

Seznam sekcí a složení komisí

- Sekce: **Analytická chemie 1.**
knihovna ÚACH (č. dv. 236), 9.00 hod
- Komise:
- Předseda: doc. RNDr. Dr. David Sýkora
- Členové: Mgr. Alla Synytsya, Ph.D.
Ing. Vadym Prokopec, Ph.D.
- Soutěžící: Bc. Andris Erik
Bc. Chmel Jakub
Bc. Pelánková Barbora
Bc. Ryšavá Helena
Sedláček Jakub
Bc. Vavřinová Danuše
Bc. Vrzal Lukáš
- Sekce: **Analytická chemie 2.**
posluchárna A21, 9.00 hod
- Komise:
- Předseda: doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.
- Členové: Ing. Magda Vosmanská, CSc.
Ing. Jindřich Koubek, Ph.D.
Mgr. Filip Dvořák (zástupce firmy P-Lab)
- Soutěžící: Bc. Činčalová Kateřina
Bc. Havránek Lukáš
Bc. Janoušek Jiří
Bc. Judexová Miluše
Králík František
Bc. Schwarz Jaroslav
Švecová Marie
- Sekce: **Analytická chemie 3.**
posluchárna A105, 9.00 hod
- Komise:
- Předseda: doc. Ing. Vladimír Setnička, Ph.D.
- Členové: RNDr. Pavel Zachař, CSc.
RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.
Ing. Ladislav Tenkl (zástupce firmy Nicolet CZ)
- Soutěžící: Bc. Balán Jiří
Bc. Bot Marek
Bc. Grelich Filip
Jeništová Adéla
Bc. Klognerová Kamila
Bc. Pederzoli Marek
Bc. Zemenová Jana

Sekce: **Teoretická fyzikální chemie
místnost A402, 9.00 hod.**

Komise:

Předseda: prof. RNDr. Jiří Kolafa, CSc.

Členové: prof. Ing. Anatol Malijevský, CSc.
Ing. Michal Bureš, CSc.

Soutěžící: Bc. Beran Pavel
Bc. Hollas Daniel
Bc. Chmela Jiří
Bc. Klajmon Martin
Novotná Hana
Rubešová Martina
Svoboda Vít

Sekce: **Aplikovaná fyzikální chemie I.
místnost A125, 9.00 hod. (6 soutěžních prací)**

Komise:

Předseda: doc. Ing. Milan Šípek, CSc.

Členové: doc. Ing. Lidmila Bartovská, CSc.
Ing. Aleš Blahut

Soutěžící: Bubeníček Petr
Bc. Mahnel Tomáš
Bc. Rudenko Nadiia
Bc. Štejfá Vojtěch
Bc. Vataščin Erika
Bc. Velas Jiří

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

Komise:

Předseda: doc. Ing. Lubomír Hnědkovský, CSc.

Členové: Ing. Štěpán Hovorka, Ph.D.
Dr. Ing. Pavel Vrbka

Soutěžící: Bc. Cerhová Marie
Bc. Lanč Marek
Partsch Tomáš
Radoň Václav
Serra Paulo
Bc. Vlk Ondřej

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

Komise:

Předseda: doc. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Členové: Ing. Otto Hadač, Ph.D.

Ing. Lubor Buřič, PhD (Ricardo)

Ing. Lucie Dolejší (Chemoprojekt)

Ing. Alexandr Zubov

Ing. Richard Pokorný

Soutěžící:

Březina Jan

Bc. Ferkl Pavel

Bc. Helebrantová Lucie

Bc. Leskovjan Martin

Bc. Seifert Michal

Skala Martin

Bc. Šafránek Jaroslav

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

Komise:

Předseda: doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha

Členové: Ing. Zdeněk Grof, PhD.

Dr. Ing. Juraj Kilian (Mondi)

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

Ing. Pavel Kovačík

Ing. Jaroslav Kotowski

Soutěžící:

Gorný Damian

Bc. Jakubec Martin

Bc. Jankuj Petr

Bc. Kohoutová Štěpánka

Navrátil Vít

Novák Matěj

Šnajdr Ivo

Bc. Vrána Jiří

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

Komise:

Předseda: doc. Ing. Michal Příbyl, Ph.D.

Členové: Ing. František Jonáš Rejl, PhD.

Ing. Jiří Prokop (Interpharma)

Ing. Jiří Maršálek

Ing. Pavel Beránek

Soutěžící:

Bc. Arvajová Adéla

Bc. Dundálek Jan

Bc. Isoz Martin

Bc. Matuška Petr
Rygl Adam
Sládek Viktor
Bc. Smrčka David

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

Komise:

Předseda:

Členové:

doc. Ing. Dalimil Šnita, Ph.D.
Ing. Michal Kordač, PhD.
Ing. Jan Nájemník (Momentive)
Ing. Martin Hubička (Lovochemie)
Ing. Josef Chmelař
Ing. Marek Nebyla

Soutěžící:

Fojtíková Romana
Bc. Hulík Radim
Bc. Macháč Václav
Bc. Pittermannová Anna
Schneider Patrik
Šoltys Marek
Václavík Marek
Bc. Zíka Jan

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

Komise:

Předseda:

Členové:

doc. Ing. Stanislava Grosová, CSc.
Ing. Olga Kutnohorská, Ph.D.
Ing. Dana Strachotová, Ph.D.
Ing. Miroslav Vágner, MBA, Ph.D.

Soutěžící:

Bc. Applová Renáta
Bc. Kadlecová Lucie
Bc. Kšírl Michal
Bc. Kubeš Stanislav
Bc. Labík Libor
Bc. Mokřý Ondřej
Bc. Švorčík Adam
Bc. Weber Pavel

Sekce: **Fyzika a měřicí technika**
posluchárna B212, 9.00 hod

Komise:

Předseda: doc. Ing. Helena Uhrová, CSc.

Členové: Mgr. Tomáš Kotrba

Ing. Ladislav Fišer, Ph.D.

Soutěžící: Havlas Michal
Hermannová Kristýna
Kloudová Iva
Matějka Jiří
Tomeček David
Valentová Marie
Živčáková Martina

Sekce: **Inženýrská informatika, zpracování obrazů a řízení procesů**
posluchárna A40, 8.30 hod

Komise:

Předseda: prof. Ing. Jan Náhlík, CSc.

Členové: Ing. Martina Mudrová, Ph.D.

Ing. Jan Švihlík, Ph.D.

RNDr. Pavel Cejnar

Ing. Jana Finkeová, CSc.

Soutěžící: Kopal Jakub
Polák Ondřej
Sedlecká Lucie
Schätz Martin
Špale Martin
Šťástka Ladislav
Bc. Ťupa Ondřej
Bc. Vavryčuková Julie
Yudina Olga

Sekce: **Analytická chemie 1. (přednášková)**
knihovna ÚACH (č. dv. 236), 9.00 hod

Komise:

Předseda: doc. RNDr. Dr. David Sýkora

Členové: Mgr. Alla Synytsya, Ph.D.
Ing. Vadym Prokopec, Ph.D.

Soutěžící: Bc. Andris Erik
Bc. Chmel Jakub
Bc. Pelánková Barbora
Bc. Ryšavá Helena
Sedláček Jakub
Bc. Vavřinová Danuše
Bc. Vrzal Lukáš

Partner sekce Analytická chemie 1.
Národní technické muzeum



Sponzoři sekce Analytická chemie 1.

Nicolet CZ
MiT
Olympus Czech Group
P-Lab
Beckman Coulter Česká republika
Merck
Siad Czech
RMI
HPST
Chromservis
Maneko
Sigma Aldrich
Tevak – Leybold v ČR a SR



Lasery, fotonika
a jemná mechanika

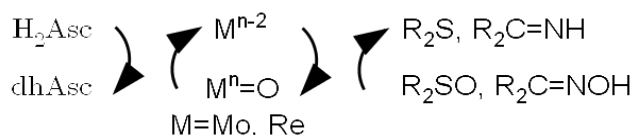


Sekce : Analytická chemie 1

Reductive Properties of Ascorbic Acid in Synthesis

Autor: Bc. Erik Andris
Ročník: M2
Ústav: analytické chemie
Školitel: Ing. Jiří Šrogl, PhD

Although ascorbic acid (H_2Asc) has already found its synthetic use in radical reactions to regenerate oxidised metal catalysts, the use as a reductant of organic compounds is not that widespread. The main reason probably is H_2Asc being relatively weak reducing agent. This weakness can be however be seen as an advantage, because weakness implies selectivity. H_2Asc itself is not reactive towards organic substrates except for some photochemical reactions. Therefore, a suitable catalytic system must be used to achieve the reduction. A study utilizing these reduction properties in conjunction with metal catalyst is presented. Practical applications are demonstrated on reduction of sulfoxides, providing some remarks on other substrates (mostly oximes). A mechanism of the reductive action is proposed and compared with some other similar organic reducing systems.



Sekce : Analytická chemie 1

Rotační bariéry jako indikátor mezimolekulárních interakcí

Autor: Bc. Jakub Chmel
Ročník: M2
Ústav: analytické chemie
Školitel: doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.

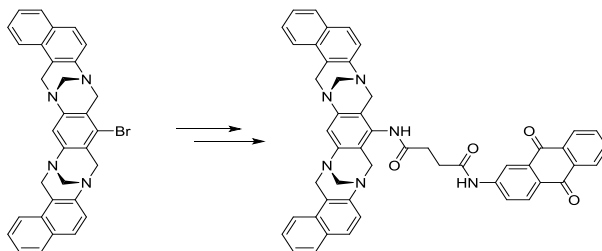
Mezimolekulární interakce hrají důležitou roli v životních procesech, a současná věda jim věnuje velkou pozornost. Při interakci molekul dochází za vzniku komplexu, zejména v místě interakce, ke změnám na molekulární úrovni. Především dochází ke změně chemického okolí zúčastněných atomů, což je studováno jako změna chemických posunů v NMR spektrech. Zároveň v molekulách dochází ke změnám rotací a vibrací vazeb a skupin, které jsou obvykle studovány infračervenou spektroskopií. Rotace některých skupin (např.: bifenylly a binaftyly) je však možné studovat i pomocí NMR. Ze závislosti spekter na teplotě lze stanovit teplotu koalescence a energetickou bariéru dané rotace. Přestože je NMR běžně používána pro studium rotačních bariér, vztah rotačních bariér a mezimolekulárních interakcí je takto sledován velmi zřídka. Pro studium tohoto vztahu byly připraveny bifenyllové a binaftylové deriváty naftalenových bis-Trögerovýchází. Tyto deriváty byly připraveny předem známými postupy, chromatograficky přečištěny, spektrálně charakterizovány pomocí spekter 1H a ^{13}C NMR, signály byly jednoznačně přiřazeny pomocí korelačních 2D NMR technik (gCOSY, gHMBC, gHSQC, NOESY).

Sekce : Analytická chemie 1

Vývoj barevného indikátoru elektronově deficitních aromátů

Autor: Bc. Barbora Pelánková
Ročník: M2
Ústav: analytické chemie
Školitel: Doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.

