

Seznam sekcí a složení komisí

- Sekce: **Analytická chemie 1**
posluchárna A21, 8:30
- Komise:
- Předseda: doc. RNDr. Dr. David Sýkora
- Členové: doc. Ing. Vladimír Setnička, Ph.D.
doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.
Dr. Ing. Jindřich Koubek, Ph.D.
Mgr. Filip Dvořák (P-Lab)
- Soutěžící: Bc. Hrubá Lucie
Bc. Jenišťová Adéla
Bc. Klognerová Kamila
Ing. Piecková Lucie
Bc. Ryšavá Helena
Bc. Schwarz Jaroslav
Bc. Švecová Marie
Bc. Vrzal Lukáš
- Sekce: **Analytická chemie 2**
posluchárna A105, 8:30
- Komise:
- Předseda: prof. Ing. Karel Volka, CSc.
- Členové: RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.
Ing. Vadym Prokopec, Ph.D.
Ing. Magda Vosmanská, CSc.
Ing. Ladislav Tenkl (Nicolet CZ)
- Soutěžící: Adamková Hana
Hlásková Zuzana
Kubulková Zuzana
Bc. Michaleová Patricia
Bc. Sedláček Jakub
Strnad Štěpán
Bc. Vávra Karel
- Sekce: **Teoretická fyzikální chemie**
místnost A125, 9.00 hod.
- Komise:
- Předseda: prof. Ing. Anatol Malijevský, CSc.
- Členové: Ing. Michal Bureš, CSc.
Ing. Jozef Lengyel (ÚFCH J. Heyrovského, AV ČR, v.v.i.)
- Soutěžící: Belloň Tomáš
Benroth Martin
Jurásková Veronika
Kubečka Jakub
Martinek Tomáš
Palivec Vladimír

Sekce: **Aplikovaná fyzikální chemie I.
místnost A402, 8.30 hod.**

Komise:

Předseda: doc. Ing. Ivan Cibulka, CSc.

Členové: doc. Ing. Lidmila Bartovská, CSc.
Ing. Ondřej Vopička, Ph.D.

Soutěžící: Bc. Cerhová Marie
Bc. Lanč Marek
Bc. Mahnel Tomáš
Bc. Novotná Hana
Bc. Polák Jakub
Bc. Radoň Václav
Bc. Svoboda Vít
Bc. Vataščin Erika

Sekce: **Aplikovaná fyzikální chemie II.
místnost A135 (knihovna), 9.00 hod.**

Komise:

Předseda: prof. Dr. Ing. Pavel Matějka

Členové: doc. Ing. Pavel Chuchvalec, CSc.
Ing. Kryštof Pilnáček
RNDr. Roman Chaloupka, Ph.D. (MEDICEM Institute)

Soutěžící: Borbášová Timea
Číhal Petr
Dvořáková Michaela
Hádková Žofie
Kantnerová Kristýna
Kludský Miroslav
Matoušová Maja

Sekce: **Matematické modelování v chemickém inženýrství
posluchárna B III, 9.00 hod**

Komise:

Předseda: prof. Ing. Igor Schreiber, CSc.

Členové: Ing. Martin Kohout, Ph.D.
Ing. Jan Hronza, Ph.D. (Ricardo)
Ing. Martin Hubička, Ph.D. (Lovochemie)
Ing. Michal Vonka
Ing. Richard Pokorný

Soutěžící: Bc. Konopka Ladislav
Bc. Kubová Petra
Bc. Leskovjan Martin
Bc. Pelc Václav
Pospíšil Martin
Sládek Viktor
Voclová Malvína
Zitková Anna

Sekce: **Procesní a chemické inženýrství 1.
posluchárna B139, 9.00 hod**

Komise:

Předseda:

Členové:

prof. Ing. František Štěpánek, PhD.

Ing. Jaromír Pociď, PhD.

Dr. Ing. Juraj Kilián (Mondi)

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

Ing. Pavel Beránek

Ing. Jaroslav Kotowski

Soutěžící:

Čermochová Viktorie

Fojtíková Romana

Novák Matěj

Bc. Podivínská Martina

Polezhaev Petr

Bc. Rygl Adam

Sopoušek Jan

Sekce: **Procesní a chemické inženýrství 2.
knihovna B141b, 9.00 hod**

Komise:

Předseda:

Členové:

prof. Ing. Dalimil Šnita, PhD.

Mgr. Jaroslav Hanuš, PhD.

Ing. Jan Nájemník (Momentive)

Ing. Tomáš Jindra, Ph.D. (Pure Bohemia)

Ing. Josef Chmelař

Ing. Martin Ullrich

Soutěžící:

Bc. Dundálek Jan

Dvořák Jakub

Haškovcová Kateřina

Janská Petra

Petrík Juraj

Bc. Sznepka Jakub

Bc. Šnajdr Ivo

Sekce: **Procesní a chemické inženýrství 3.
posluchárna B03, 9.00 hod**

Komise:

Předseda:

Členové:

doc. Ing. Michal Příbyl, PhD.

Ing. Otto Hadač, PhD.

Ing. Marek Bobák, Ph.D. (Membrain)

Ing. Lucie Rottrová (Chemoprojekt Nitrogen)

Mgr. Eva Adamusová (Medicem)

Ing. Jiří Maršálek

Ing. Libor Labík

Soutěžící: Gorný Damian
Bc. Hulík Radim
Jantač Simon
Khafizova Elvira
Krejčí Anna
Schneider Patrik
Bc. Šoltys Marek
Bc. Vrána Jiří

Sekce: **Podnikový management a marketing
posluchárna C11, 8.30 hod**

Komise:
Předseda: prof. Ing. Ivan Gros, CSc.
Členové: Mgr. Ing. Marek Botek, Ph.D.
Ing. Jakub Dyntar, Ph.D.

Soutěžící: Bc. Andreeva Daria
Bc. Dejlová Barbora
Bc. Ehrlichová Barbora
Bc. Hojač Vojtěch
Bc. Kabatová Barbora
Bc. Korbéliková Nela
Bc. Makovec Pavel

Sekce: **Fyzika
místnost B220, 9.00 hod**

Komise:
Předseda: doc. Ing. Jaroslav Hofmann, CSc.
Členové: Mgr. Tomáš Kotrba
Dr. Mgr. Jana Jirešová
doc. RNDr. Jaroslav Julák, CSc. (1. LF UK)

Soutěžící: Čtvrtečková Lucie
Jemelíková Michaela
Ježková Dominika
Kučerová Jana
Matějka Jiří
Staňková Eliška
Švarcová Michaela
Vávra Jan

Sekce:	Měřicí technika místnost B303, 9.00 hod
Komise:	
Předseda:	doc. Ing. Karel Kadlec, CSc.
Členové:	Ing. Jitka Kopecká Ing. Šárka Piskačová, CSc.
Soutěžící:	Hujacová Andrea Flachsová Adéla Tomeček David Vaňková Petra Žitek Václav Živčáková Martina
Sekce:	Informatika místnost B212, 9.00 hod
Komise:	
Předseda:	doc. Dr. Ing. Martin Vrnáta
Členové:	Ing. Ladislav Fišer, Ph.D. Ing. Jana Finkeová, CSc. RNDr. Jiřina Scholtzová (FIT ČVUT)
Soutěžící:	Crha Jan Dolejšek Michal Hrbková Ema Schätz Martin Wiesnerová Lenka Yudina Olga

Sekce:	Analytická chemie 1 posluchárna A21, 8:30
Komise:	
Předseda:	doc. RNDr. Dr. David Sýkora
Členové:	doc. Ing. Vladimír Setnička, Ph.D. doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D. Dr. Ing. Jindřich Koubek, Ph.D. Mgr. Filip Dvořák (P-Lab)
Soutěžící:	Bc. Hrubá Lucie Bc. Jenišťová Adéla Bc. Klognerová Kamila Ing. Piecková Lucie Bc. Ryšavá Helena Bc. Schwarz Jaroslav Bc. Švecová Marie Bc. Vrzal Lukáš

Partner sekce Analytická chemie 1.
Národní technické muzeum



Sponzoři sekce Analytická chemie 1:

Nicolet CZ

MiT

Olympus Czech Group

Siad Czech

P-Lab

Beckman Coulter Česká republika

Merck

RMI

HPST

Lach-Ner

Pragolab

Maneko

Chromservis

Sigma Aldrich

Tevak – Leybold v ČR a SR

Vitrum VWR



Sekce : Analytická chemie 1

Speciační analýza jodu v biologických tkáních

Autor: Bc. Lucie Hrubá
Ročník: M1
Ústav: analytické chemie
Školitel: Ing. Antonín Kaňa

Biodostupnost jodu v potravinách závisí zejména na obsahu jeho jednotlivých specií. V předložené práci byla vyvinuta metodika pro speciační analýzu jodu v potravinách živočišného původu pomocí spojení vylučovací chromatografie a hmotnostní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem. Jako mobilní fáze byl zvolen 20 mmol.l^{-1} tris-(hydroxymethyl)-aminomethan o pH 7,5. Vyvinutá metodika byla aplikována na reálné vzorky živočišných tkání. Speciační analýzou byly nalezeny sloučeniny jak s nízkou, tak s vysokou molekulární hmotností. Některé z těchto specií, jako thyroglobulin, albumin, jodid a produkty hydrolýzy trijodtyroninu a thyroxinu, byly identifikovány na základě analýzy standardů uvedených sloučenin a obsah jodidu byl kvantifikován.

Sekce : Analytická chemie 1

In vitro studie využití esenciálních olejů jako posilovačů penetrace ušní kutikulární tkáně

Autor: Adéla Jenišťová
Ročník: M1
Ústav: analytické chemie
Školitel: prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka

Využití Ramanovy a infračervené spektroskopie k in vitro studii kůže plyne především z jejich neinvazivity, vzájemné komplementarity a rychlosti měření molekulárně specifických dat. Pro účely studia kutikulární tkáně byla technika zeslabeného úplného odrazu (Attenuated Total Reflectance, ATR) použita již v 90. letech minulého století, ovšem stále více jsou publikovány studie založené na Ramanově spektroskopii.

Současné poznatky o vlivu látek na urychlení procesu vstřebávání upřednostňují esenciální oleje, zejména levandulový, geraniový, eukalyptový a ylang-ylang jako látky zvyšující celkové penetrované množství účinných látek obsažených v kožních přípravcích. Cílem této práce je studium kinetických parametrů procesu vstřebávání účinných látek na modelové matrici v podobě ušní kutikulární tkáně prasete domácího za nebo bez přítomnosti vybraných posilovačů penetrace.

Sekce : Analytická chemie 1

Speciační analýza selenu v řepce olejce

Autor: Kamila Klognerová
Ročník: M2
Ústav: analytické chemie
Školitel: prof. Ing. Oto Mestek, CSc.

V posledních letech se značně zvýšil zájem o selen, a to především kvůli jeho rozdílnému působení na lidský organismus. Jeho účinky souvisí s množstvím a formou, ve kterém se vyskytuje v životním prostředí a potravinách.

Cílem této práce bylo provést speciační analýzu selenu v tkáních řepky olejky (*Brassica napus*) a zjistit vliv fortifikace seleničitanem, kultivaru a pěstební oblasti na obsah jednotlivých selenoaminokyselin v tkáních rostlin. Analýza byla provedena pomocí on-line spojení RPC-HPLC a ICP-MS. Pro analýzu byly použity dva kultivary řepky olejky, a to Sitro a N.K. Oktans, které byly pěstovány v řepařských oblastech Červený Újezd a Hněvčev a bramborářské oblasti Humpolec.

Sekce : Analytická chemie 1

Chiroptická spektroskopie v diagnostice Alzheimerovy choroby

Autor: Lucie Piecková
Ročník: M2
Ústav: analytické chemie
Školitel: doc. Ing. Vladimír Setnička, Ph.D.

Alzheimerova choroba je vážné neurodegenerativní onemocnění, jehož výskyt celosvětově stoupá v důsledku stárnutí populace. Jeho diagnostika je založena na neurologických a neuropsychologických vyšetřeních, která jsou doplněna o výsledky zobrazovacích metod. Současné diagnostické metody jsou však časově náročné, finančně nákladné a některá podpůrná vyšetření navíc značně invazivní. Raná stadia nemoci jsou obtížně rozpoznatelná. Jelikož se nemoc vyznačuje hromaděním proteinů s abnormální konformací, jeví se jako vhodný nástroj pro včasnou diagnostiku Alzheimerovy choroby zkoumání krevních vzorků chiroptickými metodami, které jsou inherentně citlivé na prostorovou strukturu biomolekul. V této práci bylo analyzováno 53 vzorků krevní plazmy, z toho 28 vzorků od pacientů v různých stádiích nemoci a 25 vzorků kontrolních jedinců. Metody elektronového cirkulárního dichroismu a Ramanovy optické aktivity byly doplněny o Ramanovu a infračervenou spektroskopii. Vybrané spektrální pásy byly vyhodnoceny metodou lineární diskriminační analýzy, která klasifikovala vzorky na základě vztahu ke klinické diagnóze. Dosažené výsledky demonstrují potenciál metod chiroptické spektroskopie pro včasnou a minimálně invazivní diagnostiku Alzheimerovy choroby.

Sekce : Analytická chemie 1

Studium povrchové modifikace nanočástic stříbra cysteinem a jeho deriváty

Autor: Helena Ryšavá
Ročník: M2
Ústav: analytické chemie
Školitel: RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.

Pro charakterizaci některých chirálních molekul lze využít nanočástic ušlechtilých kovů. Pokud jsou na povrchu achirálních nanočástic stříbra navázány chirální molekuly cysteinu, dochází ke vzniku indukované chiralitě a celý systém tak lze sledovat například elektronovou spektroskopií cirkulárního dichroismu.

Předkládaná experimentální práce se zabývá studiem postsyntetické povrchové modifikace stříbrných nanočástic cysteinem a jeho deriváty penicillaminem a α -methylcysteinem. Pro tuto studii bylo využito reakce Sangerova činidla 1-fluor-2,4-nitrobenzenu s amino skupinou výše uvedených chirálních analytů. Změny v systému byly sledovány pomocí molekulové absorpční spektroskopie v ultrafialové oblasti.

Sekce : Analytická chemie 1

Spektroskopické studium distribuce bilirubinu v systému sérový albumin – modelová membrána v přítomnosti léčiv

Autor: Jaroslav Schwarz
Ročník: M2
Ústav: analytické chemie
Školitel: Mgr. Iryna Goncharova, Ph.D.

Ke studiu konkurence léčiv a bilirubinu pomocí spektroskopie elektronového cirkulárního dichroismu bylo přistupováno již několika způsoby. Představená práce se zaměřuje na stanovení vytěšňovacích konstant pro léčiva v modelovém séru (systému, kde koncentrace bilirubinu a albuminu odpovídají složení séra savců). Aby bylo dosaženo co největšího přiblížení živým systémům, byly do modelových systémů přidávány jednoduché modelové membrány (micely). Pomocí spektroskopie elektronového cirkulárního dichroismu byla zkoumána distribuce bilirubinu mezi albumin a micely v modelovém séru bez a za přítomnosti vybraných léčiv.

Konkrétně byla sledována konkurenční vazba bilirubinu a osmi léčiv při vazbě na hovězí sérový albumin v přítomnosti záporně nabitých, kladně nabitých a nenabitých micel. Získané výsledky vlivu vazby léčiva a bilirubinu na albumin byly porovnány s výsledky molekulového dockingu léčiv a bilirubinu do struktury bílkoviny.

Sekce : Analytická chemie 1

Studium vlivu teploty na povrchem zesílená infračervená a Ramanova spektra flavonoidů

Autor: Marie Švecová
Ročník: M1
Ústav: analytické chemie
Školitel: prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka

Metody povrchem zesílené vibrační spektroskopie, povrchem zesílená infračervená absorpce (Surface-Enhanced Infrared Absorption, SEIRA) a povrchem zesílený Ramanův rozptyl (Surface-Enhanced Raman Scattering, SERS), umožňují stanovit analyty ve velmi nízkých koncentracích. Těmito analyty mohou být např. sekundární metabolity rostlin, mezi něž patří flavonoidy. Pro člověka mají význam antioxidantů, inhibitorů rakoviny, pomáhají v prevenci mozkových příhod a kardiovaskulárních onemocnění, dále mají antibakteriální, antivirové, protizánětlivé a antialergické účinky.

