing. Olga Kutnohorská, Ph.D.

Jen za rok 2014 bylo ve světě vyprodukováno 12,07 milionů tun přírodního kaučuku. Společnost Mitas a.s. využívá tuto surovinu pro výrobu zemědělských, industriálních a motocyklových plášťů. V tomto segmentu patří mezi přední evropské výrobce. Vlastnosti tohoto důležitého materiálu jsou ovlivnitelné mnoha faktory, například podnebným pásmem nebo ročním obdobím.

Cílem této práce je vyhodnocení vývoje a změn parametrů kaučuku v závislosti na ročních obdobích a oblastech produkce. Objednávání podle kvality dané jednotlivými obdobími a oblastmi by mohlo pomoci zlepšení vlastností vstupních surovin pro výrobu pneumatik. Dále budou zkoumány závislosti mezi vybranými parametry kaučuku. Jejich nalezení by mohlo znamenat cestu k optimalizaci procesu testování materiálu.