Barevné indikátory jsou významnou součástí našeho života, nachází uplatnění v mnoha rozličných oblastech a přináší s sebou nové možnosti a využití. Díky jednoduchému vyhodnocování zrakem jsou vhodné k častému a rychlému detekování sledovaných analytů. Tato práce je zaměřená na vývoj nového barevného indikátoru založeného na syn diastereoisomeru naftalenového derivátu bis-Trögerovy báze (bisTB). Molekula tohoto indikátoru je připravována z bisTB, ke které je vhodnou spojkou kovalentně připojen barevný aromát (např. antrachinon), který umožňuje vznik intramolekulárního komplexu. Na základě spektrálních změn lze sledovat interakce tohoto komplexu s elektronově deficitními aromáty. Dále je studována možnost připojení molekuly indikátoru k pevnému povrchu pomocí vhodné funkční skupiny, čímž lze rozšířit využitelnost tohoto molekulárního systému.



Sekce : Analytická chemie 1

Stanovení konstant stability komplexů β -cyklodextrinu a enantiomerů Trögerovy báze

Autor: Bc. Helena Ryšavá
Ročník: M1
Ústav: analytické chemie
Školitel: RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.

Cyklický oligosacharid β -cyklodextrin je vhodným hostitelem pro vznik pevných inkluzních komplexů s řadou sloučenin, především organických látek lipofilního charakteru. Mezi příhodné hosty patří například Trögerova báze či její deriváty, které představují velký potenciál v supramolekulární chemii, neboť jsou díky tvorbě rigidních chirálních struktur schopny specificky interagovat s řadou důležitých analytů. Sílu interakce hosta s hostitelem ve vzniklém komplexu lze číselně popsat konstantou stability. Tuto konstantu lze určit mnoha analytickými technikami.

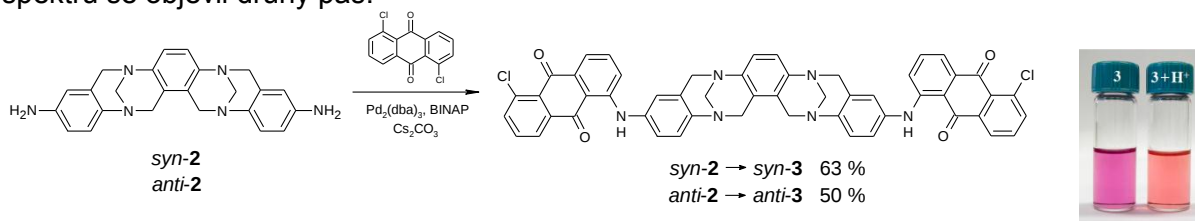
Předkládaná experimentální práce prezentuje stanovení podmíněných konstant stability β -cyklodextrinu s enantiomery Trögerovy báze ve vodném prostředí při různém pH pomocí kapilární elektroforézy, nukleární magnetické rezonance, elektronové spektroskopie cirkulárního dichroismu a molekulové absorpční spektroskopie v ultrafialové oblasti.

Sekce : Analytická chemie 1

Barevný anthrachinonový indikátor založený na bis-Trogerově bázi

Autor: Jakub Sedláček
Ročník: B3
Ústav: analytické chemie
Školitel: Doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.

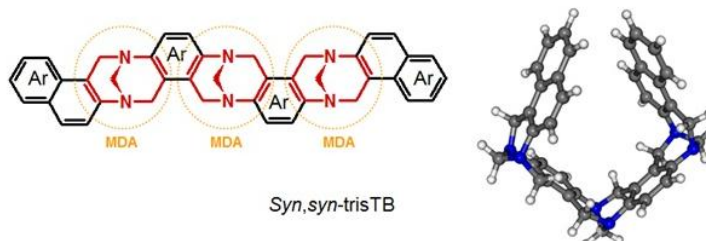
Barevný anthrachinonový indikátor byl připraven ve dvou reakčních krocích. Redukcí dinitro-bisTB v kyselém prostředí byly získány dva diastereoizomery diamino-bisTB *syn-2* a *anti-2*. Následně byl Buchwaldovou-Hartwigovou aminací *syn-2* s 1,5-dichloranthrachinonem připraven barevný derivát *syn-3*, mající tvar molekulární pinzety. Stejným postupem byl z *anti-2* připraven derivát *anti-3*. S oběma fialově zbarvenými deriváty *syn-3* a *anti-3* byly provedeny orientační UV-Vis titrace. Oba deriváty vykazovaly v silně kyselém prostředí (pH = 1) stejný posun absorpčního maxima k nižším vlnovým délkám a nárůst extinkčního koeficientu. Naopak v UV oblasti spektra absorbovala *syn-3* silněji než *anti-3* a v jejím spektru se objevil druhý pás.



Syn,syn-Trögerova báze jako chirální selektor

Autor: Bc. Danuše Vavřínová
Ročník: M2
Ústav: analytické chemie
Školitel: Doc. Bohumil Dolenský

Chirální rozpoznávání se stalo předmětem velkého zájmu z důvodu chiralit většiny bioorganických molekul (proteiny, sacharidy apod.). Za tímto účelem jsou připravovány chirální selektory. Jako potenciální selektory byly v nedávné době představeny chirální molekulární klipsy - deriváty Tris-Trögerovy báze (trisTB). Strukturu trisTB lze popsat jako čtyři aromatické kruhy (Ar) sériově spojené methanodiazocinem (MDA), schématicky Ar-MDA-Ar-MDA-Ar-MDA-Ar. Díky vzájemné konfiguraci diazocinových částí má trisTB čtyři isomery (*anti,anti*-trisTB, *anti,syn*-trisTB, *syn,anti*-trisTB a *syn,syn*-trisTB), z nichž molekula *syn,syn* isomeru má tvar molekulárního klipsu. Obsahem této práce je zkoumání možnosti využití naftalenového trisTB derivátu jako chirálního selektoru. Práce zahrnuje izolaci a identifikaci čistých enantiomerů trisTB, studium jejich interakce s chirálními látkami, a chemické modifikace trisTB umožňující kovalentní připojení k pevné fázi (např. zlaté nanočástice).



Sekce : Analytická chemie 1

**Reziduální dipolární interakce jako účinný nástroj
konformační analýzy: Neočekávaný produkt kyselé
hydrolýzy monospirothiacalix[4]arenu.**

Autor: Bc. Lukáš Vrzal
Ročník: M1
Ústav: Centrální laboratoře VŠCHT Praha
Školitel: Ing. Hana Dvořáková, CSc.

Předmětem práce byla konformační studie inherentně chirálních enantiomerů, které neočekávaně vznikly během studia reaktivity monospirothiacalix[4]arenu, pomocí metod spektroskopie NMR. Sadou standardních experimentů (^1H , ^{13}C , ^1H - ^1H COSY, ^1H - ^{13}C HMQC a ^1H - ^{13}C HMBC) jsem přiřadil všechny ^1H i ^{13}C rezonance příslušným jádrům dvou studovaných konformerů. S využitím nukleárního Overhauserova efektu (NOE) bylo možné jednoznačně vyřešit pouze konformaci jedné látky. Ke studiu druhého konformeru bylo nutné získat další strukturní informace. Toho jsem dosáhl zavedením látky do roztoku kapalných krystalů, tedy jejím zorientováním v magnetickém poli. To následně umožnilo změřit hodnoty reziduálních dipolárních interakcí (RDC) a jednoznačně určit konformaci. Výsledky konformační analýzy metodami NOE a RDC jsou u obou látek v dobré shodě s *ab-initio* výpočty.

Sekce: **Analytická chemie 2. (přednášková)**
posluchárna A21, 9.00 hod

Komise:

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

Členové: Ing. Magda Vosmanská, CSc.
Ing. Jindřich Koubek, Ph.D.
Mgr. Filip Dvořák (zástupce firmy P-Lab)

Soutěžící: Bc. Činčalová Kateřina
Bc. Havránek Lukáš
Bc. Janoušek Jiří
Bc. Judexová Miluše
Králík František
Bc. Schwarz Jaroslav
Švecová Marie

Partner sekce Analytická chemie 2.

Národní technické muzeum



Sponzoři sekce Analytická chemie 2.

Nicolet CZ
MiT
Olympus Czech Group
P-Lab
Beckman Coulter Česká republika
Merck
Siad Czech
RMI
HPST
Chromservis
Maneko
Sigma Aldrich
Tevak – Leybold v ČR a SR



Lasery, fotonika
a jemná mechanika



Sekce : Analytická chemie 2

Studium sekundární struktury antimikrobiálních peptidů metodami cirkulárního dichroismu

Autor: Bc. Kateřina Činčalová
Ročník: M2
Ústav: analytické chemie
Školitel: Doc. Ing. Vladimír Setnička, Ph.D.

Vznik nových onemocnění, stejně jako zvyšující se odolnost bakterií vůči antibiotikům, se stala rostoucí hrozbou pro člověka. Toto je hlavním důvodem pro hledání nových látek, které vykazují antibakteriální účinky proti patogenům již odolným vůči konvenčním antibiotikům. V současnosti je pozornost zaměřena především na středně velké peptidy, tzv. antimikrobiální peptidy, které by mohly nahradit současná antibiotika. I přes rozdílné složení těchto peptidů je možné pozorovat určité společné rysy v biologické aktivitě a jejich antimikrobiálním účinku, který je odrazem konformace a konformačních změn těchto peptidů. Cílem této práce bylo studium konformace antimikrobiálního peptidu Lasioglossinu (H-Val-Asn-Trp-Lys-Lys-Ile-Leu-Gly-Lys-Ile-Ile-Lys-Val-Val-Lys-NH₂) a jeho vybraných analogů metodami spektroskopie elektronového (ECD) a vibračního cirkulárního dichroismu (VCD). VCD a ECD spektra byla měřena ve vodných roztocích s různým obsahem trifluorethanolu, který umožňuje napodobit prostředí buněčné membrány. Ze získaných spekter bylo odhadnuto zastoupení jednotlivých sekundárních struktur těchto peptidů v závislosti na jejich sekvenci a použitém rozpouštědle. Diskutován byl rovněž vztah nalezené sekundární struktury a antimikrobiální aktivity.

Sekce : Analytická chemie 2

Spektroelektrochemická studie 4-aminobenzenthionu na zlatém, stříbrném a měděném substrátu

Autor: Bc. Lukáš Havránek
Ročník: M1
Ústav: analytické chemie
Školitel: prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka

Spektroskopie povrchem zesíleného Ramanova rozptylu (SERS) je metoda vhodná k detekci a studii analytu adsorbovaného na kovovém substrátu. Molekula 4-aminobenzenthionu (4-ABT) se snadno přes atom síry chemisorbuje na vhodně nanostrukturovaný zlatý, stříbrný a měděný povrch. Za určitých fotokatalytických podmínek může 4-ABT podléhat kopulační reakci na 4,4' dimerkaptoazobenzen (4,4' DMAB). Vznik 4,4' DMAB lze snadno indikovat v SERS spektrech díky intenzivním pásům okolo 1440, 1395 a 1150 cm⁻¹.

Již dříve byla molekula 4-ABT studována na různých měděných substrátech při excitační vlnové délce 1064 nm, ale pásy 4,4' DMAB nebyly pozorovány. Na rozdíl od prací na zlatých a stříbrných nanočásticích s excitací ve viditelné oblasti.