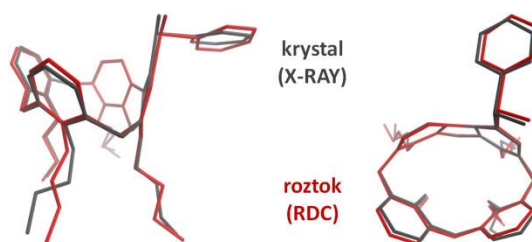
Změnami teploty lze docílit u nasorbovaných vrstev analytů reorientace molekul vzhledem k povrchem zesilujícímu substrátu, která má vliv na obsaženou spektrální informaci v naměřených spektrech. Cílem této práce je studium teplotní závislosti povrchem zesílených vibračních spekter vybraných flavonoidů, jmenovitě chrysinu, galanginu, luteolinu, pinocembrinu a quercetinu, a jejich porovnání pomocí multivariačních chemometrických metod.

Sekce : Analytická chemie 1

Využití nových orientujících medií ve strukturní analýze calix[4]arenů

Autor: Bc. Lukáš Vrzal
Ročník: M2
Ústav: Centrální laboratoře VŠCHT Praha
Školitel: Ing. Hana Dvořáková, CSc.

Předmětem této práce bylo zjistit, jaká je využitelnost řady nových orientujících medií na bázi kapalných krystalů při studiu konformačního chování calixarenů a chirální diskriminace. Nejprve byla serie nových orientujících medií testována s ohledem na míru zavedené orientace, resp. malé rozšíření signálů, na modelovém tetrapropoxycalix[4]arenu. Poly(γ -benzyl-L/D-glutamátová) media (PBLG, PBDG), která poskytla nejlepší výsledky, byla poté použita k upřesnění nebo určení prostorové struktury nových inherentně chirálních derivátů calix[4]arenů. Polyacetylenová media se schopností enantiodiskriminace se v oblasti inherentně chirálních calix[4]arenů bohužel neosvědčila.



Sekce: **Analytická chemie 2**
posluchárna A105, 8:30

Komise:

Předseda: prof. Ing. Karel Volka, CSc.

Členové: RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.
Ing. Vadym Prokopec, Ph.D.
Ing. Magda Vosmanská, CSc.
Ing. Ladislav Tenkl (Nicolet CZ)

Soutěžící:

Adamková Hana
Hlásková Zuzana
Kubulková Zuzana
Strnad Štěpán
Bc. Michaleová Patricia
Bc. Sedláček Jakub
Bc. Vávra Karel

Partner sekce Analytická chemie 2.

Národní technické muzeum



Sponzoři sekce Analytická chemie 2:

Nicolet CZ

MiT

Olympus Czech Group

Siad Czech

P-Lab

Beckman Coulter Česká republika

Merck

RMI

HPST

Lach-Ner

Pragolab

Maneko

Chromservis

Sigma Aldrich

Tevak – Leybold v ČR a SR

Vitrum VWR

OLYMPUS

Your Vision, Our Future



Lasery, fotonika
a jemná mechanika

pragolab



MANEKO

lach:ner



SIAD



tevak
LEYBOLD V ČR A SR



Vitrum
a VWR Company

CHROMSERVIS

SIGMA-ALDRICH

Sekce : Analytická chemie 2

Studium interakce ibuprofenu s β -cyklodextrinem

Autor: Hana Adamková
Ročník: B3
Ústav: analytické chemie
Školitel: prof. RNDr. Vladimír Král, CSc.

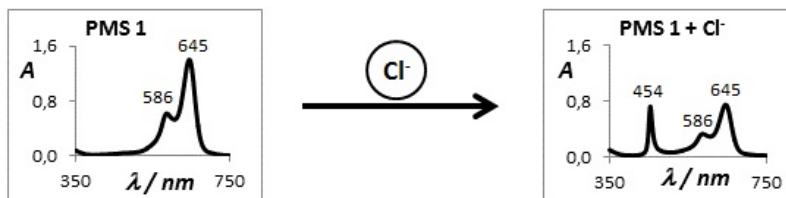
Tato studie se zabývá sledováním komplexace ibuprofenu jako modelového léčiva s β -cyklodextrinem pomocí UV-VIS spektrometrie. β -Cyclodextrin je cyklický oligosacharid, který se skládá ze sedmi glukopyranosových jednotek a svým tvarem připomíná dutý kornout, jehož vnější je hydrofilní, zatímco vnitřek má lipofilnější charakter. Do kavity cyklodextrinu (hostitel) se mohou schovat organické nebo anorganické molekuly (host) za vzniku tzv. inkluzních komplexů, jejichž stechiometrie závisí na velikosti kavity a charakteru hosta. Ibuprofen je typický příklad molekuly, jejíž fyzikálně-chemické vlastnosti mohou být modifikovány pomocí cyklodextrinů, např. zvýšení rozpustnosti nebo potlačení hořké chuti. Ve farmaceutickém průmyslu jsou běžně využívány inkluzní komplexy cyklodextrinů s řadou léčiv pro zlepšení jejich biodostupnosti. Komplexace ibuprofenu s cyklodextriny byla doposud popsána řadou studií, ale stanovené konstanty stability se výrazně lišily, což může být důsledkem kinetiky reakce, na kterou je tato práce zaměřena.

Sekce : Analytická chemie 2

Interakce polymethiniových solí s anorganickými anionty

Autor: Zuzana Hlásková
Ročník: B3
Ústav: analytické chemie
Školitel: doc. Ing. Kamil Záruba, Ph.D.

V absorpčních spektrech vodného roztoku benzothiazolového derivátu polymethiniové soli (PMS1) vzniká nový pás u 454 nm v přítomnosti chloridového nebo síranového aniontu. V předložené práci byly studovány podmínky jeho vzniku s cílem objasnit důvody, proč jej lze ve spektrech pozorovat. Zahrnutí dalších aniontů (halogenidy, oxoanionty) a PMS strukturně podobných látky PMS1 ukázalo silnou selektivitu interakce vedoucí k pozorovanému novému pásu ve spektru. Práce zahrnuje i experimenty při různé koncentraci chloridu a síranu a různém obsahu polárních organických rozpouštědel (methanol, dimethylsulfoxid).



Sekce : Analytická chemie 2

Chelátory iónov biologicky významných látok

Autor: Zuzana Kubulková
Ročník: B2
Ústav: analytické chemie
Školitel: prof. RNDr. Vladimír Král, CSc.

Tridentálne chelátory na báze ftalazin-1-hydrazonu vykazujú cytostatické účinky zatiaľ čo ich mechanizmus účinku nie je doposiaľ známy a popísaný. Jedno z možných vysvetlení je chelatácia kovov nutných pre proliferáciu a fungovanie rakovinových buniek. Lanthanoidy hrajú dôležitú úlohu v determinácii a lokácii benígnych, malígnych a metastatických karcinómoch. Predložená práca je zameraná na štúdium screeningov štruktúrnych interakcií širokej skupiny chelátorov s iónmi biogénnych kovov (Co^{2+} , Cu^{2+} , Cr^{3+} , Fe^{2+} , Fe^{3+} , Mn^{2+} , Ni^{2+} , Zn^{2+} , Ca^{2+} , Mg^{2+}), platinových kovov (Ag^{+} , Au^{3+} , Au^{+} , Pd^{2+} , Pt^{2+} , Pt^{4+}) a lanthanoidov (Gd^{3+} , Eu^{3+}). Ako rozpúšťadlo bol zvolený dimethylsulfoxid DMSO, ktorý ma vysokú schopnosť penetrovat' a tým dopravovat' v ňom rozpustné látky priamo do bunky. DMSO je solvent používaný v medicínskych, preklinických a klinických implikáciách. Ďalší posun zo získaných poznatkov v štúdiu je príprava a izolácia metalokomplexov.

Sekce : Analytická chemie 2

Agregácia vybraných cyklodextrínov

Autor: Bc. Patrícia Michaleová
Ročník: M1
Ústav: analytické chemie
Školitel: prof. RNDr. Vladimír Král, CSc.

Cyklodextríny sú cyklické oligosacharidy, ktoré majú vonkajšiu stranu kruhu hydrofilnú a vnútornú hydrofóbnú. Táto vlastnosť je využívaná v niektorých dôležitých farmaceutických aplikáciách ako napr. zvýšenie rozpustnosti lipofilných a zle rozpustných liečiv. Je tiež známe, že vo vodnom prostredí cyklodextríny vytvárajú agregáty. Táto schopnosť je ovplyvnená koncentráciou cyklodextrínov v roztoku. Tvorba agregátov vybraných cyklodextrínov bola skúmaná pomocou metódy rozptylu svetla.

Sekce : Analytická chemie 2

Metaloporfyrinové deriváty Trögerovýchází a jejich využití v analytické chemii

Autor: Bc. Jakub Sedláček
Ročník: M1
Ústav: analytické chemie
Školitel: doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.

Metaloporfyriny jsou významnými stavebními bloky využívanými v supramolekulární chemii ke tvorbě receptorů. Velká pozornost je věnována zvláště molekulám se dvěma metaloporfyrinovými jednotkami v uspořádání, které umožňuje jejich spolupráci. Příkladem takových molekul jsou metaloporfyrinová Trögerova báze a její nedávno objevený strukturní izomer, spiro-Trögerova báze. Obě báze jsou chirální, liší se ovšem vzdáleností kovů vázaných v porfyrinových jednotkách. Lze proto od nich očekávat odlišné vazebné schopnosti. V předkládané práci byly připraveny Trögerova a spiro-Trögerova báze reakcí (2-aminotetrafenyl-porfyrinato)měďnatého komplexu s formaldehydem v kyselém prostředí. V závislosti na použitém rozpouštědle byl pozorován jen vznik Trögerovy báze (1,4-dioxan), nebo vznik obou izomerů (CHCl₃/THF 99:1). Připravené sloučeniny byly charakterizovány pomocí hmotnostní spektrometrie s vysokým rozlišením a UV-Vis spektroskopie. Pomocí zředovacích experimentů bylo studováno jejich chování v roztoku CH₂Cl₂.

Sekce : Analytická chemie 2

Screening solí Ibuprofenu

Autor: Štěpán Strnad
Ročník: B3
Ústav: analytické chemie
Školitel: prof. RNDr. Vladimír Král, CSc.

Screening nových forem aktivních farmaceutických substancí (API) je nedílnou součástí výzkumu léků. Může jít o začátek vývoje nových léků nebo o hledání vylepšené lékové formy. Tyto formy (soli, polymorfy, kokrystaly) mají různé vlastnosti, jako je rozpustnost, stabilita či biologická dostupnost. Z důvodu nedostatku API se experimenty většinou provádí v mikro-množství a to sebou přináší problémy. Hlavním z nich je fakt, že krystalizace je do jisté míry náhodný proces. Tato práce je zaměřená na robustnost (analytické využití a opakovatelnost) screeningů. Jako modelové léčivo byl vybrán ibuprofen. Byly vytvářeny jeho soli s různými látkami a následně rekrystalizovány v rozpouštědlech. Závěrem práce bylo naměřeni spekter těchto solí pomocí ATR-IR spektroskopie ve střední oblasti a vyhodnocení získaných dat.

Sekce : Analytická chemie 2

Studium tranzientní molekuly SNP v mikrovlnné oblasti

Autor: Bc. Karel Vávra
Ročník: M1
Ústav: analytické chemie
Školitel: prof. RNDr. Štěpán Urban, CSc.

Současné techniky analytické chemie se neomezují jen na měření terestriálních analytů, ale umožňují i atmosférický a interstelární výzkum. Ve zmíněných oblastech se využívá zejména rotační spektroskopie, kdy přesná spektroskopická měření v mikrovlnné oblasti umožňují získat rotační konstanty, které mohou poskytovat cenné informace o geometrii molekul, tj. délkách vazeb a vazebných úhlech. Právě za tímto účelem byla provedena pionýrská měření tranzientní molekuly SNP, která je v pozemských podmínkách vysoce nestabilní. Opačná situace může být v mezihvězdném prostoru, případně v cirkumstelárních atmosférách, kde jsou srážky molekul podstatně méně pravděpodobné. Právě v těchto prostředích, případně v obálkách umírajících hvězd, lze předpokládat i výskyt SNP, která díky přítomnosti tří biogenních prvků může poskytovat základní informace o možnostech vzniku života ve vesmíru. Úspěšné naměření spekter SNP může být podkladem pro vytvoření speciálního projektu pro observatoř ALMA, kterou Česká Republika může využívat.

Sekce: **Teoretická fyzikální chemie**
místnost A125, 9.00 hod.

Komise:

Předseda: prof. Ing. Anatol Malijevský, CSc.

Členové: Ing. Michal Bureš, CSc.
Ing. Jozef Lengyel (ÚFCH J. Heyrovského, AV ČR, v.v.i.)

Soutěžící:

Belloň Tomáš
Benroth Martin
Jurásková Veronika Bc.
Kubečka Jakub
Martinek Tomáš
Palivec Vladimír

Sponzoři sekce Teoretická fyzikální chemie



www.nicoletcz.cz

Swagelok
Ventile & Fittings Praha

Distributor Swagelok pro ČR a SR, Polsko, Ukrajinu a Bělorusko

www.ventile.cz



www.mega.cz



www.membrain.cz



www.merckmillipore.cz



<http://www.pragolab.cz>



www.wtwcz.com



www.tevak.cz



www.vitrum.cz



www.czemp.cz



www.medicem.com

Sekce : Teoretická fyzikální chemie

Modelování fotochemických vlastností halogenovaných uhlovodíků s využitím ab initio teorie

Autor: Tomáš Belloň
Ročník: B3
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: doc. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.

Cílem mé práce je studium fotochemie molekul halogenovaných uhlovodíků, konkrétně molekuly CFC-12 (CCl_2F_2). Halogenované uhlovodíky patří k nejvýznamnějším zdrojům reaktivních částic způsobujících destrukci stratosférického ozónu. Přes jejich jednoduchost však dosud plně nerozumíme mechanismu fotodisociace těchto molekul.

Prvním krokem bylo vytvoření modelu absorpčního spektra molekuly CCl_2F_2 . S použitím reflexního principu spojeného s metodou molekulární dynamiky s dráhovými integrály jsem modeloval tato spektra na různých úrovních ab initio teorie. Vypočtená data byla porovnána s experimentem. Výsledky ukázaly, že absorpční spektrum je extrémně silně podmíněno distribucí molekulárních geometrií v základním stavu. Jednodušší ab initio metody nebyly schopny popsat geometrii molekuly CFC-12 dostatečně přesně, což vedlo ke značným odchylkám od experimentu. Výsledkem práce je simulační protokol, pomocí kterého je možné modelovat spektra CFC-12 dobře reprodukcující polohu, šířku i intenzitu absorpčního pásu. Tento protokol je možné snadno rozšířit i na větší agregáty, kupříkladu na freony adsorbované na ledových částicích. Získané výsledky by mohly přispět k lepšímu pochopení fotodisociace CCl_2F_2 ve stratosféře, kde v důsledku rozpadu této molekuly dochází k degradaci ozónové vrstvy.

Sekce : Teoretická fyzikální chemie

Mutace a halogeny: σ -díra jako mocný nástroj novodobých alchymistů

Autor: Martin Benroth
Ročník: B3
Ústav: organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i.
Školitel: RNDr. Michal Kolář, Ph.D.

Snaha o nalezení látky, která by s vysokou specifitou a účinností inhibovala patřičný enzym, provází návrháře léčiv takřka od nepaměti. Revoluce nastala s rozvojem počítačové techniky, kdy přišla velká řada možností, jak takovou látku odhalit.

V naší práci byl k tomuto hledání využit přístup zvaný alchymické mutování. V průběhu MD simulace protein-inhibitorového komplexu jsme na aromatickém kruhu inhibitoru měnili atomy vodíku na atomy fluoru a naopak, přičemž jsme sledovali změnu Gibbsovy volné energie. Vzhledem k tomu, že se v aktivním místě proteinu vyskytuje halogenová vazba, nespokojili jsme se pouze s popisem pomocí klasického silového pole, nýbrž jsme přiblížili náš systém realitě použitím explicitní σ -díry.

Pomocí výpočtů se nám podařilo identifikovat potenciálně účinné inhibitory aldosa reduktasy. Exaktnější popis halogenové vazby se dle očekávání projevil významným přiblížením vypočítaných hodnot k hodnotám experimentálním.

Sekce : Teoretická fyzikální chemie

Studium fotochemických vlastností D-luciferinu, oxyluciferinu a jejich selenových analogů metodami teoretické chemie

Autor: Veronika Jurásková
Ročník: B2
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: doc. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.

Tato práce se zaměřuje na výpočty fotochemických vlastností luciferinu, oxyluciferinu a jejich selenových analogů s využitím přístupů teoretické chemie. Byly studovány struktury D-luciferinu (tj. fotochemicky aktivní molekuly světluškovitých (Lampyridae)) a šesti tautomerních forem oxyluciferinu. Geometrie těchto struktur byly optimalizovány v plynné fázi pomocí metod funkcionálu hustoty (metoda B97D sází 6-31g*). Pro jednotlivé struktury byla simulována elektronová absorpční spektra se zahrnutím prvních šesti excitovaných stavů. Byly uvažovány jak samotné molekuly v plynné fázi, tak ve vodném roztoku modelovaném dielektrickým kontinuem nebo menšími vodními klastry. Získané údaje byly srovnány s nově publikovanými experimentálními hodnotami energií a extinkčních koeficientů. Z vypočtených dat vyplynula shoda s experimentem pouze v získaných energiích, intenzity vypočteného spektra vycházely typicky vyšší než v experimentu. Elektronové stavy oxyluciferinu byly proto dále důkladně studovány pomocí řady kvantově-chemických metod. Dále byly vytvořeny předpokládané struktury selenového analogu D-luciferinu (oba atomy S nahrazeny Se) a tautomerů oxyluciferinu a opět optimalizovány v plynné fázi metodou B97D sází 6-31g*. Následně byly určeny vlastnosti predikovaných molekul.

Sekce : Teoretická fyzikální chemie

Nitrofenoly jako atmosférické prekurzory: Teoretické studium fotochemie o-nitrofenolu

Autor: Jakub Kubečka
Ročník: B2
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: doc. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.

V nedávné době byly nitrofenoly uvažovány v kontextu fotochemické tvorby HNO_2 v atmosféře. Cílem předkládané práce je teoretické studium primárních fotochemických kroků v molekule o-nitrofenolu. Tato molekula má v základním stavu intramolekulární vodíkovou vazbu, která by mohla umožnit rychlý přenos protonu, resp. vodíku mezi -OH a -NO₂ skupinami. V první části práce jsem provedl optimalizaci o-nitrofenolu a jeho příslušných aci-nitroforem (tj. forem s intramolekulárně přeneseným atomem vodíku) v elektronově základním singletním a tripletním stavu. Porovnal jsem výsledky získané různými metodami teoretické chemie, od vysoce korelované CCSD(T) metody k řadě DFT metod s různými funkcionály. Použil jsem také multireferenční CASSCF přístup. Multireferenční efekty se ukázaly být pro některé struktury velmi důležité. Popsal jsem navíc hyperplochu potenciální energie popisující přeskok vodíku z -OH na -NO₂ skupinu v o-nitrofenolu v různých excitovaných stavech. Tyto děje budou diskutovány v kontextu atmosférické chemie.

Sekce : Teoretická fyzikální chemie

Interakce alkalických a halidových iontů s peptidovou vazbou

Autor: Tomáš Martinek
Ročník: B3
Ústav: organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i.
Školitel: prof. Mgr. Pavel Jungwirth, CSc., DSc.

Vliv různých iontů solí na stabilitu bílkovin ve vodě je znám už od roku 1888, kdy Franz Hofmeister navrhl svou lyotropní řadu. Kromě procesů jako je vysolování a vsolování, tedy rozpustnost bílkovin v roztoku, mohou mít ionty vliv na jejich terciární a kvartérní strukturu, narušovat intermolekulární nekovalentní vazby nebo naopak mohou být přímo zabudovány v jejich struktuře, pomáhat ji tvořit a umožňovat tak správnou funkci bílkovin. Jedná se o komplexní děje, ve kterých hraje roli interakce bílkoviny s rozpouštědlem, bílkoviny s ionty a iontů samotných s rozpouštědlem. V této práci jsme se zaměřili na interakce iontů s kostrou bílkoviny, konkrétně s peptidovou vazbou. Jako model peptidové vazby byla vybrána malá molekula N-metylacetamid, která obsahuje peptidovou vazbu a její nejbližší okolí. Pomocí kvantově chemických výpočtů tak byly kvantifikovány iontové specifické interakce alkalických kationtů a halidových aniontů s C=O a N-H skupinou peptidové vazby. Protože se zajímáme o procesy v reálném biologickém kontextu, byl celý systém umístěn do vodného prostředí pomocí modelu polarizovatelného kontinua kombinovaného s mikrohydratací.

Sekce : Teoretická fyzikální chemie

Vliv vodného prostředí na vertikální ionizaci 8-Oxoguaninu v nukleosidech a nukleotidech

Autor: Vladimír Palivec
Ročník: B3
Ústav: organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i.
Školitel: prof. Mgr. Pavel Jungwirth, CSc., DSc.

8-Oxoguanine je jeden z nejběžnějších produktů při oxidačním poškození DNA. Může způsobit vážné problémy, pokud se nachází uvnitř DNA. Některé vědecké výzkumy ukazují, že nevázaný může být i zdraví prospěšný. Má nižší ionizační energii než guanine, což je nukleobáze s nejnižší ionizační energií ze všech pěti nukleobází. Z tohoto důvodu může být 8-Oxoguanine oxidován namísto jiné důležité komponenty. Abychom lépe pochopili procesy, jenž se odehrávají uvnitř buněk, které obsahují tuto poškozenou nukleobázi, je třeba znát přesné hodnoty ionizační energie a faktory které ji ovlivňují.

V této práci se zabývám kvantově chemickými výpočty vertikální ionizace 8-Oxoguaninu, jeho nukleosidů a nukleotidů. V reálném světě neprobíhají procesy ve vakuu, nýbrž ve vodném prostředí, a proto je mým hlavním záměrem demonstrovat zásadní vliv rozpouštědla. Solvatace je simulována modelem polarizovatelného kontinua. Nejdůležitější hodnoty vertikální ionizační energie jsou 6.73 eV pro dvakrát deprotonovaný 8-Oxoguanosine monofosfát a 6.69 eV pro dvakrát deprotonovaný 8-Oxo-2'-deoxyguanosine monofosfát. Nakonec jsem prozkoumal konformační vliv (zvláště nukleotidů) na stabilitu molekul a následnou ionizaci.

Sekce:	Aplikovaná fyzikální chemie I. místnost A402, 8.30 hod.
Komise:	
Předseda:	doc. Ing. Ivan Cibulka, CSc.
Členové:	doc. Ing. Lidmila Bartovská, CSc. Ing. Ondřej Vopička, Ph.D.
Soutěžící:	Bc. Cerhová Marie Bc. Lanč Marek Bc. Mahnel Tomáš Bc. Novotná Hana Bc. Polák Jakub Bc. Radoň Václav Bc. Svoboda Vít Bc. Vataščin Erika

Sponzoři sekce Aplikovaná fyzikální chemie I.



www.nicoletcz.cz

Swagelok
Ventile & Fittings Praha

Distributor Swagelok pro ČR a SR, Polsko, Ukrajinu a Bělorusko

www.ventile.cz



www.mega.cz



www.merckmillipore.cz



www.membrain.cz



<http://www.pragolab.cz>



www.wtwcz.com



www.tevak.cz



www.vitrum.cz



www.czemp.cz



www.medicem.com

Sekce : Aplikovaná fyzikální chemie I.

Příprava na rovnovážné experimenty s hluboce eutektickými rozpouštědly

Autor: Bc. Marie Cerhová
Ročník: M2
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Ing. Dana Fenclová, CSc.

Práce se zaměřuje na literární rešerši týkající se nové generace rozpouštědel pojmenovaných jako hluboce eutektická rozpouštědla (Deep Eutectic Solvents). Jedná se o kapaliny složené ze dvou až tří pevných látek, které tvoří eutektické směsi s bodem tání nižším než 100 °C. Hluboce eutektická rozpouštědla patří do kategorie tzv. „zelených rozpouštědel“ - jsou snadno dostupná, netoxická, recyklovatelná a biologicky odbouratelná.

Práce zahrnuje i přípravu hluboce eutektické směsi cholin chlorid + močovina, která následně bude použita jako rozpouštědlo pro experimentální stanovení limitních aktivitních koeficientů těkavých organických látek.

Sekce : Aplikovaná fyzikální chemie I.

Moderní polymerní materiály s vnitřní mikroporozitou

Autor: Bc. Marek Lanč
Ročník: M2
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Ing. Karel Friess, Ph.D.

Cílem práce bylo studium sorpce plynů (N_2 , O_2 , CH_4 a CO_2) v tzv. polymerech s vnitřní mikroporozitou. Díky svým unikátním vlastnostem mohou tyto nové polymerní materiály nalézt v budoucnu uplatnění v průmyslových aplikacích zaměřených na separaci plynů a par (například při separaci CH_4 od CO_2 a dalších složek v bioplynu). Prvním polymerem ze skupiny těchto materiálů byl tzv. PIM-1, jehož mimořádná propustnost v kombinaci s přiměřenými hodnotami ideálního separačního faktoru α pro dvojice plynů CO_2/CH_4 , O_2/N_2 , H_2/N_2 vedly v roce 2008 k aktualizaci (posunu) původní Robensonovy horní meze z roku 1991.

Sorpční experimenty byly prováděny při 25°C gravimetricky s použitím McBainových křemenných spirálních vážek ve vysokotlaké sorpční cele v intervalu tlaků 0-15 bar. V práci byl studován polymer s vnitřní mikroporozitou PIM-1 a jeho další nové varianty pojmenované jako PIM-EA-TB, PIM-TRIPTYCENE, PIM-RY a PIM-AMINE. Z naměřených dat byly vyhodnoceny sorpční izotermy, vypočteny sorpční koeficienty a z kinetiky sorpčních experimentů získány příslušné hodnoty difuzních koeficientů. Taktéž byl sledován trend závislosti transportních parametrů na fyzikálně-molekulárních charakteristikách plynů. Získané poznatky budou využity pro další práci v oblasti materiálového výzkumu.

Sekce : Aplikovaná fyzikální chemie I.

Termochemická studie bitumenu a optimalizace množství vzorku pro měření na kalorimetru microDSCIII

Autor: Bc. Tomáš Mahnel
Ročník: M2
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: doc. Ing. Květoslav Růžička, CSc.

Předložená práce navazuje na příspěvek do loňské SVK, kde jsem se věnoval termodynamické studii polycyklických aromatických uhlovodíků. Tyto sloučeniny se používají jako modelové látky pro bitumen (česky též živice), který je součástí nekonvenční ropy těžené např. v Kanadě (stát Alberta). A právě z Calgary pocházejí vzorky ropy, jejichž vybrané termochemické veličiny byly změřeny a jsou prezentovány v této práci.

Druhou, neméně důležitou, částí práce bylo nalezení minimálního množství vzorku použitelného pro měření tepelných kapacit na kalorimetru microDSCIII od firmy Setaram, neboť komerčně dostupné vzorky PAH jsou často velice drahé. Testování bylo provedeno pomocí naftalenu.

Sekce : Aplikovaná fyzikální chemie I.

Molekulární základy fotostability: deexcitační mechanismus kyseliny p-aminobenzoové

Autor: Hana Novotná
Ročník: M1
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: doc. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.

Fotostabilita je vlastnost molekuly absorbovat záření, aniž by se výrazně zvýšila její reaktivita, nebo došlo k její destrukci. Kyselina p-aminobenzoová (PABA) patří k prvním fotostabilním molekulám využívaným v kosmetickém průmyslu jako prostředek k ochraně kůže proti UV záření.

Ve své práci se zaměřuji na teoretické studium fotochemických vlastností PABA. S použitím reflexního principu v kombinaci s kvantově-chemickými metodami na bázi teorie funkcionálu hustoty jsem modelovala absorpční spektrum molekuly PABA. Vypočítané absorpční spektrum vykazovalo dobrý soulad s experimentem. V další fázi své práce jsem se začala věnovat následným dějům po ozáření molekuly – hledání podrobného mechanismu deexcitačního procesu. Teoretické výpočty mohou v budoucnu sloužit jako základ designu nových fotostabilních molekul s potenciálním využitím v kosmetickém průmyslu.

Sekce : Aplikovaná fyzikální chemie I.

Závislost limitního aktivního koeficientu toluenu na koncentraci K₂SO₄

Autor: Bc. Jakub Polák
Ročník: M1
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Dr. Ing. Pavel Vrbka

Znalost limitních aktivních koeficientů organických látek ve vodě má důležitý význam jak pro průmyslovou chemii, tak pro ekologii (např. zpracování odpadních vod). Zvláštní pozici zde pak zastávají data získaná pro vodné roztoky anorganických solí. Pro popis vlivu soli na limitní aktivní koeficient organické složky se používá Sečenovova rovnice, která předpokládá lineární vztah mezi koncentrací soli a logaritmem limitního aktivního koeficientu.

V rámci této práce byla pomocí saturační metody (IGS) podrobně proměřena závislost limitního aktivního koeficientu toluenu na koncentraci síranu draselného ve vodném roztoku při 25 °C v rozsahu 0,2 mol·kg⁻¹ až 0,65 mol·kg⁻¹. Účelem těchto měření bylo odhalení možného anomálního chování toluenu v systému voda+K₂SO₄ a tedy odchylek od Sečenovovy rovnice, které vyplývaly z dřívějších experimentů.

Sekce : Aplikovaná fyzikální chemie I.

Rovnováha kapalina – kapalina perfluorovaných uhlovodíků s ethery

Autor: Bc. Václav Radoň
Ročník: M1
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: doc. Ing. Karel Řehák, CSc.

Perfluorované uhlovodíky (PFC) jsou látky, které obsahují pouze atomy uhlíku a fluoru. PFC vykazují nízkou vzájemnou rozpustnost s běžnými rozpouštědly. Výjimkou jsou některé systémy PFC + ether, u kterých je vzájemná mísitelnost vyšší či dokonce neomezená. Pro organické syntézy prováděné ve dvoufázovém reakčním prostředí jsou zajímavé systémy PFC + ether, u kterých je dosažitelná horní kritická rozpouštěcí teplota. Předmětem této práce je popis rovnováhy kapalina – kapalina ve vybraných systémech PFC + ether. Experimentální hodnoty vzájemných rozpustností byly v závislosti na teplotě naměřeny objemovou metodou. Naměřená data byla korelována rovnicí Extended Scaling-Law, která je vhodná pro popis heterogenních systémů, a to i v okolí kritických rozpouštěcích teplot. Pomocí uvedené rovnice byly u studovaných systémů tyto teploty odhadnuty spolu s příslušnými kritickými složeními.

Sekce : Aplikovaná fyzikální chemie I.

Overnotová spektroskopie amoniaku

Autor: Bc. Vít Svoboda
Ročník: M1
Ústav: fyzikální chemie JH, AV ČR
Školitel: Mgr. Ondřej Votava, Ph.D.

Amoniak je jednoduchý hydrid, přesto hraje nezanedbatelnou roli ve fyzikálně-chemických dějích probíhajících v zemské atmosféře. Amoniak je zajímavou molekulou i pro astronomy, kde byl první molekulou detekovanou na Jupiteru, dále byl detekován v lehčích hnědých trpaslících a v neposlední řadě může sloužit jako teplotní senzor atmosfér vnějších planet a exoplanet⁵. Spektrální oblast okolo 1,5 μm je pro amoniak oblastí zásadního významu³⁻⁴. Nacházejí se zde první overtóny a kombinační pásy N-H valenční vibrace. I přes velké úsilí řady vědců není tato oblast dosud plně spektroskopicky charakterizována¹⁻⁵. To je dáno tím, že se v oblasti nachází velký počet ro-vibračních pásů, což znesnadňuje experimentální práci i teoretické výpočty⁵. V předkládané práci budou prezentovány nejnovější výsledky z rozsáhlého měření amoniaku v supersonické expanzi v oblasti od 6600 do 6700 cm^{-1} . Bude poukázána zásadní výhoda měření v expanzích pro identifikaci nízko ležících rotačních linií. Bude prezentována aplikace metody dvouteplotní analýzy pro empirické přiřazení rotačních kvantových čísel. Dále bude diskutován vliv nukleárního spinu na charakter rotačně chladných spekter amoniaku.