Cílem této práce bylo porovnat reaktivitu analytu na třech kovových substrátech. SERS spektra byla měřena in-situ ve spektro-elektrochemické cele s tříelektrodovým zapojením při excitační vlnové délce 785 nm. Na substráty s adsorbovaným 4-ABT byly aplikovány potenciálové cykly a v naměřených sadách spekter na zlatě, stříbře a mědi bylo sledováno, zda dochází k fotokatalytické reakci 4-ABT na 4,4' DMAB.

Sekce : Analytická chemie 2

Funkcionalizace nanočástic elektronakceptorními a elektrondonorními ligandy a jejich spektroskopická charakterizace

Autor: Bc. Jiří Janoušek
Ročník: M1
Ústav: analytické chemie
Školitel: prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka, RNDr. Ivo Starý, CSc.

Zlaté nanočástice jsou charakteristické svou stálostí, modifikovatelností a neobyčejným způsobem přenosu náboje, který je na rozdíl od makroskopických kovů řízen kvantovými jevy. Zakotvením elektrondonorního, resp. elektronakceptorního, ligandu na zlatých nanočásticích můžeme ovlivnit jejich vlastnosti, zejména samoskladbu do aglomerátů a přenos náboje ve vzniklých hybridních systémech. Pokud jako základní skelet molekuly ligandů použijeme π -elektronový systém, dochází k donor-akceptorní interakci také mezi tímto systémem a povrchovými atomy nanočástic. Modifikované nanočástice uspořádané v tenkých vrstvách tvoří stacionární systémy, které díky svým unikátním vlastnostem mohou nalézt uplatnění v molekulární elektronice.

V rámci této práce byly připraveny zlaté nanočástice funkcionalizované ligandy obsahující π -elektronový systém a elektronakceptorní, resp. elektrondonorní skupinu (naftalendiimid, *m*-dinitrobenzen; tetrathiafulvalen, pyren), jejichž organosoly byly charakterizovány UV/Vis, IR a Ramanovou spektroskopií. Velikost a tvar nanočástic byly určeny pomocí transmisní elektronové mikroskopie.

Sekce : Analytická chemie 2

Analýza tkání kolorektálního karcinomu pomocí Ramanovy spektroskopie s různou excitační vlnovou délkou.

Autor: Bc. Miluše Judexová
Ročník: M2
Ústav: analytické chemie
Školitel: Mgr. Alla Synytsya, PhD.

Ramanova spektroskopie je jedna z málo nedestrukčních metod, která dovoluje sledovat stav biologických tkání, bez dodatečného zásahu do vzorku, a zároveň ukazuje velký potenciál v diagnostice nádorových onemocnění. Volba vhodné excitační vlnové délky při získání spektroskopických dat Ramanovou spektroskopií může napomoci při rozhodování ve vyhledávání optimálních podmínek měření. Pro měření Ramanových spekter tkání tlustého střeva při kolorektálním karcinomu byly použity: FT Raman spektrometr s excitační vlnovou délkou ~1094 nm, DeltanAdvantage NIR spektrometr s excitační vlnovou délkou ~785 nm a ChiralRAMAN-2XTM s excitační vlnovou délkou ~532 nm. Tkáně tlustého střeva, poškozené a nepoškozené kolorektálním karcinomem, byly měřeny ve skleněných vialkách a pomocí mikroskopického nástavce na tkáňových řezech v různých lokalitách. V průběhu studia byl pozorován zesilovací rezonanční efekt u tkáňových chromoforů ve viditelné oblasti. Zároveň byly na Ramanových spektrech, poškozené a nepoškozené tkáně kolorektálním karcinomem, zaznamenány rozdíly, které by mohly mít význam pro diagnostiku onemocnění.

Sekce : Analytická chemie 2

Studium interakcí biliverdinu s modelovými systémy membrán metodou elektronového cirkulárního dichroismu

Autor: František Králík
Ročník: B3
Ústav: analytické chemie
Školitel: Ing. Pavlína Novotná

Žlučová bariva, bilirubin a biliverdin, jsou látky, které jsou studovány již přes sto padesát let. Přesto na počátku 21. století zjišťujeme nové informace o jejich významu, působení a vlastnostech. Kromě protizánětlivých a antioxidačních účinků prokázaných u obou barviv byla u bilirubinu zjištěna také neurotoxicita. Její příčinou je enantiomerní rozpoznávání bilirubinu na buněčných membránách nervových buněk vedoucí k apoptóze. Podobná studie pro biliverdin zatím chybí.

V předkládané práci byla využita chiroptická metoda elektronového cirkulárního dichroismu ke studiu interakcí biliverdinu s modelovými systémy membrán v podobě liposomů či micel. Byla pozorována enantioselektivní interakce biliverdinu s pozitivně nabitými liposomy tvořenými lipidem 3 β -[N-(N',N'-dimethylaminoethan)-carbamoyl]cholesterol hydrochloridem. Byl studován vliv pH, teploty a iontové síly na tento systém. Interakce biliverdinu s negativně nabitými a zwitterionickými liposomy pozorována nebyla. Byla však pozorována interakce biliverdinu s micelami tvořenými zwitterionickým surfaktantem 3-[(3-cholamidopropyl)dimethylamonium]-1-propansulfonátem.

Sekce : Analytická chemie 2

Využití spektroskopie ECD ke sledování konkurenční vazby léčivo-bilirubin na sérový albumin: role sekundárních vazebních míst

Autor: Bc. Jaroslav Schwarz
Ročník: M1
Ústav: analytické chemie
Školitel: Mgr. Iryna Goncharova, Ph.D.

Bilirubin (BR) je produktem metabolismu červeného krevního barviva hemu. V důsledku intramolekulárních vodíkových vazeb je BR ve vodě nerozpustný avšak rozpustný v lipidech. Je tak schopen pronikat do buněčných membrán a porušovat metabolické procesy v buňce. Volný bilirubin působí jako buněčný jed na jádra hlavových nervů, mozeček a sluchové dráhy. V organismu savců je jeho toxicita eliminována navázáním na sérový albumin. Vazba BR na albumin může být ovlivněna léky, což způsobuje problémy při léčení novorozenců a pacientů s nemocí jater. Této problematice byla věnována řada analytických studií, v nichž byla míra schopnosti vytlačení BR léčivem posuzována například na základě nepřímé detekce koncentrace uvolňovaného BR (peroxidační metoda). Cílem této práce je s využitím metody elektronového cirkulárního dichroismu, charakterizovat schopnost pěti vybraných léčiv konkurovat vazbě BR na albumin. V práci byly na základě spektrálních pozorování určeny vytěsňovací aktivity BR vzhledem k studovaným léčivům. S využitím postupu selektivního blokování jednotlivých vazebních míst ve struktuře albuminu byla prokázána důležitá role sekundárních vazebních míst při vazbě BR na albumin. Získané výsledky byly ověřeny pomocí ditaurátu bilirubinu, ve vodě rozpustném analogu přírodního BR.

Sekce : Analytická chemie 2

Analýza sekundárních rostlinných metabolitů metodami povrchem zesílené vibrační spektroskopie

Autor: Marie Švecová
Ročník: B3
Ústav: analytické chemie
Školitel: prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka

Rostliny jsou tvořeny základními stavebními látkami, ale i látkami, které jsou zastoupeny v nízkých koncentracích, např. sekundární metabolity, jenž mají i antioxidační účinky. Povrchem zesílená infračervená absorpce (SEIRA) a povrchem zesílený Ramanův rozptyl (SERS) jsou metody vibrační spektroskopie, které umožňují studium analytů obsažených ve vzorku ve velmi nízkých koncentracích. Zesílení signálu se dosahuje zesílením elektromagnetického pole v důsledku povrchové plasmové rezonance na částicích zlata, stříbra nebo mědi, které jsou elektrolyticky vyredukovány na povrch platinového terčíku. Analyt je měřen v podobě tenkého filmu, jenž je deponován z roztoku. Měření probíhají na Ramanových spektrometrech s různou excitační vlnovou délkou (663 nm, 785 nm, 1064 nm) a na infračerveném spektrometru s nástavcem pro difuzně reflektanční měření. Cílem práce je naměřit vibrační spektra quercetinu, chrysinu, luteolinu, pinocembrinu a galanginu na výše uvedených přístrojích a studovat teplotní závislosti získaných spekter.

Sekce:	Analytická chemie 3. (přednášková) posluchárna A105, 9.00 hod
Komise:	
Předseda:	doc. Ing. Vladimír Setnička, Ph.D.
Členové:	RNDr. Pavel Zachař, CSc. RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D. Ing. Ladislav Tenkl (zástupce firmy Nicolet CZ)
Soutěžící:	Bc. Balán Jiří Bc. Bot Marek Bc. Grelich Filip Jeništová Adéla Bc. Klognerová Kamila Bc. Pederzoli Marek Bc. Zemenová Jana

Partner sekce Analytická chemie 3.

Národní technické muzeum



Sponzoři sekce Analytická chemie 3.

Nicolet CZ
MiT
Olympus Czech Group
P-Lab
Beckman Coulter Česká republika
Merck
Siad Czech
RMI
HPST
Chromservis
Maneko
Sigma Aldrich
Tevak – Leybold v ČR a SR



Lasery, fotonika
a jemná mechanika



Sekce : Analytická chemie 3

Speciační analýza selenu v semenech řepky olejky

Autor: Bc. Jiří Balán
Ročník: M2
Ústav: analytické chemie
Školitel: Ing. Magda Vosmanská, CSc.

Selen se v buňkách vyskytuje zejména v seleno-proteinech, ve kterých může v aminokyselinách zatupovat síru. Tato práce se zabývá speciační analýzou nízkomolekulárních sloučenin selenu v odtučněném řepkovém šrotu, uvolněných ze seleno-proteinů enzymatickou hydrolýzou nespecifickou proteasou XIV. Účinnost extrakce byla určena z poměru celkového obsahu jednotlivých specií k celkovému obsahu selenu získanému po mikrovlnném rozkladu. Při použití vodného roztoku proteasy XIV činila 47%, zatímco v prostředí pufru Tris-HCl (pH 7,5) 45%.

Pro stanovení specií selenu byla použita vysokoúčinná kapalinová chromatografie s obrácenými fázemi ve spojení s prvkově selektivní detekcí ICP-MS. Porovnáním chromatogramů standardů s chromatogramy extraktů bylo zjištěno, že vzorky obsahují převážně selenocystin a selenomethionin. Linearita kalibrace byla ověřena pomocí čistých specií (Se-methylselenocystein a SeO_4^{2-}), které byly analyzovány stejným způsobem jako extrakty odtučněného řepkového šrotu. Testována byla také iontově výměnná chromatografie.

Sekce : Analytická chemie 3

Studium organoelektrolytů pro baterie typu Li/O₂ pomocí hmotnostní spektrometrie

Autor: Bc. Marek Bot
Ročník: M2
Ústav: Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v. v. i.
Školitel: Doc. Mgr. Jana Roithová, Ph. D.

Narůstající cena pohonných hmot nutí automobilový průmysl k hledání alternativ ke klasickým spalovacím motorům. Jednou z možností jsou elektromobily, které využívají k pohonu elektrickou energii z palivových článků či baterií. Širšímu uplatnění zatím brání nedostačující účinnost a malá kapacita stávajících typů baterií. Proto se v současné době dostalo zvýšeného zájmu článkům na bázi Li/O₂, jejichž nosnou ideou je nízká hmotnost Li, možnost získávání O₂ přímo ze vzduchu a vysoký elektrodový potenciál takového systému.

Na cestě k praktickým aplikacím těchto článků však zatím leží řada překážek. Jednou z nich je i volba vhodného elektrolytu. Mezi nadějně kandidáty patří systémy na bázi organických karbonátů (ethylen-, propylenkarbonát apod.). Cílem této práce je vytipování vhodné směsi karbonátů a Li solí pro případné použití pomocí ESI-MS (electrospray ionization mass spectrometry). Konkrétně se práce zaměřuje na schopnost elektrolytů tvořit iontové páry a vyšší klastry, které zásadním způsobem ovlivňují vodivost výsledných směsí, tedy jednu z klíčových charakteristik elektrolytů. V obecnějším měřítku práce poukazuje na další možnost aplikace poznatků získaných z experimentů v plynné fázi na řešení chemických problémů ve fázi kondenzované.

Sekce : Analytická chemie 3

Starkovské měření dipólového momentu CH₃F ve vzbuzeném vibračním stavu

Autor: Bc. Filip Grelich
Ročník: M1
Ústav: analytické chemie
Školitel: Ing. Jindřich Koubek, Ph.D.

Jednou z přesných metod pro určení permanentního elektrického dipólového momentu molekuly je měření mikrovlnných spekter molekuly v elektrickém poli. Energetické hladiny molekuly jsou vlivem elektrického pole rozštěpeny na několik podhladin. Změřením frekvenčních rozdílů pak lze určit dipólový moment, který v analytické chemii slouží k výpočtu molárního absorpčního koeficientu. Na základě znalosti molárního absorpčního koeficientu je možné měřit koncentraci analyzované látky na dálku (tzv. remote sensing). Tato měření jsou důležitá jak pro atmosférická měření naší planety, tak pro měření v atmosférách jiných planet nebo v meziplanetárním prostoru.

Sekce : Analytická chemie 3

Studium kůže pomocí infračervené spektrometrie

Autor: Adéla Jenišťová
Ročník: B3
Ústav: analytické chemie
Školitel: prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka

Lidská kůže je obecně definována jako málo propustná membrána mezi naším tělem a vnějším okolím. Slouží tedy jako ochranná bariéra proti chemickým, fyzickým či mikrobiologickým útokům a zároveň jako regulátor vnitřní homeostáze těla. Na druhou stranu se na kůži aplikují různé léčivé přípravky, u kterých je důležité jejich vstřebávání. Zároveň se používají léčiva sloužící k obnovení ochranných funkcí poškozené či nemocné kůže.

Během posledních desetiletí byla lidská kůže podrobována detailnímu výzkumu včetně využití neinvazivních technik vibrační spektroskopie. Ramanova i infračervená spektroskopie mohou být použity jak *in-vitro*, tak i *in-vivo*. Tato práce se zabývá možnostmi studia kůže *in-vivo* metodou „zeslabeného totálního odrazu“ (z anglického „attenuated total reflectance“ - ATR). Jedná se o odrazovou vzorkovací techniku používanou ve spojení s infračervenou spektroskopií, která nám umožňuje zkoumat kůži i na živých objektech.

Cílem této práce bylo studovat samotnou kůži a vliv mastňového základu a dvou ochranných mastí na její svrchní vrstvu. Práce sleduje vstřebávání mastí na čase a chemické změny, které jsou patrné z rozboru naměřených spekter. Experimenty byly prováděny na různých místech předloktí pravé i levé paže, aby bylo možné statistické zpracování dat.

Sekce : Analytická chemie 3

Speciační analýza selenu v rostlinných materiálech

Autor: Bc. Kamila Klognerová
Ročník: M1
Ústav: analytické chemie
Školitel: prof. Ing. Oto Mestek, CSc.

Selen je nezbytným prvkem pro lidské zdraví a patří mezi esenciální (základní) stopové prvky. V některých oblastech světa je obsah selenu ve stravě nedostačující a to je důvodem narůstajícího zájmu o výrobu potravin obohacených tímto prvkem. S tím souvisí rozvoj nových analytických metod pro identifikaci a kvantifikaci selenu a jeho sloučenin. V současné době probíhá výzkum fortifikace potravního řetězce selenem na České zemědělské univerzitě v Praze. Vysoká škola chemicko-technologická je také zapojena do tohoto výzkumu a jejím úkolem je vyvinout metodiku speciační analýzy selenu v rostlinách řepky olejky (*Brassica napus*) a provést analýzu tohoto rostlinného materiálu.

Cílem této práce bylo provést speciační analýzu selenu v kultivarech řepky olejky Sitro a NK Oktans pěstované v řepařské oblasti Červený Újezd. Důležitým krokem tohoto procesu je převedení sloučenin selenu do roztoku. Pro extrakci byla použita enzymatická hydrolýza. Separace a detekce specií selenu byla provedena pomocí on-line spojení RP-HPLC a ICP-MS. Mezi kontrolními rostlinami a rostlinami, které byly během vegetace ošetřeny postřikem roztokem seleničitanu, byl nalezen rozdíl jak v obsahu selenu, tak i v jeho speciaci.

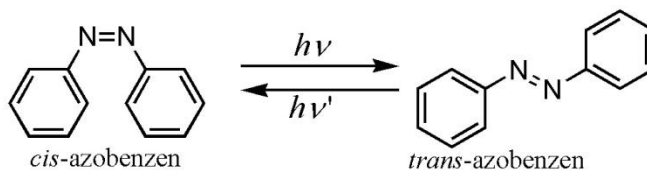
Sekce : Analytická chemie 3

Cis-trans fotoizomerizace azobenzenu po excitaci do stavu S1: Studie s využitím neadiabatické ab initio molekulové dynamiky a QM/MM

Autor: Bc. Marek Pederzoli
Ročník: M2
Ústav: analytické chemie
Školitel: Mgr. Tereza Uhlíková, Ph.D.

Izomerizace azobenzenu mezi formami *cis* a *trans* (Obr. 1) je jednou z nejstudovanějších reakcí v oblasti fotochemie. Tuto reakci je možné iniciovat použitím světla různé vlnové délky pro přechod z isomeru *cis* do *trans* a naopak, díky tomu azobenzen nalézá uplatnění v celé řadě zajímavých a užitečných aplikací. I přes intenzivní výzkum v posledních desetiletích není mechanismus této reakce zcela objasněn a vyžaduje použití speciálních technik.

V této práci využijeme metod neadiabatické *ab initio* molekulové dynamiky, což je relativně nový a moderní přístup pro popis časového vývoje molekulárních systémů, které není možné popsat pomocí metod kvantové chemie, které jsou limitovány oblastí platnosti Born-Oppenheimerovy aproximace. Simulace jsou prováděny v plynné fázi i v rozpouštědle, zahrnutém s využitím kombinace kvantové a klasické molekulové dynamiky známé jako QM/MM přístup.



Sekce : Analytická chemie 3

Příprava biologických vzorků pro LC-MS analýzu

Autor: Bc. Jana Zemenová
Ročník: M2
Ústav: analytické chemie
Školitel: Doc. RNDr. Dr. David Sýkora

Spojení kapalinové chromatografie (LC) s detekcí využívající hmotnostní spektrometrii (MS) může být velkým přínosem pro analýzu biologických vzorků. Vedle řady dalších aplikací je tato kombinace často využívána při sledování farmakokinetiky nově vyvíjených léčiv. Zásadní roli pro kvalitu a reprodukovatelnost uvedených analýz má ale kromě vlastní LC-MS koncovky předchozí příprava vzorků. Ta začíná již odebráním krve modelovým zvířatům a pokračuje přes veškerou manipulaci s biologickým materiálem až do okamžiku nástřiku vhodně upraveného vzorku do LC-MS systému. Předkládaná práce je zaměřena právě na tuto první část analytického procesu, na možnosti zpracování reálných vzorků a vývoj vhodné metody přípravy vzorků pro následná LC-MS farmakokinetická měření nově vyvíjených látek regulujících příjem potravy. Tyto látky mají specifickou strukturu, která je pravděpodobně klíčová pro jejich unikátní účinky, ale na druhou stranu je příčinou řady potíží pozorovaných při přípravě vzorků pro LC-MS. Manipulace se vzorky obsahujícími studované látky tak vyžaduje zásadní modifikace běžně používaných postupů, dobře osvědčených v případě jiných studovaných nízkomolekulárních potenciálních léčiv. Práce shrnuje dosavadní získané poznatky a předkládá návrhy, které by mohly vést k dalšímu zlepšení metodiky přípravy vzorků.

Sekce: **Teoretická fyzikální chemie (přednášková)**
místnost A402, 9.00 hod.

Komise:

Předseda: prof. RNDr. Jiří Kolafa, CSc.

Členové: prof. Ing. Anatol Malijevský, CSc.
Ing. Michal Bureš, CSc.

Soutěžící:

Bc. Beran Pavel
Bc. Hollas Daniel
Bc. Chmela Jiří
Bc. Klajmon Martin
Novotná Hana
Rubešová Martina
Svoboda Vít

Sponzoři sekce Teoretická fyzikální chemie

AMEDIS

www.amedis.cz

mega

www.mega.cz

tevak
LEYBOLD V ČR A SR

www.tevak.cz



www.nicoletcz.cz

Vitrum[®]
a VWR Company

www.vitrum.cz

Swagelok
Ventile & Fittings Praha

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

www.ventile.cz



www.tainstruments.cz



www.membrain.cz/



www.lao.cz

Sekce: Teoretická fyzikální chemie

Popis mechanismu aktivace vodíku frustrovanými Lewisovými páry pomocí analýzy doménově průměřovaných Fermiho děr

Autor: Bc. Pavel Beran
Ročník: M2
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: doc. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D

Frustrované Lewisovisy páry (FLP) umožňují, jako jedny z mála sloučenin neobsahující vzácné transiční kovy, heterolytické štěpení vodíku. Vzhledem k značnému průmyslovému využití této reakce, byla této reakci věnována značná pozornost ve snaze jednak syntetizovat efektivnější katalyzátory, jednak pochopit mechanismus reakce. Tento mechanismus však do doposud ještě uspokojivě popsán nebyl. Naše práce se snaží o revizi dříve navržených mechanismů pomocí analýzy tzv. doménově průměřovaných Fermiho děr, zobecněné populační analýzy a analýzy elektrostatického potenciálu. Z výsledků lze usoudit, že k reakci dochází především díky aktivaci vazby H-H současným přenosem elektronů z vazebného orbitalu σ_{HH} k Lewisově kyselině a donací elektronů z volného páru Lewisovské báze do antivazebného σ^*_{HH} . V důsledku lze elektronovou strukturu v transičním stavu nejlépe popsat pomocí vícecentrických vazebných interakcí.

Sekce: Teoretická fyzikální chemie

Výpočet tepelných kapacit kapalin pomocí dráhových integrálů a 2PT metody

Autor: Bc. Daniel Hollas
Ročník: M2
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: doc. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.