Reference:

- [1] Lunsberg-Nielsen, J. Mol. Spec., **162** (1993), 230-245
- [2] Berden G., Chem. Phys. Lett., **307** (1999), 131-138
- [3] Li-Hong X., J Mol. Spec., **243** (2007), 219-226
- [4] Li-Hong X., J Mol. Spec., **251** (2008), 241-251
- [5] Sung K., JQSRT, **113** (2012), 1066-1083

Sekce : Aplikovaná fyzikální chemie I.

Rovnováha kapalina - pára v systémech voda + iontová kapalina, obsahující 1-ethyl-3-methylimidazoliový kation ([EMIM])

Autor: Bc. Erika Vataščin
Ročník: M2
Školitel: doc. Ing. Vladimír Dohnal, CSc.

Práce se zabývá experimentálním studiem termodynamického chování systémů voda + [EMIM][EtSO₄] (ethylsulfát) a voda + [EMIM][MeSO₃] (methansulfonát). Ke stanovení rovnováhy kapalina-pára byla použita rychlá a přesná metoda, která spočívá v měření aktivity vody komerčním přístrojem AquaLab 4TE. Pro každý systém byla měření provedena na vzorcích od $a_w = 0,93$ do $a_w = 0,08$ při sedmi teplotách v rozsahu od 288,15 K do 318,15 K. Následně byla provedena korelace teplotní a koncentrační závislosti získaných dat. Získané výsledky byly porovnány s literárními daty. Termodynamické chování studovaných systémů bylo diskutováno v souvislosti s molekulární strukturou iontových kapalin a molekulárními interakcemi a také porovnáno s termodynamickým chováním systémů voda + [EMIM][OTf] (trifluoromethansulfonát), voda + [EMIM][DCA] (dikyanamid) a voda + [EMIM][SCN] (thiokyanát), které byly již dříve studovány v naší laboratoři.

Sekce:	Aplikovaná fyzikální chemie II. místnost A135 (knihovna), 9.00 hod.
Komise:	
Předseda:	prof. Dr. Ing. Pavel Matějka
Členové:	doc. Ing. Pavel Chuchvalec, CSc. Ing. Kryštof Pilnáček RNDr. Roman Chaloupka, Ph.D. (MEDICEM Institute)
Soutěžící:	Borbášová Timea Číhal Petr Dvořáková Michaela Hádková Žofie Kantnerová Kristýna Kludský Miroslav Matoušová Maja

Sponzoři sekce Aplikovaná fyzikální chemie II.



www.nicoletcz.cz



www.ventile.cz



www.mega.cz



www.membrain.cz



www.merckmillipore.cz



<http://www.pragolab.cz>



www.wtwcz.com



www.tevak.cz



www.vitrum.cz



www.czemp.cz



www.medicem.com

Sekce : Aplikovaná fyzikální chemie II.

Měření difúzních koeficientů chirálních látek v membránách ponořených do kapaliny

Autor: Tímea Borbášová
Ročník: B3
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Ing. Hovorka Štěpán, Ph.D.

Práce se zabývá experimentálním studiem kinetiky transportu rozpuštěné kapalné látky neporézní membránou z dvousložkového roztoku do čistého rozpouštědla. Pro toto měření je k dispozici nová pertrakční cela a cílem práce bylo ji otestovat provedením pertrakčních měření s roztokem methyl laktátu v heptanu. Pertrakční měření spočívá v odběrech kapalných vzorků během určitého časového úseku. Tyto vzorky jsou následně analyzovány chromatografickou analýzou, aby byly získány údaje o časové závislosti složení potřebné pro vyhodnocení měření. Pro popis kinetiky transportu membránou byl použit jednoduchý matematický model, kterým byla získaná experimentální data zpracována a vyhodnocen difúzní koeficient.

Sekce : Aplikovaná fyzikální chemie II.

Charakterizace sorpčních vlastností polybutylen sukcinátu

Autor: Číhal Petr
Ročník: B3
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Ing. Ondřej Vopička, Ph.D.

Cílem práce je charakterizace sorpčních vlastností PBS (polybutylen sukcinát) pro vonné látky používané v potravinářském průmyslu. PBS je potenciální polymer pro obalové materiály s biodegradabilním chováním, tudíž je zde kladen nárok na nízkou sorpci vonných látek z potravin. Měřené látky jsou (*R*)-(+)-limonen, ethylcaproát, ethylacetát, ethylbutyrát, *n*-hexanol a heptanal při teplotě 23°C.

Sekundárním cílem práce je charakterizace neustálené difuze pro tyto málo těkavé látky, kde dochází k razantnímu poklesu tlaku par vlivem sorpce relativně velkého množství látky vzhledem k množství látky přiváděné. Zahrnutí poklesu tlaku je řešeno změnou funkce pro sorpci par v polymeru, kde místo předpokládaného jednotkového skoku tlaku je zaváděna spline funkce tlaku a složena s přenosovou funkcí pomocí konvoluce.

Experimenty byly prováděny v sorpční aparatuře gravimetrickou metodou pomocí McBrainových spirálních vážek. Algoritmus pro zpracování záznamů sorpce je vyvinut v programu Maple16.

Sekce : Aplikovaná fyzikální chemie II.

Experimentální stanovení povrchového napětí kapalin

Autor: Michaela Dvořáková
Ročník: B3
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Ing. Alena Randová, Ph.D.; doc. Ing. Lidmila Bartovská, CSc.

Práce porovnává čtyři metody pro měření povrchového napětí vybraných kapalin:

- 1) komerční přístroj LAUDA – metoda odtrhávání prstence
- 2) aparatura pro měření povrchového napětí metodou visící kapky
- 3) stalagmometr – metoda založená na počtu kapek v určitém objemu
- 4) kapilární tensiometr – metoda založená na měření výšky hladiny v kapiláře.

Měření bylo prováděno pro vodu, propan-1-ol a roztok surfaktantu. Pro potřeby kalibrace byl použit ethanol.

Sekce : Aplikovaná fyzikální chemie II.

Perspektivní hluboce eutektické rozpouštědlo: betain + kyselina levulová

Autor: Žofie Hádková
Ročník: B3
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: doc. Ing. Vladimír Dohnal, CSc.

Eutektické směsi s nízkou teplotou tuhnutí tvořené organickými látkami z obnovitelných zdrojů se dnes ukazují jako perspektivní levná, bio- a eko-kompatibilní alternativa iontových kapalin. Hluboce eutektická rozpouštědla (Deep Eutectic Solvent, DES) či obecněji kapalně směsi s nízkou teplotou fázového přechodu (Low Transition Temperature Mixture, LTTM) jsou žhavým tématem posledního roku či dvou. Termofyzikální, termodynamické a další vlastnosti těchto nových médií a jejich interakce s dalšími látkami nejsou vesměs známy, a představují proto výzvu pro experimentální výzkum.

V předložené práci byl nejprve proveden screening potenciálních LTTMs s cílem vybrat pro další zkoumání nejperspektivnější kandidáty. Z devíti připravených směsí byly takto vybrány dvě tvořící při pokojové teplotě dlouhodobě stabilní kapaliny s nejnižší viskozitou: (DES1) betain + kyselina levulová (1:2) a (DES2) cholin chlorid + kyselina levulová (1:2).

Práce dále prezentuje dosud provedená měření rovnováhy kapalina-pára v pseudobinárním systému DES1 + voda. Měřena byla aktivita vody komerčním přístrojem AquaLab 4TE pracujícím na principu stanovení rosné teploty rovnovážné parní fáze metodou chlazeného zrcátka. Měření provedená v závislosti na složení a teplotě ukazují na slabé kladné odchylky od Raoultova zákona a exotermní míšení.

Sekce : Aplikovaná fyzikální chemie II.

Reakce orthoftalaldehydu s aminokyselinami

Autor: Kristýna Kantnerová

Ročník: B3

Ústav: fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v. v. i.

Školitel: prof. RNDr. Jiří Ludvík, CSc.

Reaktivita orthoftalaldehydu (OPA) s nukleofily je již dlouho známa. Například reakce OPA s aminokyselinami tvoří základ analytické metody pro jejich stanovení. OPA se též používá jako desinfekční činidlo, jelikož reaguje s aminoskupinami a jinými nukleofilními centry peptidů u mikroorganismů. Tím dojde ke změně 3D uspořádání peptidu a následně k zániku mikroorganismu. Mechanismus těchto procesů není zcela vysvětlen, proto probíhá elektrochemické studium na modelových látkách (amoniak, aminy, aminokyseliny).

Ke studiu kinetiky reakcí byla použita polarografie a UV/Vis spektrometrie. Pro sledování reakce bylo vybráno devět aminokyselin, které při prvních experimentech vykazovaly podobné chování (glycin, glycin-ethylester, alanin, leucin, isoleucin, valin, norvalin, kyselina aminomáselná, aminoisomáselná). K sérii byl přidán lysin kvůli druhé aminokyselině. Měření byla prováděna ve dvou fosforečnanových pufrách o různých pH tak, aby bylo pH roztoku jednou nižší a jednou vyšší než pK_a aminokyseliny.

Analýzou kinetických dat bylo zjištěno, že rychlost reakce závisí jednak na pH roztoku (přičemž rychleji reakce probíhá při vyšším pH), jednak na tom, zda byl zásobní roztok OPA připraven ve vodném, či v nevodném rozpouštědle. Při použití vodného rozpouštědla pro přípravu zásobního roztoku je podle UV/Vis spekter reakce rychlejší. Z toho plyne, že předřazená hydratace OPA ve vodném prostředí hraje velkou roli při reakci s aminokyselinami, dá se i usuzovat, že reaktivní částicí není ftalaldehyd jakožto dikarbonyl, ale jeho monohydratovaná forma.

Sekce : Aplikovaná fyzikální chemie II.

Bobtnání, sorpce a difuze methanolu v Nafionu

Autor: Miroslav Kludský

Ročník: B3

Ústav: fyzikální chemie

Školitel: Ing. Ondřej Vopička, Ph.D.

Předmětem této studie je měření sorpce par metanolu a bobtnání Nafionu v prostředí metanolvých par při 25 a 40 °C. Nafion je perflorovaná polymerní organická kyselina obsahující $-SO_3H$ skupiny. Pro svou chemickou stálost je Nafion potenciálně vhodný jako materiál pro výrobu separačních membrán. Kromě této aplikace jsou Nafionové membrány široce používány např. v metanolvých palivových článcích. V této práci jsou studovány teplotní závislosti neustálené difuze a rovnovážné sorpce metanolu v Nafionu. Aktivační energie difuze a izomerické teplo sorpce metanolu v Nafionu jsou vypočteny z experimentálně získaných dat. Sorpce a difuzní koeficient metanolu roste s rostoucí teplotou, zatímco bobtnání Nafionu v parách metanolu je teplotně nezávislé. Výsledky byly získány měřením na stávající gravimetrické sorpční aparatuře, součástí práce je vývoj metodiky měření rovnovážného zbobtnání polymeru, měřeného pomocí mikroskopie vzorku v definované plynné směsi metanol-vodík za atmosférického tlaku.

Sekce : Aplikovaná fyzikální chemie II.

Rovnováha kapalina – kapalina v systémech obsahujících γ -valerolakton

Autor: Maja Matoušová
Ročník: B3
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: doc. Ing. Karel Řehák, CSc.

γ -Varelolakton (GVL) je látka, kterou je možno ve velkém měřítku vyrábět z biomasy, a kterou lze využít jako ekologické rozpouštědlo či jako motorové biopalivo. Z tohoto hlediska jsou informace o vzájemné mísitelnosti GVL a uhlovodíků velmi žádoucí. Tato práce se zabývá stanovením rovnováhy kapalina–kapalina v systémech GVL + n-heptan a GVL + cyklohexan. Data byla měřena přímou analytickou metodou využívající plynový chromatograf. Získané výsledky byly korelovány pomocí rozšířeného škálovacího zákona, což umožnilo vyhodnotit horní kritické rozpouštěcí teploty studovaných systémů.

Sekce: **Matematické modelování v chemickém inženýrství
posluchárna B III, 9.00 hod**

Komise:

Předseda: prof. Ing. Igor Schreiber, CSc.

Členové: Ing. Martin Kohout, Ph.D.

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

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

Ing. Michal Vonka

Ing. Richard Pokorný

Soutěžící:

Bc. Konopka Ladislav

Bc. Kubová Petra

Bc. Leskovjan Martin

Bc. Pelc Václav

Pospíšil Martin

Sládek Viktor

Voclová Malvína

Zitková Anna

Sponzoři sekce :

Mondi Štětí a.s.
Momentive Specialty Chemicals, a.s.
Glass Service, a.s.
Chemoprojekt Nitrogen, a.s.
Lovochemie, a.s.
Ricardo Prague s.r.o.
Pure Bohemia, s.r.o.
MemBrain, s.r.o.
Lonza Biotec s.r.o.
Škoda Auto, a.s.
Medicem Group, s.r.o.



ŠKODA



Lonza



Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Modeling of triboelectrification in polymer systems

Autor: Bc. Ladislav Konopka
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

In everyday life we often come in contact with electrostatic charge located on the surfaces of materials. Triboelectrification, i.e., charging by the friction is considered to be the crucial phenomenon, causing the charge separation most frequently. Triboelectrification is observed also for objects made of the same material. Although triboelectrification is a ubiquitous feature of industrially important dry particulate systems, its origin is regrettably understood only poorly. Charging is very complex problem (with the true physical base in quantum mechanics), affected by many parameters of the system, the material and the environment and it is difficult to correctly interpret experiments even in system like polymer reactor with particles of the same material. Thus mathematical modeling has to be involved as a tool for better understanding. Mathematical model including particle-particle and particle-wall interactions in fluidized-bed polymer reactor with consequent triboelectric charging was developed. The Discrete Elements Method based on Newton's force law is utilized. Since solid polymer particles in the gas-dispersion reactor are considered, the particles motion and mechanics is influenced and described by elastic contact, adhesion, friction and electrostatic effects. Presented model thus provides better insight into unwanted processes like sheeting or particle aggregation taking place in the polymerization reactor.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Předpověď pohybu osob při požární evakuaci

Autor: Bc. Petra Kubová
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

Předkládaná práce je zaměřena na předpověď pohybu osob z prostoru zasaženého požárem pomocí počítačového simulačního programu FDS+Evac. Evakuace osob z objektu zasaženého požárem je velmi důležitá problematika, která přímo vede k ochraně lidských životů. Pohyb a chování lidí během požární evakuace může být ovlivňován jak požárem samotným, tak psychickými reakcemi na stresovou situaci. Zvolenou modelovou situací je požár v 5.NP studentské koleje VOLHA v Praze. Evakuační model obsahuje algoritmus výběru únikového východu jedinců, jehož vstupními parametry jsou hustota kouře, toxicita spalin a viditelnost dostupných únikových východů. Hlavním cílem této práce je parametrická studie vlivu těchto parametrů na chování osob při evakuaci a výběr únikového východu.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Simulace stárnutí automobilového katalyzátoru pro adsorpci a redukci NO_x

Autor: Bc. Martin Leskovjan
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Automobilové katalyzátory během svého provozu podléhají stárnutí, které vede k postupné zhoršování jejich účinnosti (deaktivaci). Jedním z faktorů ovlivňujících stárnutí katalyzátoru je teplotní namáhání, což se projevuje změnami ve struktuře katalytické vrstvy – slinutím a zmenšením aktivního povrchu katalytických center. Tato práce navazuje na laboratorní měření průmyslového vzorku katalyzátoru s ukládáním a redukcí NO_x (typ NSRC) a zabývá se jeho ztotožněním s 1D matematickým modelem. Nejprve byly vyhodnoceny série měření se vzorky čerstvého katalyzátoru (zápalné křivky oxidace CO a HC, adsorpce a redukce NO_x, ukládací kapacita kyslíku). Následně byly stejné experimenty vyhodnoceny i s vzorkem téhož katalyzátoru ke konci předepsané životnosti. Porovnáním vyhodnocených dat bylo možné kvantifikovat rozdíly mezi čerstvým a deaktivovaným vzorkem katalyzátoru. Model najde uplatnění při navrhování systémů pro ošetření automobilových spalín v průmyslové praxi.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Návrh procesního simulátoru v prostředí jazyka MATLAB

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

V současné době existuje na trhu řada procesních simulátorů. Většinou se jedná o komerční produkty, jejichž licenční poplatky jsou velmi vysoké. Obsluha takovýchto programů vyžaduje kvalifikovaný personál. Pro řešení jednodušších nebo speciálních úloh je často výhodnější vývoj vlastního simulačního software, který může být navíc uzpůsoben pro konkrétní účely. Cílem práce je adaptace již existující beta verze procesního simulátoru vyvinutého v Matlabu. Upravený simulační program bude demonstrován porovnáním řešení smyčky reaktoru s recyklem klasicky („ručně“) a v prostředí Matlabu. Předkládané řešení je ovšem možné použít i na podstatně složitějších úloh.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Modelling of diffusion and capillary condensation in percolating network system

Autor: Martin Pospíšil
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Mgr. Alexandr Malijevský, Ph.D; prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Microporous materials are utilized in broad spectrum of applications. One field of interest is controlled transport and targeted release of substances encapsulated in particles with microporous walls. Diffusion creep starts to occur as the result of concentration gradient between inner and outer environment when such particle is put in aqueous environment as long as the sufficient fraction of the pores is continuously filled by liquid. However, the diffusion creep diminishes with appearance of discontinuities of liquid in the pores, while at some critical point (percolation threshold) the diffusion stops effectively. Such discontinuities result from capillary condensation. Pore surface could be modified to be responsive to exogenous stimuli (e.g. temperature-responsive polymer brush) thus making the diffusion controllable. Aim of this project is to construct a model describing percolation in microporous particle wall. The framework of the model is bond percolation problem, where the porous system is represented by 3-D graph: network (site) of cells (vertices) connected via channels (bonds). Capillary condensation is then represented by fraction of the open channels. Theoretical results from the project will be further used as a basis for practical laboratory experiments.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Software for virtual tablet dissolution testing

Autor: Viktor Sládek
Ročník: B3
Ústav: chemické robotiky
Školitel: Ing. Zdeněk Grof, Ph.D.