Ačkoli výpočet tepelných kapacit plynů se stal s prudkým rozvojem *ab initio* metod v jistém smyslu rutinní záležitostí, u výpočtu tepelných kapacit kapalin je situace opačná. To je dáno mimo jiné tím, že nemůžeme zanedbat kvantové efekty jader, které se u jiných veličin tolik neprojevují. Cílem této práce je představit a porovnat dva diametrálně odlišné přístupy k výpočtu tepelných kapacit kapalin. Dynamika s dráhovými integrály představuje obecnou exaktní metodu k výpočtu statických termodynamických vlastností se zahrnutím kvantových efektů jader. Metoda 2PT (Two Phase Thermodynamics) je založena na sofistikované analýze rychlostní autokorelační funkce získané z klasické MD simulace. Tyto metody byly testovány na kapalně vodě a na homologické řadě lineárních alkoholů.

Sekce: Teoretická fyzikální chemie

Modelování spektroskopických vlastností hydratovaného elektronu

Autor: Bc. Jiří Chmela
Ročník: M2
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: doc. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.

Hydratovaný elektron je spolu s hydroxylovým radikálem a atomárním vodíkem jedním z hlavních produktů fotolýzy vody. Hydratovaný elektron a jeho prekurzory hrají důležitou roli v mechanismu poškození DNA. Kromě chemie buňky se s hydratovaným elektronem setkáváme i v chemii atmosféry. Zvláště palčivou otázkou je struktura hydratovaného elektronu. V nedávné době byly experimentálně pozorovány přinejmenším dva jeho izomery. Z těchto důvodů je hydratovaný elektron studován jak experimentálně (ať už v objemové fázi či v molekulárních klastrech) tak i teoreticky.

Z teoretického hlediska je hydratovaný elektron zajímavý především jako nejmenší představitelný anion. Ve své práci se snažím modelovat oba pozorované izomery. Hydratovaný elektron studuji s použitím metod kvantové chemie a molekulární dynamiky. Dříve prezentované výsledky, kdy byly studovány tři možné modely hydratovaného elektronu, byly uceleny. Použil jsem i nové přístupy – grafické procesory mi umožňují studovat větší klastry, chování elektronu v objemové fázi chci lépe simulovat uložením klastru do pseudopotenciálové sítě. Měřítkem věrohodnosti daného modelu a postupu je srovnání vypočtených spektrálních vlastností s experimentálními daty.

Sekce: Teoretická fyzikální chemie

Predikce rozpustnosti pevné látky v kapalném rozpouštědle pomocí Scatchardova-Hildebrandova modelu regulárního roztoku

Autor: Bc. Martin Klajmon
Ročník: M2
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Ing. Pavel Morávek, Ph.D.

Scatchardův-Hildebrandův model regulárního roztoku je jedním z nejjednodušších a zároveň nejpoužívanějších modelů pro popis aktivitních koeficientů. Nejinak tomu je i v případě aplikace při výpočetním stanovení rovnováhy kapalina-pevná látka. V této práci je testována vhodnost použití Scatchardova-Hildebrandova modelu pro odhad rozpustnosti farmaceuticky zajímavých pevných látek v organických rozpouštědlech. Ukázalo se, že použitím tohoto modelu v jeho původní podobě lze u systémů tvořených nepolárními látkami dosáhnout dobré shody s experimentálními daty. Jsou-li ovšem komponenty zkoumané směsi polárního charakteru, je nezbytné pro kvalitní popis uvažovat i binární interakční parametr I_{12} , jehož hodnoty pro vybrané systémy byly také výpočetně stanoveny z dostupných experimentálních dat. Dále byla potom vyzkoušena i modifikace Scatchardova-Hildebrandova modelu pro polární látky, která uvažuje rozpustnostní parametr čistých látek jako součet polárního a nepolárního příspěvku.

Sekce: Teoretická fyzikální chemie

Molekulární základy fotostability: absorpční spektrum kyseliny aminobenzoové

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

Jako fotostabilní se označují molekuly, které po absorpci fotonu rychle deexcitují nezářivým způsobem aniž by přitom došlo k rozkladu fotoaktivní molekuly. Na bázi fotostabilních molekul jsou založeny také molekuly chránící pokožku před UV zářením.

Ve své práci se zaměřuji na teoretické studium fotostability molekuly kyseliny aminobenzoové, která patří k prvním fotostabilním molekulám využívaným v kosmetickém průmyslu. Jako první krok jsem začala studovat absorpční spektrum této molekuly v plynné fázi i ve vodném roztoku. Výpočty byly založeny na reflexním principu v kombinaci s kvantově-chemickými metodami na bázi teorie funkcionálu hustoty. Výsledky jsou porovnány s experimentem.

Teoretické výpočty mohou v budoucnu sloužit jako základ designu nových fotostabilních molekul s potenciálním využitím v kosmetickém průmyslu.

Sekce: Teoretická fyzikální chemie

Kvantově-chemické studium DOTA komplexů

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

V předkládané práci se zaměřím na komplexy lanthanu, europia a ytterbia s D03Aae (DOTA), které slouží jako kontrastní látky pro zobrazování magnetickou rezonancí (MRI). Z tohoto důvodu je věnována značná pozornost přípravě a designu těchto molekul s co možná nejlepšími vlastnostmi pro MRI (kontrast). Toto hledání může být výrazně urychleno metodami teoretické chemie. Teoretické studium DOTA komplexů vzácných zemin je nicméně komplikováno poměrně značným rozměrem těchto molekul a především přítomností iontů velmi těžkých atomů, které vyžadují relativistický popis elektronové struktury. V rámci této SVOČ budu prezentovat testování různých přístupů pro výpočet struktury a energetiky molekul s lanthanoidovými ionty. Vyvinutý přístup byl použit ke studiu izomerie DOTA-like komplexů.

Sekce: Teoretická fyzikální chemie

Overnotová spektroskopie v supersonických expanzích

Autor: Vít Svoboda
Ročník: B3
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: doc. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.; Mgr. Ondřej Votava, Ph.D.

Vibrační spektroskopie v plynné fázi je vhodnou experimentální technikou umožňující studium vibračně-rotačních stavů molekul. Pomocí této techniky je například možné studovat zemskou atmosféru, ale i atmosféry planet Sluneční soustavy. Cílem práce je studium overtonových vibrací N-H vazeb atmosféricky relevantních molekul v blízké infračervené oblasti pomocí vysoce rozlišené absorpční spektroskopie, konkrétně amoniaku v oblasti $6600\text{--}7000\text{ cm}^{-1}$. Vibrační spektra molekul za pokojových teplot dosahují značné složitosti díky populaci vyšších rotačních stavů. Při použití expanze plynu skrz supersonickou trysku do vakua dochází k rapidnímu zchlazení molekul, což vede k zjednodušení měřených spekter. V práci jsou proměřeny vybrané rovibrační spektrální linie amoniaku a stanoveny podmínky v expanzi, translační teplota z Dopplerovského rozšíření spektrálních čar a rotační teplota z Boltzmannovské analýzy intenzit. Dále plánujeme přiřazení rotačních kvantových čísel jednotlivým vibračně-rotačním přechodům. Součástí práce je kromě spektroskopických měření i vývoj a charakterizace používaných laserů, konkrétně v této práci jsou použity SAF (Single-Angled-Facet) laserové čipy umožňující přeladění přes širokou spektrální oblast 450 cm^{-1} .

Sekce: **Aplikovaná fyzikální chemie I. (přednášková)**
místnost A125, 9.00 hod.

Komise:

Předseda: Prof. RNDR. Petr Voňka, CSc.

Členové: doc. Ing. Lidmila Bartovská, CSc.
Ing. Aleš Blahut

Soutěžící: Bubeníček Petr
Bc. Mahnel Tomáš
Bc. Rudenko Nadiia
Bc. Štejfa Vojtěch
Bc. Vataščin Erika
Bc. Velas Jiří

Sponzoři sekce Aplikovaná Fyzikální chemie I.

The logo for AMEDIS, featuring the word "AMEDIS" in a blue, stylized, outlined font.

www.amedis.cz

The logo for mega, featuring the word "mega" in a bold, black, lowercase font. The letter "e" is replaced by a colorful, multi-segmented circle.

www.mega.cz

The logo for tevak, featuring the word "tevak" in a stylized, italicized font. The letters "te" are blue and "vak" are red. Below the word, the text "LEYBOLD V CR A SR" is written in a smaller, black, uppercase font.

www.tevak.cz



www.nicoletcz.cz

The logo for Vitrum, featuring the word "Vitrum" in a bold, black, italicized font, followed by a registered trademark symbol (®). To the right of the word is a blue, stylized, curved shape. Below the word, the text "a VWR Company" is written in a smaller, black, lowercase font.

www.vitrum.cz

Swagelok
Ventile & Fittings Praha

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

www.ventile.cz



www.tainstruments.cz



www.membrain.cz/



www.lao.cz

Sekce: Aplikovaná fyzikální chemie I.

Studium sorpce plynů v nanočásticích z organického odpadu

Autor: Petr Bubeníček
Ročník: B3
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Ing. Karel Friess, Ph.D.

Hlavní náplní předkládané práce bylo studium sorpce oxidu uhličitého a metanu v širokém intervalu tlaků v nanočásticích připravených z komunálního organického odpadu (banánové slupky). Částice různých velikostí (<45, 125-250 a >250 nanometrů) byly připraveny na partnerském pracovišti National Chung Hsing University na Taiwanu.

Sorpční experimenty byly prováděny za teploty 25°C gravimetricky pomocí McBainových spirálních vážek v tlakové aparatuře umožňující měření od 0,1 do 1,5MPa. Byla sledována možná závislost absolutního množství nasorbovaného plynu na velikosti částic a z naměřených hodnot byly následně vypočteny sorpční koeficienty pro příslušný systém částice/plyn. Budoucí využití výzkumu je směřováno do oblasti separace plynů, zejména do úpravy bioplynu, kde by polymerní membrány obsahující zabudované nanočástice, díky volným NH_2 skupinám na svém povrchu, mohly sloužit pro efektivní separaci oxidu uhličitého od metanu.

Sekce: Aplikovaná fyzikální chemie I.

Termodynamická a chromatografická studie vybraných polycyklických aromatických uhlovodíků

Autor: Bc. Tomáš Mahnel
Ročník: M1
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: doc. Ing. Květoslav Růžička, CSc.; doc. Ing. Michal Fulem, Ph.D.

V předložené práci byla testována aplikovatelnost nepřímé chromatografické metody stanovení tlaku nasycených par pro skupinu polycyklických aromatických uhlovodíků. K ověření správnosti z ní plynoucích výsledků jsou nutná spolehlivá data získaná přímými metodami, která však vzhledem k nízké těkavosti studovaných látek mohou být zatížena systematickými chybami. Pro ověření termodynamické konzistentnosti a rozšíření teplotního rozsahu dostupných literárních hodnot tlaku nasycených par byla provedena jejich simultánní korelace s termálními údaji (sublimačními entalpiemi a rozdílem tepelných kapacit ideálního plynu a kondenzované fáze). Pro stanovení tepelných kapacit ideálního plynu byly použity frekvence vibračních pohybů vazeb v molekulách, vypočítané v programu Gaussian a dále zpracované metodami statistické termodynamiky.