In pharmaceutical industry, design of tablet formation process is a costly procedure consuming substantial amount of active pharmaceutical ingredients (API) and requiring a lot of time as well. The tablet structure determines the kinetics of API release which can be experimentally characterized and reported in the form of a release curve. However, the problem of determining the tablet structure which would match the required release curve cannot be solved in an explicit way but requires to produce and test many tablets with different structure. The goal of this project is to create a mathematical model able to determine dissolution behavior of given tablet characterized by its shape, spatial distribution of components and other physical properties determining interaction with solvent. The procedure starts with the selection of tablet geometry from the library of basic shapes which is then used for simulations of swelling and solvent diffusion through the tablet. The simulation is based on DEM methodology, where the tablet is discretized into elements described by their position, radius, and composition. The project also contains web based user interface which controls the simulation back-end and allows easy access for any user.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Software for virtual tablet dissolution testing

Autor: Malvína Voclová
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Michal Vonka, doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Polymeric foams have many diverse applications including heat or sound insulation and impact absorption. Open-cellular foams with cell size smaller than 10 μm exhibit both excellent heat and sound insulation properties. Such foams can be prepared not only by a standard approach utilizing blowing agents, but also by spinodal decomposition route suppressing the nucleation during rapid cooling of the initial homogeneous mixture of polymer and a suitable solvent. Mathematical modelling of the foam formation by spinodal decomposition is based on Cahn-Hilliard model and involves: (i) Flory-Huggins equation with temperature-dependent interaction parameter describing the thermodynamics, (ii) diffusion of species driven by the gradient of chemical potential, and (iii) Landau-Ginzburg functional describing the local penalty function for phase interfaces. The temperature vs composition phase diagram involving binodal and spinodal curves for upper-critical solution temperature case were constructed for the considered system of polystyrene and cyclohexane. The model allows understanding of the open-cellular foam formation and the influence of various parameters on the resulting foam morphology. The model also serves for the optimization of the foam formation and thus obtaining the micro-structured foams with superior thermal and sound insulation properties.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Modelování depozice nanočástic při elektrorozprašování

Autor: Anna Zítková
Ročník: B2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Martin Kroupa, doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Elektrozprašování je metoda rozptylování kapaliny pomocí elektrického pole. Kapičky se díky vypařování rozpouštědla a silnému elektrickému poli postupně rozpadají na malé částice. Touto metodou se dají vyrábět velmi tenké vrstvy nanočástic z různých materiálů. Jejich využití je velmi široké především v oblasti energetiky, lze je využít např. pro výrobu superkapacitorů či fotovoltaických článků. Vlivem podmínek jako jsou teplota, napětí, apod. vznikají při depozici nanočástic vrstvy o různé struktuře. Náš model popisuje dynamiku pohybu částic při depozici na desku a rovněž počítá intenzitu elektrického pole a v závislosti na ní elektrickou sílu, která působí na jednotlivé částice. Zahrnuty jsou rovněž další síly, které působí mezi částicemi a mezi částicí a okolním prostředím. Výsledkem je dynamický model depozice částic ve dvou prostorových dimenzích. Pomocí tohoto modelu lze simulovat např. vliv již deponovaných částic na částice dopadající a vznik nerovnoměrností při nanášení. Program použijeme i pro studium vlivu dalších podmínek při rozprašování na vznik různých struktur deponovaných vrstev.

Sekce:	Procesní a chemické inženýrství 1. posluchárna B139, 9.00 hod
Komise:	
Předseda:	prof. Ing. František Štěpánek, PhD.
Členové:	Ing. Jaromír Pocedič, PhD. Dr. Ing. Juraj Kilián (Mondi) Ing. František Plát, Ph.D. (Škoda Auto) Ing. Pavel Beránek Ing. Jaroslav Kotowski
Soutěžící:	Čermochová Viktorie Fojtíková Romana Novák Matěj Bc. Podivínská Martina Polezhaev Petr Bc. Rygl Adam Sopoušek Jan

Sponzoři sekce :

Mondi Štětí a.s.
Momentive Specialty Chemicals, a.s.
Glass Service, a.s.
Chemoprojekt Nitrogen, a.s.
Lovochemie, a.s.
Ricardo Prague s.r.o.
Pure Bohemia, s.r.o.
MemBrain, s.r.o.
Lonza Biotec s.r.o.
Škoda Auto, a.s.
Medicem Group, s.r.o.



ŠKODA



Lonza



Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Remote Manipulation with Micro Lablets

Autor: Viktorie Čermochová
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Aleš Zadražil, Ph.D.

Our project is a part of a joint collaboration which will lead to the design and fabrication of lablets (100 μm) - programmable microscale electronic chemistry forming a bridge between electronic and chemical computing.

Our part in the project is manipulation and assembly of lablets. We are working with the lablets formed from a polymer (Ordyl FP415) of which one side is coated with 2-4 μm thick gold layer. The remote manipulation of the lablets will be carried out by attaching oil microdroplets containing iron oxide nanoparticles (with hydrophobic coating) to the lablets surface. By placing such objects into controlled magnetic field we will be able to navigate the lablets to its destination place.

The initial step of the task was chemical modification of the Au surface in order to make it hydrophobic (more preferential to the oil phase) and preparation of kerosene-in-water (O/W) emulsion stabilized with Tween 80 with dispersed iron-oxide nanoparticles (stabilized with oleic acid) in the oil phase. We will show the successful attachment of the oil microdroplets to the lablets and the lablets' movement towards a magnetic gradient.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Příprava a charakterizace superkapacitorů na bázi MnO_2

Autor: Romana Fojtíková
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Petr Mazúr, Ph.D., doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Rozvoj elektrických zařízení přináší zvýšenou poptávku po mobilních úložištích elektrické energie. Superkapacity se ve srovnání s klasickými kondenzátory vyznačují mnohonásobně vyšší specifickou kapacitou a současně ve srovnání s konvenčními sekundárními bateriemi větším měrným výkonem. Díky svým vlastnostem nalézají superkapacity široké uplatnění v mnoha aplikacích. Pro přípravu elektrod jsme zvolili nenákladnou metodu elektrorozprašování, která umožňuje generovat a nanášet částice oxidu kovů o velikosti několik desítek nanometrů, což se pozitivně projevuje na zvětšování povrchu rozhraní elektroda/elektrolyt. Pomocí elektrospreje vlastní konstrukce jsme nanášeli částice oxidu manganu na ocelovou folii. Takto připravené elektrody byly charakterizovány řadou metod (Ramanova spektroskopie, AFM, SEM, aj.) a jejich následná modifikace pomocí cyklické voltametrie vedla k významnému zvýšení specifické kapacity nanesené vrstvy ($> 100 \text{ F/g}$). Výsledný elektrochemický článek složený z připravených elektrod byl charakterizován metodami chronopotenciometrie a impedanční spektroskopie, přičemž byly pozorovány superkapacitní vlastnosti. Vzhledem k dosaženým výsledkům se metoda elektrorozprašování v kombinaci s použitím oxidu manganu jeví jako efektivní způsob výroby superkapacitorů.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Termoresponsivní nebiologická chemotaxe pro využití v mikro a nanochemii

Autor: Matěj Novák
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jitka Čejková, Ph.D.

Chemotaxe je definována jako orientovaný pohyb objektu podél chemického gradientu. Podobně jako zvířata, která dokážou pomocí čichu určit rostoucí koncentraci některých látek ve vzduchu a lokalizovat tím zdroj potravy, mají například i mikroorganismy své způsoby, jak se pohybovat v okolí za účelem získání živin, úniku před hrozbou nebo splnění určitého úkolu. Principy, podle kterých chemotaxe probíhá, jsou různé a dají se využít při přepravě uměle vytvořených mikro- a nanočástic (tzv. chemických robotů). Cílem naší práce je prozkoumat tyto procesy a využít je k efektivnímu transportu látek do míst, kde provedou cílový úkol nebo například změni svou strukturu. Předložená práce se zabývá studiem chování kapek dekanolu v dekanoátu sodném, které se po přidání NaCl do systému začínají orientovaně pohybovat k této soli. Chování je zkoumáno v systémech různé geometrie, od Petriho misek až po jednoduché labyrinty. Dále je studován případ, kdy je sůl uzavřena v parafínu a začne difundovat až po využití externího ohřevu, tedy kdy je celý systém navíc termoresponsivní. Praktické využití studia chemotaxe tohoto typu je např. při čištění těžko dostupných míst, kdy jsou kapky schopny samy vyhledat cílovou lokalitu a tam řízeně vyloučit aktivní látku.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Bobtnání polyolefinových částic

Autor: Bc. Martina Podivinská
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Klára Smolná, doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Polyolefiny jsou semi-krystalické polymery, z nichž nejznámější polyethylen (PE) a propylen (PP) představují více než polovinu objemu všech vyráběných plastů. Sorpce monomerních složek v semi-krystalických polyolefinech je důležitým jevem nejen během polymerace, která probíhá v případě katalytické polymerace v plynné či kapalně-disperzních reaktorech, ale i při následném zpracování. Sorpce v semi-krystalických polymerech probíhá výhradně v amorfní fázi a bývá ovlivněna pevně svázanými krystalickými lamelami. Bobtnání polymeru ovlivňuje sorpční proces, například snižuje vliv elasticky omezených řetězců a zvyšuje tak sorpci. Gravimetrická sorpční data jsou korigována na vztakovou sílu, kde významnou složku tvoří i nabobtnalý objem částic. Proto je důležité studovat bobtnací proces odděleně. Změna objemu jednotlivých PE částic byla experimentálně zjištěna pomocí video-mikroskopické aparatury s tlakovou sorpční celou. Tento příspěvek diskutuje: (i) vliv bobtnání PE částic etylenem a 1 hexenem na vyhodnocení gravimetrických dat při různých průmyslově důležitých teplotách, (ii) vliv krystalinity na bobtnání PE částic, a (iii) nevratné bobtnání, které lze pozorovat při sorpci 1-hexenu.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Optimalizace výroby zlatých mikroelektrod metodou UV litografie

Autor: Petr Polezhaev
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jiří Lindner, Ph.D.

Mikroelektrody se používají v mikrofluidice např. pro elektrokinetické čerpání a mísení tekutin či elektrochemickou detekci látek. Náročnost jejich výroby s klesajícími rozměry roste. Mikroelektrody se v naší laboratoři vyrábí pomocí UV litografie s využitím leštěné mědi jako obětovaného kovového substrátu. Úspěšnost výroby mikroelektrod s charakteristickým rozměrem menším než 30 μm je však poměrně nízká a zdá se, že závisí na odrazivosti a drsnosti povrchu mědi. Jednou z hypotéz je, že povrch leštěné mědi je pro další zpracování příliš hladký, zvýšení jeho drsnosti leptáním by mohlo zvýšit jeho adhezi v dalších fázích procesu. Cílem této práce bylo nalézt vhodné činidlo pro leptání povrchu mědi, upravit parametry UV litografie (expoziční čas, doba vyvolávání) pro leptaný povrch a posoudit, zda naleptání povrchu přinese pozitivní výsledky. Leptání bylo prováděno v roztoku 1) kyseliny dusičné, 2) persíranu sodného a 3) chloridu železitého. Hotové mikroelektrody byly zkoumány pod mikroskopem a studovány jejich rozměry a případné defekty. Z výsledků plyne, že leptáním a úpravou parametrů litografie lze téměř přesně dodržet žádané rozměry mikroelektrod a omezit tvorbu defektů.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Příprava a charakterizace nano- a mikroporézních polymerních pěn

Autor: Bc. Adam Rygl
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Andra Nistor, doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Polymerní pěny dělíme podle struktury na pěny s uzavřenými nebo otevřenými póry. Jestliže je velikost pórů menší než 10 μm či dokonce menší než 100 nm, pak nazýváme takovéto pěny mikro- resp. nanopórními. Vzhledem k velikosti pórů a vysoké porositě mají tyto pěny unikátní vlastnosti. Nano- a mikroporézní polymerní pěny s uzavřenými póry (buňkami) nachází využití jako tepelné či dielektrické izolanty s výbornými mechanickými vlastnostmi a nízkou spotřebou materiálu. Jejich tepelná vodivost může být až třikrát nižší než u standardních pěn. Naproti tomu pěny s otevřenými póry mají lepší absorpční a zvukově izolační vlastnosti, což je předurčuje k potenciálnímu využití jako nosičů v tkáňovém inženýrství, adsorpčních kolonách či membránách a jako zvukové izolátory. V této práci prezentujeme dosažené výsledky přípravy mikro- a nano-celulárních polystyrenových pěn. Systematicky jsme studovali vliv impregnačních (v superkritickém CO_2) a vypěňovacích podmínek na výslednou strukturu pěn. Optimalizací podmínek se nám podařilo připravit pěny s průměrnou velikostí buněk pod 1 μm . Polystyrenové pěny s otevřenými póry byly vypěňovány metodou teplotně indukované fázové separace, konkrétně tzv. spinodální dekompozicí. Za tímto účelem byla navržena a postavena nová aparatura a dále byly provedeny prvotní experimenty.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Superparamagnetické nanočástice - optimalizace přípravy z hlediska maximální účinnosti pro radiofrekvenční ohřev

Autor: Jan Sopoušek
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Mgr. Jaroslav Hanuš, PhD.

Práce se zabývá přípravou a charakterizací nanočástic tvořených oxidy železa s citrátovým stabilizačním činidlem. Tyto biokompatibilní nanočástice mohou nacházet uplatnění jak přímo v léčbě pomocí magnetické hypertermie, tak i pro uvolňování aktivních látek, lokálně ovlivnitelného pomocí magnetického pole.

Cílem práce bylo identifikování parametrů, které jsou klíčové pro maximální účinnost částic z hlediska radiofrekvenčního ohřevu, a hlavně nalezení způsobu, jak tyto optimalizované částice připravit. Z rešerše bylo zjištěno, že stěžejní je pravděpodobně velikost částic a že by se tato velikost měla pohybovat někde kolem 15 nm. Práce se pak zaměřila na nalezení vhodných parametrů přípravy pro vytvoření co možná nejhomogenější distribuce částic s požadovanou velikostí. Částice byly připravovány kondenzační reakcí oxidů železa pomocí amoniaku v dusíkové atmosféře, přičemž parametry reakce byly cíleně měněny. Pro charakterizaci částic z jednotlivých vsádek byl použit transmisní elektronový mikroskop a Zetasizer využívající dynamický rozptyl světla, byl stanoven zetapotenciál částic a měrný absorbovaný výkon v radiofrekvenčním poli. Vhodné parametry, které umožňují přípravu nanočástic s velkým měrným absorpčním výkonem byly nakonec úspěšně nalezeny.

Sekce:	Procesní a chemické inženýrství 2. knihovna B141b, 9.00 hod
Komise:	
Předseda:	prof. Ing. Dalimil Šnita, PhD.
Členové:	Mgr. Jaroslav Hanuš, PhD. Ing. Jan Nájemník (Momentive) Ing. Tomáš Jindra, Ph.D. (Pure Bohemia) Ing. Josef Chmelař Ing. Martin Ullrich
Soutěžící:	Bc. Dundálek Jan Dvořák Jakub Haškovcová Kateřina Janská Petra Petrík Juraj Bc. Sznepka Jakub Bc. Šnajdr Ivo

Sponzoři sekce :

Mondi Štětí a.s.
Momentive Specialty Chemicals, a.s.
Glass Service, a.s.
Chemoprojekt Nitrogen, a.s.
Lovochemie, a.s.
Ricardo Prague s.r.o.
Pure Bohemia, s.r.o.
MemBrain, s.r.o.
Lonza Biotec s.r.o.
Škoda Auto, a.s.
Medicem Group, s.r.o.



ŠKODA



Lonza



Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Konstrukce zinko-vzduchového palivového článku

Autor: Bc. Jan Dundálek
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jaromír Pociď, Ph.D., Ing. Josef Chmelař, doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Rostoucí ceny pohonných hmot a množící se obavy o zásoby ropy stimulují rozvoj alternativních zdrojů energie pro automobily. Hlavní pozornost je zaměřena na elektrické zdroje energie, kterými jsou zejména palivové články či sekundární baterie. V minulosti se uvažovalo využití vodíkových palivových článků, ovšem nikdy nedošlo k jejich komerční aplikaci ve vozidlech.

Alternativou k vodíkové technologii mohou být zinko vzduchové palivové články, které fungují na principu oxidace zinku v alkalickém prostředí vzdušným kyslíkem. Při srovnání s vodíkovými palivovými články dosahuje sice systém zinek vzduch 30krát menší specifickou energii (Wh/kg), ale vyznačuje se vyšší bezpečností, protože zinek netvoří výbušnou směs se vzduchem, dále nižší cenou vzhledem k využití neplatínových katalyzátorů pro redukci kyslíku a také vyšším elektromotorickým napětím.

Cílem této práce je sestavení a ověření funkce různých konstrukcí laboratorního zinko vzduchového palivového článku, které byly navrženy na základě literární rešerše.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Tvorba 3D rozlišených vrstev pro sledování adheze pomocí MRI

Autor: Jakub Dvořák
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Nina Sarvašová, prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Zobrazování pomocí magnetické rezonance (MRI) je nedestruktivní metoda umožňující získat obraz řezu nebo vnitřní struktury zobrazovaného objektu. Je to tedy vhodná metoda pro zobrazování 3D rozlišených porézních vrstev, které mohou být dále použité například jako simulační prostředí pro studium adheze mikročástic v 3D v komplexním prostředí pomocí MRI. Tato práce se zabývá tvorbou 3D rozlišených porézních vrstev určených na výše uvedené typy experimentů.

Porézní vrstvy byly vytvořeny metodou pevné matrice tvořené krystaly NaCl v různých velikostních frakcích. Na tvorbu samotných cel byly v této práci využity dva materiály, agar a Polydimethylsiloxan (PDMS). Hydrofilní agar se ukázal být nevhodným pro tvorbu podobných vrstev z důvodu deformace vnitřní struktury po odstranění matrice. Na rozdíl od agaru, PDMS je strukturálně stabilní po odstranění matrice a zachovává si kanálkový charakter i za vyšších teplot a tlaků. Z daných důvodů byl pro další experimenty zahrnující modifikaci vlastností získaných 3D rozlišených vrstev a samotnou adhezi vybraných mikročástic použit PDMS.

Modifikace povrchu byla zatím provedena pomocí poly-L-lysinu a bylo zjištěno, že tato modifikace vedoucí k hydrofilitě povrchu způsobila lepší adhezi křemíkových nanočástic.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Gravimetrické měření sorpčních rovnováh v polymerech

Autor: Kateřina Haškovcová
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Josef Chmelař, doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Polymery jsou prakticky užitečné materiály, což potvrzuje jejich obrovská roční produkce a množství aplikací. Znalost rozpustnosti nízko-molekulárních látek (zejména monomerů) v polymerech je velice důležitá při optimalizaci jejich výroby (rychlost polymerace) a následného zpracování (např. odplynění produktů). V naší laboratoři používáme k měření sorpčních rovnováh gravimetrickou aparaturu, jejímž základem jsou váhy s magnetickým závěsem. Velkou výhodou této metody je, že můžeme měřit za vysokých teplot (až 400°C) a tlaků (až 350 bar). V rámci této práce byly naměřeny rozpustnosti ethylenu ve: (i) vzorcích houževnatého polypropylenu (hiPP) s různými obsahy kaučukové fáze a (ii) vzorcích polyethylenu (PE) s rozdílnými hustotami. U obou polymerů jsme sledovali závislost rozpustnosti ethylenu na teplotě. U hiPPu nás dále zajímal vliv obsahu kaučukové fáze na rozpustnost a také samotná rozpustnost v této fázi. U PE byl studován především vliv hustoty a změna rozpustnosti při přechodu do taveniny. Získaná data jsou důležitým příspěvkem ke komplexní studii daných materiálů, která zahrnuje též výsledky difúzních a morfologických měření.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Příprava a charakterizace částic sloužících k biologicky řízenému vylučování submikrometrových objektů

Autor: Petra Janská
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jitka Čejková, Ph.D.

Cílem předložené práce je připravit a charakterizovat hybridní mikročástice obsahující živé buňky, které by mohly sloužit k řízenému vylučování submikrometrových objektů. Kvasinky zapouzdřené do mikročástic dokáží nečinně přežívat po několik týdnů, po přidavku živin se však začnou buňky dělit, což vede k destabilizaci částice a následnému prasknutí a vyloučení veškerého obsahu. Zapouzdříme-li do takovéto mikrokapsle vedle kvasinkových buněk např. nosič léčiva, pesticidu nebo antibakteriální látky, jsou tyto nosiče uvolněny do prostředí pouze za určitých podmínek (přítomnost živin, vhodná teplota pro růst kvasinek). Jedním ze způsobů, jak enkapsulovat kvasinky do částic, je příprava colloidosomů (částic tvořených monovrstvou koloidních částic) pomocí Pickeringových emulzí. Touto cestou se povrchově upravené koloidní částice samouspořádávají na rozhraní olejné a vodné fáze, čímž stabilizují kapičky dispergované fáze, která obsahuje kvasinky. V této práci byl zkoumán poměr olejné a vodné fáze, koncentrace a povrchový náboj buněk a křemičitých koloidních částic vedoucí ke vzniku stabilní Pickeringovy emulze bez použití povrchově aktivních látek.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Syntéza a adhézne vlastnosti modifikovaných nanočástic na ADH antigén

Autor: Juraj Petřík
Ročník: B2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Karcinogén prsníka představuje v svetovom meradle najčastejšie diagnostikovanú nádorovú chorobu, ktorá je súčasne najčastejšou príčinou úmrtia žien na rakovinu. Preto je potreba hľadať riešenia na liečbu tohto a ďalších ochorení. Jednou z možností liečby môže byť, v blízkej budúcnosti, cielené doručovanie aktívnych látok pomocou štruktúrovaných nano- a mikročastíc. Bolo dokázané, že nádorové bunky karcinómu prsníka, označované ako MCF-7 majú na svojom povrchu naviazaný antidiuretický hormón (ADH, alebo tiež vazopresín) prostredníctvom transmembránových receptorov spriahnutými s G-proteínmi. Táto väzba bola dokázaná aj pri iných typoch nádorových buniek, napr. pľúcnych alebo prostaty. Cieľom práce bolo overiť adhézne vlastnosti nanočastíc modifikovaných protilátkou anti-ADH na špeciálne upravené sklíčko, potiahnuté antigénom ADH, ktoré malo simulovať povrch nádorových buniek. Adhézne experimenty boli uskutočňované v prietokovej cele pri rôznych podmienkach (zmena rýchlosti prietoku, čas pôsobenia) za cieľom zistenia pevnosti špecifickej väzby protilátka – antigén. V budúcnosti by sme chceli aplikovať adhézne experimenty do 3D prostredia, a charakterizovať vlastnosti väzby protilátka - antigén v tomto prostredí.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Selektivní separace kovů z odpadních roztoků

Autor: Bc. Jakub Sznepka
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: prof. Ing. Dalimil Šnita CSc.

V době stále se rozvíjejícího elektrotechnického a fotovoltaického průmyslu roste spotřeba drahých kovů, jako je například zlato, stříbro, indium, galium. Tyto kovy jsou součástí neobnovitelných zdrojů surovin a je zapotřebí jejich opětovná recyklace. Cílem této práce je separace mědi, india a galia z odpadních roztoků pomocí vybraných metod. Byly použity dva postupy – selektivní extrakce a srážení s následným selektivním rozpouštěním. Z laboratorních vsádkových experimentů byla získána rovnovážná data pro selektivní extrakce a srážení kyselinou šťavelovou. Průmyslově je extrakce koncipována jako kontinuální proces, proto byla zkonstruována protiproudá kolona, která by v budoucnu měla být součástí průmyslového pilotního projektu. Nakonec byly oba postupy ekonomicky porovnány z hlediska jejich aplikovatelnosti do reálných provozů.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Regenerace zinku pro palivový článek zinek vzduch

Autor: Bc. Ivo Šnajdr

Ročník: M1

Ústav: chemického inženýrství

Školitel: Ing. Jaromír Pociď, Ph.D., doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Palivové články nacházejí uplatnění především v situacích, kdy je potřeba mobilní zdroj elektrické energie o vysoké kapacitě, například pro elektromobily. Nejdiskutovanějším je vodíkový palivový článek, který je ale vzhledem k nízké účinnosti, vysoké ceně komponent a potřebě rozsáhlé infrastruktury neekonomický a nikdy se nedostal do sériové výroby pro využití v elektromobilech. Jako alternativu lze využít například palivový článek zinek-vzduch, ve kterém se částice zinku oxidují / rozpouštějí na hydroxid zinečnatý za využití vzdušného kyslíku. Tento palivový článek lze znovu nabít během jedné minuty doplněním suspenze zinku.

Cyklická energetická účinnost zinko-vzduchového palivového článku je ovlivněna zejména energetickou náročností zpětného nabití, tj. redukcí Zn^{2+} na Zn^0 . Volba správného postupu regenerace zinkové suspenze je rozhodujícím faktorem, který ovlivňuje celkovou ekonomickou rozvahu palivového článku Zn-vzduch. V práci porovnáme různé metody získání zinku z oxidu zinečnatého: (i) pyrometalurgicky, (ii) hydrometalurgicky (elektrochemicky) a (iii) solární termickou redukcí.

Sekce:	Procesní a chemické inženýrství 3. posluchárna B03, 9.00 hod
Komise:	
Předseda:	doc. Ing. Michal Příbyl, PhD.
Členové:	Ing. Otto Hadač, PhD. Ing. Marek Bobák, Ph.D. (Membrain) Ing. Lucie Rottrová (Chemoprojekt Nitrogen) Mgr. Eva Adamusová (Medicem) Ing. Jiří Maršálek Ing. Libor Labík
Soutěžící:	Gorný Damian Bc. Hulík Radim Jantač Simon Khafizova Elvira Krejčí Anna Schneider Patrik Bc. Šoltys Marek Bc. Vrána Jiří

Sponzoři sekce :

Mondi Štětí a.s.
Momentive Specialty Chemicals, a.s.
Glass Service, a.s.
Chemoprojekt Nitrogen, a.s.
Lovochemie, a.s.
Ricardo Prague s.r.o.
Pure Bohemia, s.r.o.
MemBrain, s.r.o.
Lonza Biotec s.r.o.
Škoda Auto, a.s.
Medicem Group, s.r.o.



ŠKODA



Lonza



Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

Inovace metody InkJet a její použití pro vytvoření mikročastic

Autor: Damian Gorný
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: prof. Ing. František Štěpánek, PhD.

Cílem práce je příprava mikročastic pomocí metody InkJet a inovace této techniky. Technologie InkJet využívá tiskovou hlavu schopnou s vysokou frekvencí generovat mikroskopické kapičky konzistentní velikosti. Tato metoda je velice vhodná pro přípravu mikročastic, které mohou obsahovat několik komponent, řádově i desítek komponent. Tyto částice pak mohou sloužit jako aktivní nosiče léčiv či jiných aktivních látek, které jsou určeny například na cílené čištění těžko dostupných míst.

Vlastní práce spočívá v nastavení a parametrizaci tiskové hlavy. Dále pak zkoumání vlivu matriční kapaliny a to především její viskozity před zesíťováním na gel. Inovace spočívala v přidání laseru do aparatury. Laserový paprsek procházel přes proud generovaných kapek a tím odpařil část vody z kapalného roztoku. Následně byly do částic uzavírány různé látky, například lipozomy, kvasinky, nanočástice železa a B12. Z částic připravených z matričních roztoků o různých viskozitách, ve kterých byl uzavřen vitamín B12, bylo zkoumáno vylučování vitamínu.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

Změny účinnosti redukce NO_x při stárnutí katalyzátoru NSRC

Autor: Bc. Radim Hulík
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Vznětové (dieselové) motory spalují palivovou směs s přebytkem vzduchu (chudá směs), na rozdíl od zážehových motorů, které spalují směs stechiometrickou. Spalování chudé směsi vede k nižší spotřebě paliva, ale také k problémům s emisemi oxidů dusíku (NO_x). Aby byly splněny nejnovější normy (EURO VI) je nutné vybavit dieselové automobily mimo jiné i deNO_x katalyzátorem. Pro tento účel může sloužit katalyzátor s ukládáním NO_x (NSRC), který pracuje na principu periodické adsorpce (delší fáze) a následně rychlé redukce nahromaděných oxidů dusíku pomocí krátkodobého obohacení palivové směsi.

Tato práce porovnává výstupní koncentrace NO_x, NH₃ a N₂O čerstvého a použitého katalyzátoru NSRC v laboratorním reaktoru při provozních teplotách od 150°C do 500°C. Pro měření byly použity syntetické plyny simulující skutečnou směs plynů ve výfukovém potrubí. Pro redukci NO_x byly použity CO, C₃H₆ a H₂, a to jak samostatně tak i ve směsi. Ze získaných dat byly vyhodnoceny selektivity produktů (N₂, NH₃, N₂O) a celková konverze NO_x. Takto získaná data v praxi slouží k návrhu velikosti, umístění a strategie řízení katalytického konvertoru tak, aby byly splněny emisní normy po celou dobu životnosti katalyzátoru.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

Experimentální studium elektrostatického nabíjení polymerních částic a filmů

Autor: Simon Jantač
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jiří Maršálek, doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Elektrostatické nabíjení polymerních částic a filmů je významným průmyslovým problémem, který stále není zcela prozkoumán a pochopen. Například výroba polyethylenu v plynně-disperzních reaktorech je doprovázena generací elektrostatického náboje, který způsobuje tvorbu aglomerátů a může dojít až k nucené odstávce reaktoru. Tato práce popisuje naši snahu o experimentální studium problematiky elektrostatického nabíjení, vybíjení a regulace. Elektrostatický náboj vygenerovaný různými dobře charakterizovanými procesy je stanovován pomocí indukce ve Faradayově hrnci. Pomocí korónového výboje můžeme dosáhnout limitní povrchovou hustotu náboje na studovaném materiálu. První série experimentů systematicky studovala tribonabíjení stejných materiálů při vzájemném tření (PE, PS, sklo). Experimenty byly navrženy tak, aby byl vždy simulován proces styku částice a stěny. U každého z výše uvedených materiálů jsme pozorovali odlišné chování. Naším cílem je popsat mechanismus nabíjení polymerních částic a filmů a navrhnout, jak při výrobě a uchovávání těchto materiálů snížit elektrostatický náboj. Doposud získané výsledky poukazují na komplikovanost celé problematiky a na potřebu hlubšího základního výzkumu.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

Řízená manipulace mikrokapek pomocí elektrického pole

Autor: Elvira Khafizova
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: doc. Ing. Příbyl Michal, Ph.D.