Sekce: Aplikovaná fyzikální chemie I.

Chování polymerní membrány v kapalně směsi benzen-propan-1-ol

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

V průmyslu je často třeba rozdělit kapalně směsi. Alternativou ke klasické destilaci je membránová separační technologie. Daná práce je zaměřená na studium sorpce v systémech polydimethylsiloxan+ směs benzen-propan-1-ol v širokém koncentračním rozsahu. Byla měřena preferenční a totální sorpce a z experimentálních dat byl vyhodnocen průběh individuálních izoterem. Byl také naměřen objem nabobtnalého polymeru v příslušné kapalně směsi. Závěrem práce byla porovnána účinnost dělení uvažované binární kapalně směsi za přítomnosti membrány s daty pro rovnováhu kapalina-pára.

Sekce: Aplikovaná fyzikální chemie I.

Experimental and Computational Study of Monoterpenes

Autor: Bc. Vojtěch Štejfa
Ročník: M2
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: doc. Ing. Michal Fulem, Ph.D.

This work presents a thermodynamic study of five monoterpenes: (–)-*trans*-pinane, (–)-borneol, (–)-camphor, (+)-fenchone and (±)-camphene. They possess similar structures and logically expand the group of measured BVOC compounds.

Static apparatus and mDSC calorimeter were used to determine vapour pressures and heat capacities of condensed phases. Ideal gas heat capacities were theoretically calculated to obtain the difference in heat capacity, which is closely related to vapour pressures.

Uncertainty of vapour pressure measurements usually exceeds that required for the recommended data. Simultaneous correlation of vapour pressures along with heat capacity differences is the only way to make the results more accurate.

A new program performing the simultaneous correlation was developed. It discloses systematic errors in all the data, enables a correct calculation of thermodynamic quantities, and allows obtaining data with lower uncertainty than by single property measurements and correlation.

Sekce: Aplikovaná fyzikální chemie I.

Rovnováha kapalina - pára v systémech voda + iontová kapalina

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

Práce se zabývá experimentálním studiem termodynamického chování tří systémů voda + iontová kapalina: voda + 1-ethyl-3-methylimidazolium trifluoromethansulfonát [EMIM][OTF], voda + 1-ethyl-3-methylimidazolium dikyanamid [EMIM][DCA] a voda + 1-ethyl-3-methylimidazolium thiokyanát [EMIM][SCN].

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 minimálně devíti vzorcích pokrývajících molární složení od $x_{\text{IL}}=0,05$ do minimálně $x_{\text{IL}}=0,8$ při sedmi teplotách v rozsahu od 288,15 K do 318,15 K. Následně byla provedena korelace teplotní a koncentrační závislosti získaných dat a byly vyhodnoceny dodatkové veličiny zkoumaných systémů. Získané výsledky byly porovnány s literárními daty a termodynamické chování studovaných systémů bylo diskutováno v souvislosti s molekulární strukturou iontových kapalin a molekulárními interakcemi.

Sekce: Aplikovaná fyzikální chemie I.

Experimentální stanovení a predikce rozpustností pevných látek v čistých a směsných rozpouštědlech

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

Velkou výzvou problematiky fázových rovnováh v oblasti farmaceutického aplikovaného výzkumu je studium systémů obsahujících pevné, strukturně složité, léčivé aktivní látky. Tato práce se zaměřuje na studium rovnováhy mezi pevnými a kapalnými organickými fázemi v binárních a ternárních systémech.

Hlavním cílem práce bylo vytvoření efektivního experimentálního postupu při určování rovnovážných složení, který je založen na stanovení koncentrace nasyceného roztoku gravimetrickou odpařovací metodou nebo plynovou chromatografií. Navazujícím cílem práce byla pak predikce rovnovážných složení, která využívá odhadový korelačně-empirický model NRTL-SAC. V práci jsou rovněž konfrontována získaná predikovaná rozpustnostní data s experimentálními údaji a je diskutována aplikovatelnost použitých postupů v problematice kvalifikovaného výběru rozpouštědel pro farmaceutické účely.

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

Komise:

Předseda: doc. Ing. Lubomír Hnědkovský, CSc.

Členové: Ing. Štěpán Hovorka, Ph.D.

Dr. Ing. Pavel Vrbka

Soutěžící:

Bc. Cerhová Marie

Bc. Lanč Marek

Partsch Tomáš

Radoň Václav

Serra Paulo

Bc. Vlk Ondřej

Sponzoři sekce Aplikovaná fyzikální chemie II.

AMEDIS

www.amedis.cz

mega

www.mega.cz

tevak
LEYBOLD V ČR A SR

www.tevak.cz



www.nicoletcz.cz

Vitrum[®]
a VWR Company

www.vitrum.cz

Swagelok
Ventile & Fittings Praha

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

www.ventile.cz



www.tainstruments.cz



www.membrain.cz/



www.lao.cz

Sekce: Aplikovaná fyzikální chemie II.

Stanovení teplotní závislosti limitních aktivitních koeficientů 1-nonanolu a 1-dekanolu ve vodě z rozpustnostních dat

Autor: Bc. Marie Cerhová
Ročník: M1
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Ing. Dana Fenclová, CSc.

V této práci je testována možnost využít rozpustnostních dat k výpočtu údajů o rovnováze kapalina-pára, konkrétně limitních aktivitních koeficientů vyšších alkoholů ve vodě. Testy byly prováděny v teplotním intervalu 293-373 K na systémech 1-heptanol + voda a 1-oktanol + voda, pro které jsou v literatuře experimentální data o jejich vzájemných rozpustnostech a pro které byly v rámci bakalářské práce experimentálně stanoveny teplotní závislosti limitních aktivitních koeficientů těchto alkoholů ve vodě. Bylo testováno několik rovnic - van Laarova, NRTL a UNIQUAC. Nejúspěšnější z nich byla využita k doplnění údajů o limitních aktivitních koeficientech 1-nonanolu a 1-dekanolu ve vodě v teplotním intervalu 293-373 K. Pro oba tyto systémy existují vzájemná rozpustnostní data, ale experimentální stanovení jejich limitních aktivitních koeficientů ve vodě by bylo velmi obtížné.

Sekce: Aplikovaná fyzikální chemie II.

Studium stárnutí polymerů s vnitřní mikroporozitou pomocí sorpce oxidu uhličitého

Autor: Bc. Marek Lanč
Ročník: M1
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Ing. Karel Friess, Ph.D.

Cílem předkládané práce bylo studium stárnutí polymerních membrán pomocí opakovaných sorpčních měření v dlouhodobém časovém horizontu (1 rok). Sorpční experimenty s CO_2 byly prováděny při 25°C gravimetricky s použitím McBainových křemenných spirálních vážek ve vysokotlaké sorpční cele při tlacích 1 až 7 bar. V práci byl použit polymer s vnitřní mikroporozitou PIM-1 (Obr. 1), připravený z 5,5',6,6'-tetrahydroxy-3,3,3',3'-tetramethyl-1,1'-spirobisindanu a tetrafluorotereftalonitrilu, který je znám díky svým unikátním vlastnostem kombinujícím chování porézního a neporézního materiálu. Měřené vzorky membrán byly připraveny odpařením rozpouštědla z roztoku polymeru a poté byly sušeny při zvolených teplotách (25, 75 a 125°C). Z experimentálních dat získaných v různých dnech byly stanoveny sorpční isotermy a v měřeném rozmezí tlaků byly proloženy modelem duální sorpce. Z naměřených údajů byly rovněž vypočteny příslušné sorpční a difúzní koeficienty a jejich hodnoty z celého časového intervalu diskutovány v závislosti na podmínkách přípravy vzorků (teplota sušení). Získané poznatky o změnách vlastností polymerního materiálu v dlouhodobém časovém horizontu budou využity pro další práci v oblasti materiálového výzkumu.

Sekce: Aplikovaná fyzikální chemie II.

Studium sorpce vody v hydrogelech z kapalně a plynné fáze

Autor: Tomáš Partsch
Ročník: B3
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Ing. Karel Friess, Ph.D.

Cílem této práce bylo studium sorpce vody (v kapalně i plynné fázi) v hydrogelových membránách potenciálně využitelných pro separaci methanu od oxidu uhličitého a i od ostatních nechtěných složek ze směsí plynů a par tvořících bioplyn. Hydrogely jsou vhodným kandidátem pro úspěšné odstraňování CO_2 od CH_4 , neboť přítomnosti vody v hydrofilní polymerní matici výrazně zvyšuje rozpustnost respektive sorpci CO_2 a tím i selektivně mění poměr hydrofóbního CH_4 vůči hydrofilnímu CO_2 v plynné směsi. V práci byly použity membrány připravené na Ústavu makromolekulární chemie AV v Praze a to konkrétně hydrogely s 30, 67 a 100 hm% HEMA (2-hydroxyethyl methakrylát) síťované pomocí 0,5 hm.% EDMA (ethyldimethakrylát). Rovněž byl studován i vliv zabudovaných SiO_2 částic s různou povrchovou úpravou. Experimenty byly prováděny gravimetrickou metodou s použitím Mc Bainových spirálních vážek nebo analytických vah při teplotách 25, 40 a 60°C.

Sekce: Aplikovaná fyzikální chemie II.

Měření rozpustnosti málo rozpustných iontových kapalin ve vodě

Autor: Václav Radoň
Ročník: B3
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: doc. Ing. Karel Řehák, CSc.

Cílem práce bylo vytvořit a otestovat metodu umožňující měření rozpustnosti iontových kapalin, které nelze proměřit standardními postupy. U vybrané skupiny iontových kapalin nelze měření provést pomocí plynové chromatografie kvůli vysokému bodu varu, ani pomocí odpařovací metody, protože rozpustnost těchto kapalin ve vodě je příliš nízká, což vede k zatížení měření markantní experimentální chybou. Elegantním řešením je konduktometrické stanovení, které umožňuje určit rozpustnost na základě závislosti vodivosti na hmotnostním zlomku iontové kapaliny. Základní problém stanovení spočívá ve velmi pomalém rozpouštění látky, které může probíhat i několik dní, a tedy v detekci zda systém dosáhl termodynamické rovnováhy. Rovnovážný stav byl indikován měřením závislosti elektrické vodivosti syčeného roztoku na čase.

Tato metoda byla použita k naměření rozpustnosti tributylmethylamonium bis(trifluoromethylsulfonyl)imidu ve vodě. Měření bylo provedeno v teplotním rozsahu od 288,15 do 328,15 K.

Sekce: Aplikovaná fyzikální chemie II.

Determination of vapor pressure of selected terpenes by gas-liquid chromatography

Autor: Paulo Serra
Ročník: M2
Ústav: fyzikální chemie (Erasmus student from University of Porto)
Školitel: doc. Ing. Květoslav Růžička, CSc., doc. Ing. Michal Fulem, Ph.D.

Indirect gas chromatography method has certain advantages in comparison with direct methods (e.g. it is instrumentally simple, requires very small quantities of the test substances in not too high degrees of purity). On the other hand, many assumptions are employed and uncertainty of obtained results might be significant. Feasibility of indirect gas chromatography method for vapor pressure determination was tested on group of terpenes, for which data were obtained previously in our laboratory or are available in the literature. Methodology for extension of temperature range of directly obtained vapor pressures by means of chromatographic values was developed and tested.