V biologických a medicínských aplikacích často vzniká potřeba adresovat roztoky či analyty k určitému místu v systému. Toho je možné docílit pomocí elektrokinetických jevů, například pomocí elektroforézy, elektroosmózy či dielektroforézy.

Cílem práce je návrh a výroba mikrofluidního čipu, vhodného pro výzkum adresování rozptýlených kapek do specifických míst mikrofluidního čipu s využitím elektrických polí. Při pokusech se používají vodné roztoky polyethylenglykolu s molekulovou hmotností okolo 4000 g/mol (PEG 4000) a roztok hydrogenfosforečnanu draselného a dihydrogenfosforečnanu draselného o pH=7. Mikročip byl navržen v programu MatLAB a vyroben pomocí frézování, lisování a UV litografie. Ustálený tok mikrokapek v kanálu a generování segmentovaného toku je zajištěno čerpadlem GEMINI 88KD.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

Predikce příkonu v mechanicky míchaném aerovaném reaktoru

Autor: Anna Krejčí
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha

Cílem práce je predikce příkonu míchadel v mechanicky míchaných disperzích kapalina – plyn. Se znalostí potřebného příkonu je možné predikovat průměrná střížná napětí v kapalině a objemový koeficient přestupu hmoty. Příkon míchadel je zejména závislý na otáčkách míchadla, množství přiváděného plynu, typech a velikostech míchadel a geometrickém uspořádání nádoby. Jejich vhodným nastavením lze dosáhnout snížení energetické náročnosti mechanického míchání, a tím úspory nákladů na provoz těchto aparátů. Příkon míchadel je také důležitým faktorem při zvětšování měřítka mechanicky míchaných nádob.

Měření příkonu v neaerovaných a aerovaných vsádkách bylo provedeno při různých frekvencích otáček a průtocích plynu, v nádobě jak laboratorního (průměr nádoby $T=30$ cm), tak poloprovozního měřítka ($T=60$ cm), pro koalescentní a nekoalescentní kapaliny. Zejména důležité jsou nekoalescentní kapaliny, protože svým chováním odpovídají většině průmyslových vsádek. Pro predikci příkonu v mechanicky míchaných probublávaných nádobách byly sestaveny korelační rovnice zohledňující velikost nádoby a typ použitého míchadla. Tyto rovnice byly také porovnány s literaturou.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

Synthesis and characterisation of surface modified magnetic hollow silica nanospheres

Autor: Bc. Marek Šoltys
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: doc. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Targeted drug delivery with release on demand property is a very promising concept of treating various illnesses (cancer, cardiovascular diseases or diabetes) in the future. Modified hollow mesoporous silica nanoparticles could serve as a delivery vessels of an active substance in this method and could find a wide range of applications in industry as well. The particles could be either autonomous or serve as an inner compartment of larger chemical robots. The goal was to prepare surface modified hollow porous magnetic silica nanoparticles (100 – 300 nm) with composite iron oxide. The final particle should have properties of a living organism except the ability of reproduction and evolution. That means it is capable of movement in the surrounding environment, material exchange and controlled accumulation or release of substances. The nanoparticles were precipitated from (3-aminopropyl)ethoxysilane and tetraethoxysilane at phase interface of water – oleic acid nanoemulsion. An electrostatic bonding method was used to prepare nanoparticles with surface modified by iron oxide. For this, iron oxide nanoparticles with positive surface charge had to be prepared and they were mixed with negatively charged silica nanoparticles. Characterisation of the resulting nanoparticles was done by TEM, DLS, ELS, electro-magnetic heating, BET and release kinetics of a model substance was measured.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

Charakterizace heterofázových polymerů pomocí TD-NMR

Autor: Patrik Schneider
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Josef Chmelař, doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Ačkoliv jsou polymery jedním z nejrozšířenějších materiálů a mají široké spektrum aplikací, přesto stále není zcela objasněno jejich vnitřní uspořádání (tj. morfologie). Přitom na morfologii závisí aplikační charakteristiky, ať už mechanické a optické vlastnosti, teplota měknutí či sorpční a difúzně-bariérové vlastnosti. Pro optimalizaci průmyslové výroby a vývoj nových produktů je nutná znalost metod charakterizace morfologie polymerních materiálů. V této práci je charakterizace polymerů prováděna technikou nukleární magnetické rezonance v časové doméně (TD-NMR) pomocí experimentů Free induction decay (FID), Hahn-Echo a Saturation recovery. Hlavní náplní měření bylo zjišťování relaxačních časů a obsahu fází v různých vzorcích polyethylenu (PE). Byly pozorovány změny v obsahu jednotlivých polymerních fází s rostoucí hustotou a pro vzorky PE se střední a nízkou hustotou byla identifikována polymerní fáze, která doposud nebyla popsána v literatuře. Tato nová interpretace morfologie byla založena na porovnání relaxačních časů jednotlivých fází. Dále byla studována sorpce organických látek v polystyrenu a PE. Vlivem sorpce dochází ke změnám pohyblivosti polymerních řetězců, což vede ke změnám relaxačních konstant a umožňuje sledovat sorpční procesy pomocí TD-NMR měření.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

Membránový koaxiální elektrolyzér pro přípravu elektrolytů vanadové redoxní průtočné baterie

Autor: Bc. Jiří Vrána
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jaromír Pociďč, Ph.D., Ing. Petr Mazúr, Ph.D., doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Strategicky plánované zvýšení podílu elektřiny z obnovitelných zdrojů v energetickém mixu EU do roku 2020 a podporovaná energetická koncepce účinnější distribuce elektřiny motivují k vývoji nových zařízení pro lokální ukládání elektrické energie. Význam zmiňovaných systémů spočívá v zajištění kvality a stability dodávek proudu odběratelům. Vanadová redoxní průtočná baterie (VRPB) se ukazuje jako vhodný kandidát, výhodou tohoto úložiště je zejména kapacita (kWh) regulovatelná objemem elektrolytů a vysoká účinnost. Doposud bylo během vývoje VRPB v naší laboratoři dosaženo energetické účinnosti 83 % při proudové hustotě 56 mA/cm², což jsou hodnoty přijatelné i pro průmyslové využití systému. Nedílnou součástí vývoje baterie je vývoj zařízení pro přípravu elektrolytů z V₂O₅ metodou reduktivního rozpouštění v H₂SO₄. Cílem práce je návrh, konstrukce a ověření funkčnosti membránového elektrolyzéru, který navazuje na námi vyvinuté systémy předchozích generací. Inovace spočívá v převodu systému z planparalelní do koaxiální geometrie, čímž lze zásadně snížit investiční náklady zmenšením ploch drahých iontově-výměnných membrán a platinované anody. Funkčnost sestaveného elektrolyzéru byla ověřena pomocí galvanostatické elektrolýzy směsi V₂O₅ a roztoku H₂SO₄, za současného monitorování pomocí konduktometrie a spektroskopie ve viditelné oblasti.

Sekce: **Podnikový management a marketing
posluchárna C11, 8.30 hod**

Komise:

Předseda: prof. Ing. Ivan Gros, CSc.

Členové: Mgr. Ing. Marek Botek, Ph.D.

Ing. Jakub Dyntar, Ph.D.

Soutěžící:

Bc. Andreeva Daria

Bc. Dejlová Barbora

Bc. Ehrlichová Barbora

Bc. Hojač Vojtěch

Bc. Kabatová Barbora

Bc. Korbelíková Nela

Bc. Makovec Pavel

Sekce : Podnikový management a marketing

SWOT analýza společnosti Aneclab s.r.o.

Autor: Bc. Daria Andreeva
Ročník: M2
Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Olga Kutnohorská Ph.D.

Příspěvek se zabývá SWOT analýzou společnosti Aneclab s.r.o., ze které bude možné určit silné a slabé stránky zkoumaného podniku a zejména odhalit vnější příležitosti a hrozby z makroekonomického hlediska. Navazuje a vychází z dat získaných během letní odborné praxe ve společnosti Aneclub s.r.o., v rámci které byla řešena analýza příležitostí pro tuto společnost. V teoreticko-metodologické části je vymezeno pojetí SWOT analýzy, postup při její tvorbě a popis stávajícího stavu společnosti. Aneclab s.r.o. je laboratoř, jejíž hlavním zaměřením jsou chemické analýzy a poradenství v oblasti životního prostředí. Praktická část práce obsahuje analýzu příležitostí a hrozeb společnosti Aneclab s.r.o. a návrh chemických analýz, po kterých je potencionální zájem, ale společnost je nenabízí.

Sekce : Podnikový management a marketing

Zavádění 5S a standardizace čištění na vybraných pracovištích

Autor: Bc. Barbora Dejlová
Ročník: M2
Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Dana Strachotová, Ph.D.

Tato práce se zabývá zavedením metody 5S na třech výrobních linkách ve válcovnách plechu. Jde o metodu, která je součástí konceptu Lean managementu a běžně se aplikuje v manufakturních výroбах, v automotive a pro organizaci malých pracovišť (například v dílnách, kancelářích apod.). Tato práce se naopak zaměřuje na možnost rozšíření metody, a sice její zavedení i v těžkém průmyslu.

Součástí praktické části práce je také sestavení čistících standardů pro jednotlivé linky a soupis doporučení pro jednotlivé linky především s důrazem na bezpečnost práce.

Sekce : Podnikový management a marketing

Přístup k zajištění environmentálního managementu ve vybraných podnicích v ČR

Autor: Bc. Barbora Ehrlichová
Ročník: M1
Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Mgr. Ing. Marek Botek, Ph.D.

Systémy environmentálního managementu (EMS) patří mezi dnes nejvíce využívané dobrovolné nástroje ochrany životního prostředí. Zavádějí se podle dvou základních standardů – ISO 14001 a EMAS. V rámci výzkumu realizovaného formou individuálních hloubkových rozhovorů byl zjištěn význam, přínos a konkrétní využívání obou systémů ve třech vybraných podnicích různé velikosti na území České republiky, působících v oboru stavebnictví.

EMS představují pro oslovené podniky významný prostředek ochrany životního prostředí i způsob zapojení se do podnikatelského prostředí. Respondenti považují za důležité přínosy otevřenější komunikaci se zainteresovanými stranami, lepší postavení v očích úřadů, obcí a veřejnosti a získání konkurenční výhody. Z dalších výsledků výzkumu je vhodné zmínit, že obchodní partneři požadovali implementaci EMS v délce cca půl roku, zaměstnanci jsou školeni jednou ročně a k vnější komunikaci slouží webové stránky.

Sekce : Podnikový management a marketing

Perfect quarter

Autor: Bc. Vojtěch Hojač
Ročník: M2
Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu

Tato práce se zabývá plánováním promočních aktivit v oblasti FMCG. Zahrnuje možnosti promování a sleduje i frekvence jednotlivých promócí.

Práce obsahuje popis jednotlivých promócí a také náhled na to, jak se jednotlivým promócím daří. Cílem této práce je najít v průběhu jednoho kvartálního období optimální kombinaci promočních aktivit, které by vedly k oboustranné spokojenosti - zákazník a dodavatel. Hlavním cílem je tedy najít takové promoční aktivity, které budou nejvýnosnější a budou mít nejlepší dopad na prodeje.

Sekce : Podnikový management a marketing

Přechod z metody oceňování výrobků výrobními náklady na metodu úplných vlastních nákladů

Autor: Bc. Barbora Kabatová
Ročník: M2
Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Věra Soukupová, CSc.

Tato práce se zabývá jednou z hlavních sledovaných účetních položek a to náklady. Shrnuje obecné nahlížení na ně, jako jsou: druhy nákladů, do jakých skupin jsou náklady nejčastěji děleny a jakým způsobem pomocí nich můžeme oceňovat výrobky.

V příspěvku budou popsány a srovnány vybrané metody oceňování výrobků a na reálném příkladu ukázány rozdíly mezi metodou ocenění výrobními náklady a úplnými vlastními náklady. Cílem práce bude porovnat tyto dvě metody za jedno účetní období a zachytit dopady na jednotlivé výkazy účetní závěrky.

Sekce : Podnikový management a marketing

Optimalizace výrobní linky

Autor: Bc. Nela Korbělíková
Ročník: M2
Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Dana Strachotová, Ph.D.

Příspěvek je vypracován na základě dat z výrobní linky řadicích pák pro zákazníka AUDI AG ve společnosti EISSMANN Group Automotive. Zadáním bylo zachytit materiálový tok a rozpad produktu, vypočítat takt a bilanční index této linky a pro každé pracoviště provést chronometráž operací. Cílem práce bylo optimalizovat výrobní linku, zohlednit požadavek ze strany zákazníka a zjistit zda operátoři dodržují předepsaný postup a popřípadě provést standardizaci procesů. V příspěvku je popsáno vybalancované rozložení operací výrobní linky pro 5 a 6 operátorů ve směně a ověřena možnosti sloučení pracovišť. Na základě identifikace plýtvání jsou navrženy změny vedoucí k jeho odstranění. Rovněž je uveden návrh nového uspořádání linky, které zohledňuje prostorové dispozice, náklady na přestavbu linky a vytížení všech operátorů.

Sekce : Podnikový management a marketing

Analýza distribučního systému ve společnosti Mitas a.s.

Autor: Bc. Pavel Makovec
Ročník: M2
Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: prof. Ing. Ivan Gros, CSc.

Příspěvek je zaměřený na analýzu distribučního systému společnosti Mitas a.s. Navazuje na povinnou odbornou praxi, která byla realizována v pražské pobočce této společnosti, a to v oddělení distribuce.

Společnost MITAS a.s. z koncernu ČGS HOLDING a.s. je jedním z předních evropských výrobců zemědělských pneumatik, které jsou vyráběny a celosvětově prodávány pod třemi obchodními značkami. Vlastními obchodními značkami společnosti jsou Mitas a Cultor; značka pneumatik Continental pro zemědělský segment je licencovaná. MITAS a.s. dále vyrábí a distribuuje průmyslové pneumatiky a pneumatiky pro motocykly pod značkou Mitas. Společnost sestává z pěti výrobních a má vlastní globální prodejní a distribuční síť. Vzhledem k expanzi na nové trhy trvale rostou nároky na distribuci výrobků.

Cílem práce je analyzovat současné požadavky na distribuční systém zejména množství a geografické rozložení poptávky, dále popsat současné distribuční cesty, distribuční centra a identifikovat náklady na distribuci. Na základě analýzy navrhnout možné cesty zefektivnění distribučního systému.

Sekce: **Fyzika**
místnost B220, 9.00 hod

Komise:

Předseda: doc. Ing. Jaroslav Hofmann, CSc.

Členové: Mgr. Tomáš Kotrba
Dr. Mgr. Jana Jirešová
doc. RNDr. Jaroslav Julák, CSc. (1. LF UK)

Soutěžící: Čtvrtečková Lucie
Jemelíková Michaela
Ježková Dominika
Kučerová Jana
Matějka Jiří
Staňková Eliška
Švarcová Michaela
Vávra Jan

Sekce : Fyzika

Stresové působení nízkoteplotního plazmatu na kvasinky

Autor: Lucie Čtvrtečková
Ročník: B3
Ústav: fyziky a měřicí techniky
Školitel: Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D., Ing. Josef Khun, Ph.D.

Kvasinky *Saccharomyces cerevisiae* byly vystaveny stresovému působení nízkoteplotního plazmatu generovaném v korónovém výboji. Cílem práce bylo sledovat mechanismy jejich rozrušování metodou buněčné průtokové cytometrie mapující počet a velikost fragmentů a dále metodou barvení propidium jodidem mapující zastoupení narušených a mrtvých buněk.

Sekce : Fyzika

Dekontaminace mikroorganismů působením nízkoteplotního plazmatu a peroxidu vodíku

Autor: Michaela Jemelíková
Ročník: B2
Ústav: fyziky a měřicí techniky
Školitel: Ing. Josef Khun, Ph.D., Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.

Práce se zabývá porovnáním dekontaminačního účinku samotného peroxidu vodíku, samotného nízkoteplotního plazmatu a kombinací obou metod. Dekontaminační efekt byl testován na mikroorganismech *Escherichia coli*, *Staphylococcus epidermidis*, *Candida albicans* a *Saccharomyces cerevisiae*. Jako zdroj nízkoteplotního plazmatu byl použit modifikovaný korónový výboj v uspořádání elektrod hrot-mřížka. Bylo zjištěno, že současné působení nízkoteplotního plazmatu v kombinaci s peroxidem vodíku má za následek podstatné zvýšení dekontaminační účinnosti v porovnání s účinností obou metod použitých odděleně.

Sekce : Fyzika

Vliv vlhkosti na účinnost mikrobiální dekontaminace korónovým výbojem

Autor: Dominika Ježková
Ročník: B2
Ústav: fyziky a měřicí techniky
Školitel: Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.

Ve stávající aparatuře pro regulaci vlhkosti vzduchu byla provedena studie účinnosti mikrobiální dekontaminace bakterií *Staphylococcus epidermidis* v závislosti na vlhkosti vzduchu. Výsledky ukazují výrazný pokles počtu přežívajících bakterií s rostoucí vlhkostí. Jako zásadní se ale objevilo zjištění, že při vysoké relativní vlhkosti vzduchu (cca 70 %) dochází k dekontaminaci i ve vzdálenosti několika desítek centimetrů od výboje. Vysvětlení tohoto jevu bude předmětem dalšího výzkumu.

Sekce : Fyzika

Možnosti dekontaminace dermatofytních kmenů použitím nízko-teplotního plazmatu

Autor: Jana Kučerová
Ročník: B2
Ústav: počítačové a řídicí techniky
Školitel: Ing. Hana Soušková, Ph.D.

Práce se týká využití netermálního plazmatu pro dekontaminaci spór mikromycet, který byl generován pomocí korónového výboje a kometárního výboje. Byl vybrán obtížně sporulující kmen *Trichophyton rubrum*, který může způsobovat kožní onemocnění u lidí i zvířat. Ze spór tohoto kmene byla vytvořena vodní suspence. Účinek korónového výboje na vodní suspenzi byl vyjádřen jako závislost počtu přeživších spór na délce působení netermálního plazmatu. Počet přeživších spór byl zjišťován kultivačně metodou desítkového ředění. Dále byla u tohoto kmene sledována schopnost plošné dekontaminace pomocí kometárního výboje.

Sekce : Fyzika

Baktericidní účinky stabilizovaného kladného a záporného korónového výboje

Autor: Jiří Matějka
Ročník: M1
Ústav: fyziky a měřicí techniky
Školitel: Ing. Josef Khun, Ph.D.

V práci je provedeno srovnání baktericidních účinků nízko-teplotního plazmatu generovaného v různých režimech elektrického výboje. Zkoumanými mikroorganismy byly bakterie *Escherichia coli* a *Staphylococcus epidermidis* ve fyziologickém roztoku. Nízko-teplotní plazma bylo vytvořeno postupně ve čtyřech režimech pozitivního a negativního korónového výboje a tyto režimy byly porovnány z hlediska účinnosti dekontaminace. Jako doplňující měření byla provedena emisní spektrometrie všech režimů výbojů.

Sekce : Fyzika

Baktericidní účinky postupného působení plazmatu generovaného v různých režimech korónového výboje

Autor: Eliška Staňková
Ročník: B3
Ústav: fyziky a měřicí techniky
Školitel: Ing. Josef Khun, Ph.D.

V práci je provedeno porovnání baktericidních účinků nízko-teplotního plazmatu vytvořeného ve čtyřech různých režimech modifikovaného kladného a záporného korónového výboje. Modelovým mikroorganismem byla bakterie *Staphylococcus epidermidis* ve fyziologickém roztoku. Bakteriální suspenze byla postupně, s časovou prodlevou 30 sekund, exponována všemi možnými dvojicemi režimů korónového výboje. Dekontaminační účinnost působení dané kombinace režimů byla vyhodnocována počítáním vyrostlých CFU na živném médiu.

Sekce : Fyzika

Dekontaminační vlastnosti nízkoteplotního plazmatu

Autor: Michaela Švarcová
Ročník: B3
Ústav: počítačové a řídicí techniky
Školitel: Ing. Hana Soušková, Ph.D.

V této práci jsme analyzovali účinky nízkoteplotního plazmatu na mikromycety druhů; *Microsporum canis*, *Trichophyton inerdigitale*, *Trichophyton rubrum* a *Arthroderma benhamiae*. Nízkoteplotní plazma jsme aplikovali ve formě korónového a kometárního výboje. Kometární výboj jsme aplikovali také na kůži napadenou mikroorganismem *Trichophyton mentagrophytes*.

Sekce : Fyzika

Detekční vlastnosti multivrstvy s nanostrukturním oxidem cíničitým připravené technikou postupného nanášení vrstev z roztoku u plynového senzoru na bázi krystalových mikrováček

Autor: Jan Vávra
Ročník: B2
Ústav: fyziky a měřicí techniky
Školitel: Mgr. Jaromír Seidl

Nanostrukturní SnO_2 je široce používán v polovodičových senzorech plynů. Smyslem tohoto výzkumu byla optimalizace tloušťky a struktury vrstev SnO_2 u plynového senzoru na bázi krystalových mikrováček (QCM). Citlivá multivrstva byla připravena technikou postupného nanášení vrstev z roztoku (LbL) a to střídavým nanášením Polydiallyldimethylammonium chloridu (PDDA) a nanočástic SnO_2 . Tímto procesem byla vytvořena porézní multivrstva na bázi SnO_2 a zkoumány detekční vlastnosti tohoto QCM senzoru. Senzory založené na tomto principu mají potenciál k experimentálnímu i průmyslovému využití.

Sekce: **Měřicí technika**
místnost B303, 9.00 hod

Komise:

Předseda: doc. Ing. Karel Kadlec, CSc.

Členové: Ing. Jitka Kopecká
Ing. Šárka Piskačová, CSc.

Soutěžící: Hujacová Andrea
Flachsová Adéla
Tomeček David
Vaňková Petra
Žitek Václav
Živčáková Martina

Sekce : Měřicí technika

Řízení technologických parametrů v uzavřeném prostoru metodami číslicového řízení

Autor: Andrea Hujacová
Ročník: B3
Ústav: fyziky a měřicí techniky
Školitel: Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D., Ing. Ladislav Fišer, Ph.D.

Byla navržena a sestrojena aparatura pro regulaci teploty a vlhkosti v uzavřeném prostoru. V rámci realizace aparatury bylo sestrojeno topné těleso a ověřena homogenita teplotního pole. V rámci ověřování parametrů byla naměřena přechodová charakteristika pro teplotu. Soustava byla identifikována, na základě čeho se navrhuje regulátor založený na vývojovém kitu Arduino.

Sekce : Měřicí technika

Řízení technologických parametrů v uzavřeném prostoru jako spojitého signálu

Autor: Adéla Flachsová
Ročník: B2
Ústav: fyziky a měřicí techniky
Školitel: Ing. Ladislav Fišer, Ph.D., Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.

Byla navržena a sestrojena aparatura pro regulaci teploty a vlhkosti v uzavřeném prostoru. V rámci realizace aparatury bylo sestrojeno topné těleso a ověřena homogenita teplotního pole. V rámci ověřování parametrů byla naměřena přechodová charakteristika pro teplotu. Soustava byla identifikována na základě čeho se navrhuje regulátor založený na operačních zesilovačích.

Sekce : Měřicí technika

Tvorba kovových nanočástic na ftalocyaninech a studium jejich vlastností pro aplikaci v senzorice plynů

Autor: David Tomeček
Ročník: M1
Ústav: fyziky a měřicí techniky
Školitel: Ing. Přemysl Fitl, Ph.D.

V rámci práce jsem připravil sadu vodivostních senzorů na bázi ftalocyaninů, které jsem osadil katalytickými nanočásticemi a otestoval z hlediska senzorických vlastností. Data získaná při naprašování a proměřování senzorických vrstev jsem utřídil a interpretoval. Interpretace je podložena výstupy z experimentální analýzy morfologie povrchů a spektrofotometrických měření.

Sekce : Měřicí technika

Analýza transparentních materiálů

Autor: Petra Vaňková
Ročník: B3
Ústav: fyziky a měřicí techniky
Školitel: Ing. Bc. Anna Korbářová, Ph.D.

Vytvářely jsme vhodný automatizovaný systém, který umí určit počet, kruhovitost a plochu bižuterních kamínků z firmy Preciosa. Analyzovaly jsme jak homogenní vzorky, tak i směsi kamínků, čímž jsme chtěly nasimulovat skutečnou průmyslovou výrobu. Vytvořily jsme program v LabVIEW, s jehož pomocí můžeme celý postup automatizovat. V druhé části práce jsme analyzovaly vady jednotlivých kamínků pod stereomikroskopem.

Sekce : Měřicí technika

Elektronický nos pro analýzu lidského dechu

Autor: Václav Žitek
Ročník: B3
Ústav: fyziky a měřicí techniky
Školitel: Ing. Dušan Kopecký, Ph.D.

Senzory uspořádané do tzv. „elektronických nosů“ představují budoucnost kvalitativní a kvantitativní analýzy plyných směsí. Jejich využití se předpokládá v mnoha oborech lidské činnosti, jako je například analýza potravinářských produktů, bezpečnostní aplikace (detekce toxických a výbušných plynů a par) nebo vysoce náročné detekce biomarkerů onemocnění v medicínských aplikacích. Tato práce se zabývá návrhem a konstrukcí elektronického nosu, který je schopen automatického měření až osmi vodivostních senzorů v odezvě na šest různých plyných směsí. Elektrická odezva senzorů je snímána pomocí měřicí ústředny. Celá aparatura je ovládána a výsledky zpracovávány pomocí programu, který byl vytvořen v programovacím prostředí LabVIEW. Aparatura byla otestována na sadě vodivostních senzorů plynů na bázi nanostrukturovaných vodivých polymerů. V budoucnu bude tento elektronický nos sloužit jako experimentální zařízení pro detekci velmi nízkých koncentrací (stovky ppm) biomarkerů nacházejících se v lidském dechu (isopren, aceton, merkaptany, alkoholy a další).

Sekce : Měřicí technika

Iný pohľad na obnôžkový peľ alebo čo oko nevidí, mikroskop odhalí

Autor: Martina Živčáková
Ročník: B3
Ústav: fyziky a měřicí techniky
Školitel: Ing. Bc. Anna Korbářová, Ph.D.

Táto práca vznikla za súčasnej spolupráce Solovenskej poľnohospodárskej fakulty v Nitre a Ústavu sacharidů a cereálii pod vedením Doc. Mgr. Andriy Synytsya, PhD. a Ing. Roman Bleha. Obnôžkový peľ je komerčne dostupný produkt využívaný ako potravinový doplnok. Výskumy tvrdia, že obsahuje veľa prospešných látok ako zdroj bielkovín, minerálnych látok, mastných kyselín a iných zdraviu prospešných látok. V tejto práci sme sa na tento druh peľu pozreli z iného pohľadu. Využili sme metódy obrazovej analýzy, kedy nás zaujímalo do akej miery je obnôžkový peľ od včelára, prípadne výrobcu homogénny a do akej miery heterogénny. Dôsledok tejto heterogenity sa môže potom preukázať hlavne u alergikov. Z predošlých nameraných dát, ktoré sa týkali farebnej distribúcie, nás zaujímalo či existuje nejaká súvislosť medzi farebnosťou obnôžkového peľu a jeho konkrétnym zaradením do botanického rodu. Namerané dáta boli jednak porovnané s farbou, jednak boli porovnávané s odbornou literatúrou so snahou určenia botanického rodu.

Sekce: **Informatika**
místnost B212, 9.00 hod

Komise:

Předseda: doc. Dr. Ing. Martin Vrnáta

Členové: Ing. Ladislav Fišer, Ph.D.
Ing. Jana Finkeová, CSc.
RNDr. Jiřina Scholtzová (FIT ČVUT)

Soutěžící:

Crha Jan
Dolejšek Michal
Hrbková Ema
Schätz Martin
Wiesnerová Lenka
Yudina Olga

Sekce : Informatika

Úloha inverzní kinematiky při řízení robotického manipulátoru

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

Porovnal jsem dva způsoby výpočtu natočení kloubů používané pro navádění ramene robotického manipulátoru metodou inverzní kinematiky a následně jsem pro ně vytvořil skripty. První skript počítá potřebné úhly nastavení jednotlivých kloubů ramene a druhý skript toto nastavení přepočítává pro fyzický model a zahrnuje do něj i všechna omezení modelu. Výstupem druhého skriptu je soubor hodnot, které jsou dále použity pro pohyb ramene z aktuální polohy do požadované. Dále jsem rozšířil již existující grafické uživatelské rozhraní o automatické ovládání, které využívá výše zmíněné skripty a velmi usnadňuje celkové ovládání modelu.

Sekce : Informatika

Využití modulu RaspberryPi pro řízení mobilního robota

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

Cílem práce je seznámení s modulem RaspberryPi a jeho využití k ovládání mobilního robota MINDSTORMS NXT od společnosti Lego. Ovládání robota je realizováno přes webový prohlížeč řídicího počítače propojeného s webovým serverem Apache na modulu RaspberryPi s využitím bezdrátového rozhraní WiFi. Součástí rozhraní je dále video stream přenášený z kamery umístěné na platformě robota. Na platformě je dále umístěn robotický manipulátor schopný zvedat předměty vhodné váhy a rozměrů.

Sekce : Informatika

Aplikace metod obrazové analýzy při automatizovaném hodnocení mikroskopických snímků

Autor: Ema Hrbková
Ročník: B3
Ústav: počítačové a řídicí techniky
Školitel: Ing. Martina Mudrová, Ph.D.

Cílem práce je vytvoření algoritmu, který rozdělí objekty v binárním obraze nanomateriálu do dvou skupin. Ke klasifikaci objektů byl zvolen algoritmus K-means a byly zkoumány různé vlastnosti objektů z pohledu jejich vhodnosti pro danou klasifikaci. Práce se také zabývá možnostmi aplikace vybraných metod zpracování binárních obrazů z pohledu kvality klasifikace. Výsledný algoritmus je testován v systému Matlab na reálných snímcích nanomateriálů.

Sekce : Informatika

Využití systému MS Kinect pro rozpoznávání pohybu v biomedicínské diagnostice poruch chůze

Autor: Martin Schätz
Ročník: M1
Ústav: počítačové a řídicí techniky
Školitel: prof. Ing. Aleš Procházka, CSc.

Tato práce se zabývá spojením MS Kinectu s programovým prostředím MatLab, možnostmi nastavení obrazového a hloubkového senzoru a obsahuje také ukázkou několika skriptů pro získávání obrazových dat ze zařízení. Popis senzorů obsahuje analýzu jejich chyb a šumu. Součástí práce je i ukáзка zobrazení kostry v prostoru, výpočet vývoje těžiště člověka v čase, který se využívá k diagnostice poruch chůze, a možnost využití filtrace k vyhlazení jeho vývoje. Součástí je i popis možnosti vzniku problému se vzorkováním při nesprávném nastavení rychlosti zaznamenávání snímků u senzorů.

Sekce : Informatika

Studium digitální evoluce

Autor: Lenka Wiesnerová
Ročník: B2
Ústav: fyziky a měřicí techniky
Školitel: Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.

Na stávajícím systému pro studium evoluce digitálních organismů SVET jsem vykonala sérii nových experimentů. Sledovala jsem chování se systému v závislosti na různých parametrech prostředí jako je velikost, četnost mutací apod. V práci popisuji různé možné scénáře pozorovaného chování organismů a mutaci jednotlivých organismů.

Sekce : Informatika

Stanovení parametrů matematického modelu fermentace

Autor: Olga Yudina
Ročník: B2
Ústav: počítačové a řídicí techniky
Školitel: Ing. Jana Finkeová, CSc.

Cílem práce je stanovení parametrů matematického modelu fermentačního procesu. Jedná se o proces výroby biopolymeru PHA bakteriemi *Pseudomonas putida* KT2442. Děj je popsán soustavou obyčejných diferenciálních rovnic a parametry modelu jsou stanoveny na základě naměřených dat z experimentů, které byly provedeny v Laboratoři řízení bioprocésů. Program pro identifikaci parametrů modelu je vytvořen v systému Matlab.