Sekce: Aplikovaná fyzikální chemie II.

Vývoj metodiky stanovení tepelných kapacit metodou MDSC a měření tepelných kapacit vybraných alkoholů

Autor: Bc. Ondřej Vlk
Ročník: M2
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: doc. Ing. Michal Fulem, Ph.D.

Kalorimetr TA Q1000 umožňuje měření metodou teplotně modulované diferenční skenovací kalorimetrie (MDSC). Principem MDSC je periodické ohřívání a ochlazování vzorku, které vede k separaci vratných a nevratných tepelných dějů. Problémem této metody jsou především nedostatečné literární údaje týkající se správné volby parametrů měření a přípravy vzorků. Tato práce se zejména zaměřila na studium vlivu jednotlivých parametrů experimentu na chybu měření tepelných kapacit a zároveň na minimalizaci této chyby.

Získané poznatky byly využity při měření tepelných kapacit vybraných alifatických heptanolů. U některých zástupců této skupiny látek byla pozorována neobvyklá závislost tepelné kapacity na teplotě (včetně maxim) a cílem práce je prostudovat souvislost mezi strukturou alkoholů a výskytem zmíněných anomálií.

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

Komise:

Předseda: doc. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Členové: Ing. Otto Hadač, Ph.D.

Ing. Lubor Buřič, PhD (Ricardo)

Ing. Lucie Dolejší (Chemoprojekt)

Ing. Alexandr Zubov

Ing. Richard Pokorný

Soutěžící:

Březina Jan

Bc. Ferkl Pavel

Bc. Helebrantová Lucie

Bc. Leskovjan Martin

Bc. Seifert Michal

Skala Martin

Bc. Šafránek Jaroslav

Sponzoři sekce Matematické modelování v chemickém inženýrství

Mondi Štětí a.s.
Momentive Specialty Chemicals, a.s.
Interpharma Praha, a.s.
Glass Service, a.s.
Chemoprojekt, a.s.
Lovochemie, a.s.
Ricardo Prague sro.
Lonza Biotec s.r.o.



Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Stanovení NO a NO₂ při emisních testech osobních automobilů na vozidlovém dynamometru

Autor: Jan Březina
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Cílem této práce je ověření stanovitelnosti škodlivých emisí NO a NO₂ při použití současné metodiky a instrumentace emisních testů osobních automobilů. Teoreticky získané výpočty jsou porovnány s experimentálními daty, získanými v Emisní laboratoři ŠKODA AUTO a.s. První část práce je zaměřená na sestavení jednoduchého modelu pro teoretický výpočet rychlosti homogenní oxidace NO na základě kinetických dat z odborné literatury. Posouzení vlivu této reakce na stanovení NO₂ při emisních testech a určení problematických míst měřicího systému z hlediska stanovení koncentrace NO₂. Druhá část práce se zabývá ověřením získaných výsledků z první teoretické části pomocí syntetické směsi NO+O₂/vzduch a reálného výfukového plynu.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Modelování pro optimalizaci morfologie tepelně-izolačních materiálů nové generace

Autor: Pavel Ferkl
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Richard Pokorný, Doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Zbytečným nákladům na vytápění budov lze předejít použitím vhodných tepelně-izolačních materiálů. Tyto bývají nejčastěji vyrobené z polymerních pěn, obvykle na bázi polystyrenu nebo polyuretanu. Optimalizace izolačních vlastností polymerních pěn je ekonomicky výhodná jak pro výrobce izolačních materiálů – pro produkci shodně izolující pěny je potřebné menší množství materiálu, tak pro konečné zákazníky – nižší pořizovací cena izolačních materiálů, případně vyšší úspory tepla při stejné pořizovací ceně. Ukazuje se, že výrazným milníkem v této oblasti může být výroba tzv. nanopěn, jejichž vnitřní struktura je tvořena buňkami o velikosti do 1 μm. Takové pěny výrazně potlačují oba základní způsoby přenosu tepla, které se v polymerních pěnách uplatňují, tedy tepelné vedení (kondukcí) i sálání (radiací). S ohledem na tyto jevy je nutné v pění optimalizovat velikost buněk, jejich tvar, porozitu, distribuci pevné fáze, volbu materiálů atd. Za tímto účelem jsou v této práci vyvíjeny a aplikovány nové modely popisující kombinované sdílení tepla vedením a sáláním v prostorově 3D heterofázových systémech.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství.

Tvorba a využití simulačních modelů separačních jednotek v rafinérských provozech

Autor: Lucie Helebrantová
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. RNDr. Tomáš Vaněk, CSc.

V současné době roste v celém Iráku poptávka po ropných produktech, zejména po benzínech a motorové naftě. S ohledem na tuto skutečnost rafinérie Salahuddin I&II v Baiji reflektují navýšením kapacity zpracovávané ropy na 130% designované kapacity, a to tak, aby se minimalizovaly investiční náklady na potřebnou rekonstrukci. Než se k této rekonstrukci přistoupí, je třeba vypracovat studii, která bude jasně vytyčovat možnosti navýšení kapacity a v neposlední řadě zhodnocení těchto možností, a to jak z technické, tak i ekonomické stránky. Tato práce se zabývá především tvorbou simulačního modelu v programu Aspen HYSYS, a to konkrétně jednoho z důležitých provozních souborů – jednotky atmosférické destilace a redestilace. Tento model bude v budoucnu využit k provedení potřebných analýz pro navýšení kapacity rafinérií a identifikaci případných „úzkých profilů“. Práce je zpracována ve spolupráci s firmou TECHNOEXPORT, a.s.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

3D modelování katalytických reaktorů pro konverzi automobilových výfukových plynů

Autor: Martin Leskovjan
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Petr Kočí, Ph.D.

V moderních automobilech jsou z důvodu lepšího průběhu teplot katalyzátory umísťovány blíže k motoru, avšak kvůli nedostatku místa a poměrně ostrým ohybům na výfukovém potrubí dochází často k nerovnoměrné distribuci plynů na vstupu do monolitu. V těchto případech nepopisuje 1D model reálný systém s dostatečnou přesností a je potřeba využít komplexnějšího přístupu. Práce se zabývá vlivem geometrie potrubí před monolitickým katalyzátorem na jeho funkci. Jako modelový případ je studován katalyzátor s periodickou adsorpcí a redukcí NO_x (NSRC). Simulace jsou prováděny v prostředí 3D-CFD softwaru, který je přes rozhraní propojen s 1D modelem kanálku naprogramovaným ve Fortranu a zkompilem do podoby knihovny. V rámci této práce byl sledován dynamický vývoj rychlostních, teplotních a koncentračních profilů během periodického přepínání mezi chudou a bohatou směsí (fáze adsorpce a fáze redukce NO_x). Ukazuje se, že potrubí s ohybem 90° před vstupem do katalyzátoru vede ke značně nerovnoměrnému rozdělení toku a mezi jednotlivými kanálky monolitu mohou být velké rozdíly. To může komplikovat i řízení regenerace katalyzátoru.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Studium adheze bubliny za stacionárních podmínek

Autor: Michal Seifert
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Pavlína Basařová

Adheze bubliny na povrch pevné částice je děj, ke kterému dochází běžně v přírodě i v mnoha průmyslových aplikacích. Příkladem mohou být vícefázové reaktory, probublávané kolony nebo separátory pracující na principu flotace. Při adhezi bubliny nejprve dochází k přetržení tenkého kapalného filmu mezi bublinou a částicí, poté se vytváří třífázové rozhraní (TPC). Mezi klíčové parametry popisující tvar bubliny přisedající na povrch pevné částice patří průměr TPC, rychlost posunu TPC a smáčecí úhel bubliny. Vzhledem k značné dynamice děje se pro sledování adheze bubliny používají vysokorychlostní kamery. Cílem této práce je vytvoření metodiky pro studium adheze stacionární bubliny na horizontální povrch pevné částice. Experimentální zařízení je uspořádáno tak, aby byl eliminován vliv kinetické energie bubliny při jejím volném pohybu kapalinou. Pro popis adheze bubliny byl vytvořen nový software v prostředí MATLAB, který z nasnímaných obrazových dat měří průměr třífázového rozhraní a kontaktní úhly. Výsledky práce by měly přispět k lepšímu popisu vícefázových toků a interakcí bublin a částic.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Optimalizace výkonu chladicího bubnu

Autor: Martin Skala
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha

Práce je řešením dílčího problému při sestavování celkového modelu procesu: průchod materiálu chladicím bubnem. Jedná se o vytvoření modelu pohybu sypkého materiálu v chladicím bubnu (bubnové sušárně) se zvedací vestavbou ve směru kolmém na postup materiálu bubnem. Model umožňuje vyšetření vlivů geometrie, rozměru a počtu kapes na výkon bubnu. Dále model pracuje i s celkovou zádrží, což dovoluje určit nejen optimální návrh z pohledu požadovaného maximálního zatížení ale i posouzení změny chladicího výkonu při zatížení nižším.

Sekce: Matematické modelování v chemickém inženýrství

Návrh adsorpčního zařízení pro odstraňování nečistot z procesní vody

Autor: Jaroslav Šafránek
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. František Jonáš Rejl, Ph.D.

Náplní této práce je sestavit model adsorpční kolony, která bude sloužit k odstraňování stopových nečistot z procesní vody vznikajících v technologii sloužící k měření transportních charakteristik výplní adsorpčních a desorpčních kolon. Pro model kolony je důležité stanovení adsorpční izotermy, která vyjadřuje rovnováhu mezi adsorbovaným a volným adsorbátem. Pro účely našeho modelu je použita Freundlichova adsorpční izoterma. Dále je nutné znát transportní charakteristiky, které byly v této práci podobně jako konstanty Freundlichovy izotermy odhadnuty na základě literárních dat. Cílem práce je návrh vhodných parametrů kolony (výška a průměr lože). Jako adsorbent je použito zrněné aktivní uhlí Silcarbon K835. Tento návrh bude proveden na základě výsledků simulací jejího chování při adsorpci polutantu a regeneraci adsorbentu horkou vodou.

Sekce:	Procesní a chemické inženýrství 1. posluchárna B139, 9.00 hod
Komise:	
Předseda:	doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha
Členové:	Ing. Zdeněk Grof, PhD. Dr. Ing. Juraj Kilian (Mondi) Ing. František Plát, Ph.D. (Škoda Auto) Ing. Pavel Kovačík Ing. Jaroslav Kotowski
Soutěžící:	Gorný Damian Bc. Jakubec Martin Bc. Jankuj Petr Bc. Kohoutová Štěpánka Navrátil Vít Novák Matěj Šnajdr Ivo Bc. Vrána Jiří

Sponzoři sekce Procesní a chemické inženýrství 1

Mondi Štětí a.s.
Momentive Specialty Chemicals, a.s.
Interpharma Praha, a.s.
Glass Service, a.s.
Chemoprojekt, a.s.
Lovochemie, a.s.
Ricardo Prague sro.
Lonza Biotec s.r.o.



Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Použití tiskové hlavy jako nástroje pro produkci mikročástic a jejich aplikace

Autor: Damian Gorný
Ročník: B2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Cíl práce spočívá v přípravě alginátových mikročástic pomocí technologie ink-jet, tedy za použití tiskové hlavy schopné s vysokou frekvencí generovat mikroskopické kapičky konzistentní velikosti. Alginát je želírující látka, která se používá především v potravinářském průmyslu, avšak v našem případě slouží jako matice pro imobilizaci vnitřních komponent tzv. chemických robotů. Pro přípravu mikročástic byly použity tiskové hlavy o průměru kapiláry 80 a 30 μm . Bylo zjištěno, že nejvýraznější vliv na velikost připravovaných částic mají tlak v zásobníku tištěné tekutiny a napětí přivedené na piezoelektrický element v tiskové hlavě. Další důležitý parametr je viskozita tištěné kapaliny. V našem případě musí být vzorky pro větší hlavu do viskozity 75 mPa.s a 20 mPa.s pro menší. Pro tiskovou hlavu s průměrem 30 μm je alginát upravován pomocí TiO_2 fotokatalyzátoru pod UV lampou z důvodu snížení viskozity vzorku tím, že zkrátíme délku polymerního řetězce. Připravené částice mohou obsahovat též imobilizované kvasinky, lipozomy a nanočástice železa a SiO_2 , které jsou uzavřeny v alginátu vápenatém a poskytují mu dodatečné funkční vlastnosti využitelné např. v cíleném uvolňování léčiv či dekontaminaci těžko dostupných prostředí.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Příprava mikročástic s hydrofobním jádrem pomocí rozprašovacího sušení s třífázovou tryskou

Autor: Martin Jakubec
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Celá řada potravinářsky či farmaceuticky významných látek (např. aroma, enzymy, léčiva či vitaminy) má hydrofobní charakter a je s vodou téměř nebo zcela nemísitelná. Často je však žádoucí tyto látky dopravit na místo jejich určení skrze vodné prostředí. Cílem této práce je výše zmíněný typ látek enkapsulovat do hydrofilních polymerních nosičů, které by byly schopny je cíleně dopravit a vyloučit na určené místo. Za tímto účelem byly pomocí rozprašovacího sušení a inovativní třífázové trysky připraveny mikročástice s hydrofobním jádrem (emulze typu o/w obsahující enkapsulovanou látku) a hydrofilní polymerní slupkou (přírodní polymer chitosan), a byl studován vliv parametrů přípravy částic na jejich vlastnosti (velikost, struktura, složení). Struktura částic byla studována pomocí 3D fluorescenční konfokální mikroskopie, rozložení velikosti částic pomocí laserové granulometrie a složení částic pomocí FT-IR spektroskopie. Kinetika vylučování enkapsulované látky z nosičů byla studována pomocí uv-vis spektroskopie jako příprava pro budoucí *in vivo* aplikace.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Biodegradace textilních barviv s využitím imobilizované houby *Irpex lacteus* v probublávaném bioreaktoru

Autor: Petr Jankuj
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Prof. Ing. Pavel Hasal, CSc.

Textilní průmysl v současné době produkuje velké množství odpadních vod, vznikajících především při procesu barvení tkanin. Tyto odpadní vody obsahují kromě velkého množství anorganických solí také mnoho barevných sloučenin. Současně používané procesy degradace barviv jsou ekonomicky značně nákladné a proto se hledají nové způsoby jejich rozkladu. Jednou z možností je využití mikroorganismů produkujících enzymy, které proces biodegradace značně usnadňují. Práce se zabývá konstrukcí probublávaného bioreaktoru pro imobilizaci houby *Irpex lacteus*. Základem bioreaktoru byla cylindrická nádoba se středovou konstrukcí pro upevnění výplně sloužící k imobilizaci mikroorganismu. Reaktor byl navržen pro vsádkový režim, lze ho však snadno upravit i pro režim kontinuální. Po změření vybraných charakteristik reaktoru, jako je zádrž plynu nebo tlakové ztráta, bylo provedeno měření biodegradace barviva. Proces byl proveden vsádkově s využitím barviva. Reaktivní oranž 16. Následně byl použit i reálný vzorek odpadní vody z textilního průmyslu. Při měření stupně odbarvení barviv byla regulátorem udržována konstantní hodnota pH a byla sledována aktivita enzymů lakázy, manganperoxidázy a ligninperoxidázy, které se účastní biodegradace barviv.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Korelace objemového koeficientu přestupu hmoty ve fermentorech

Autor: Štěpánka Kohoutová
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha

Téma práce spadá do rámce výzkumu závislosti transportních charakteristik v mechanicky míchaných aerovaných nádobách na jejich měřítku. Pozornost je zaměřena na objemový koeficient přestupu hmoty mezi plynem a kapalinou - kLa . Dosud byla zpracována data z měření v nádobách laboratorního měřítka, kde byly použity různé typy míchadel, a data z měření v nádobě poloprovozního měřítka, kde byly použity Rustonovy turbíny. Cílem této práce je zpracovat transportní charakteristiky měřené v poslední době v poloprovozní nádobě s dalšími typy míchadel. Porovnáním s daty měřenými dříve v laboratorním měřítku bude popsána závislost těchto charakteristik na velikosti zařízení. Budou prezentována data pro míchadla: Rustonova turbína, Techmix-up, Techmix-down, Lightnin a Pitched blade-down. Části názvů míchadel "up" a "down" znamenají míchadla s čerpacím účinkem směrem vzhůru a dolů.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Optimalizace výroby kovových mikrostruktur

Autor: Vít Navrátil
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jaroslav Kotowski

Cílem práce je optimalizace pracovního postupu výroby kovových mikrostruktur, které jsou následně používány jako razítko. Základní materiály při výrobě razítka jsou Polymethylmethakrylát (PMMA), fotorezist SU8 a polydimethylsiloxan (PDMS). PDMS je elastomer, který je často používán pro výrobu mikrofluidních struktur, z důvodu nízkých nákladů na výrobu a snadné a jednoduché manipulace. Mikrostruktury vytvořené ve fotorezistu SU8 jsou přeneseny do PDMS pomocí metody zvané dvojí odlévání (double-casting). Po závěrečném přenesení struktur do PMMA, jsou takto vzniklé struktury pokoveny kombinací naprašování a elektrodepozicí. Výsledkem tohoto postupu je razítko, které se používá při výrobě mikrofluidních struktur. Cílem práce je optimalizace daného postupu.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Výzkum nebiologické chemotaxe pro využití v mikro a nanochemii

Autor: Matěj Novák
Ročník: B2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. František Štěpánek, 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. 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. Námi zkoumaný mechanismus je pohánění částic nebo kapek ke kyselému pH pomocí gradientu povrchového napětí podél částice. Byl pozorován orientovaný pohyb kapek obsahujících kyselinu 2-hexyl dekanovou v mikrofluidních kanálcích s různou geometrií a jejich shlukování na volných plochách. Do kapek byl dále přidáván chitosan, který se vysráží v zásaditém prostředí a v kyselém se rozpustí a uvolní enkapsulované látky (schopnost vylučovat látky z chitosanu v závislosti na pH byla ověřena na uv/vis spektrofotometru). 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

Studium elektrod pro sekundární baterie zinek-vzduch

Autor: Ivo Šnajdr
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jaromír Pociď, Ph.D., Doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Primární baterie zinek-vzduch se používají již od roku 1970 jako levný zdroj energie s vysokou energetickou hustotou. Bateriový článek zinek-vzduch je založen na vratné reakci kovového zinku s kyslíkem za vzniku oxidu zinečnatého ZnO . Použití zinko-vzduchové baterie jako sekundárního článku je limitováno zejména vysokými přepětími na vzduchové elektrodě, které vedou ke snížení energetické účinnosti, a také problémy na zinkové elektrodě: evolucí vodíku (na úkor tvorby zinku), růstem dendritů (vedoucím až ke zničení článku) a vodíkovou korozí. Funkční sekundární baterie zinek-vzduch by mohla najít uplatnění v mnoha oborech, například v informačních a komunikačních technologiích a v automobilovém průmyslu. Cílem této práce je nalézt řešení problémů spojených právě se zinkovou elektrodou. Jednou z cest je použití příměsi hydroxidu kovů II.A skupiny (Mg, Ca, Ba), které jsou schopny vytvářet zinečnatany. V případě přítomnosti některého z těchto hydroxidů dochází k polapení Zn(OH)_4^{2-} , vznikající při vybíjení, do jeho struktury za vzniku příslušného zinečnatanu, který je méně rozpustný v elektrolytu než ZnO , a tím k účinnému zabránění migrace zinečnatých iontů. Sekundární baterie je charakterizována metodou cyklické voltametrie.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Příprava a studium vlastností elektrolytu pro vanadovou redoxní baterii

Autor: Jiří Vrána
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Klára Smolná, Ing. Jaromír Pociď, Ph.D., Doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Celosvětovým trendem posledních let v energetice je prudký růst produkce elektřiny z obnovitelných zdrojů a podpora energetické koncepce vedoucí k účinnější distribuci elektřiny (např. tzv. chytré sítě). Oboje je úzce spojeno s vývojem nových zařízení pro lokální ukládání elektrické energie. Nová úložiště elektrické energie jsou rovněž důležitá pro zajištění kvality a stability dodávek elektřiny koncovým zákazníkům. Vanadová redoxní průtočná baterie (VRPB) je jedním z vhodných systémů pro stacionární ukládání energie. Mezi výhody tohoto konceptu patří zejména kapacita regulovatelná objemem elektrolytů, vysoká účinnost ukládání energie a velmi rychlá doba náběhu. Koncept VRPB byl úspěšně ověřen v naší laboratoři. Byla sestavena a otestována funkčnost pětičlánekové baterie. Dalším krokem při vývoji zařízení je navrzení dostatečně účinného a ekonomicky výhodného postupu pro přípravu elektrolytu. Cílem této práce je návrh, sestavení a otestování několika možných zařízení pro přípravu elektrolytu z oxidu vanadičného. Jako velice výhodným řešením se jeví membránový elektrolyzátor, který kromě kontinuální přípravy elektrolytu umožňuje vyrovnávat stav nabití provozních elektrolytů. Vlastnosti připravených elektrolytů byly studovány pomocí spektroskopie ve viditelné oblasti a cyklické voltametrie.

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

Komise:

Předseda: doc. Ing. Michal Příbyl, Ph.D.

Členové: Ing. František Jonáš Rejl, PhD.

Ing. Jiří Prokop (Interpharma)

Ing. Jiří Maršálek

Ing. Pavel Beránek

Soutěžící:

Bc. Arvajová Adéla

Bc. Dundálek Jan

Bc. Isoz Martin

Bc. Matuška Petr

Rygl Adam

Sládek Viktor

Bc. Smrčka David

Sponzoři sekce Procesní a chemické inženýrství 2

Mondi Štětí a.s.
Momentive Specialty Chemicals, a.s.
Interpharma Praha, a.s.
Glass Service, a.s.
Chemoprojekt, a.s.
Lovochemie, a.s.
Ricardo Prague sro.
Lonza Biotec s.r.o.



Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Reakce CO, uhlovodíků a NO_x na oxidačním katalyzátoru automobilových výfukových plynů

Autor: Adéla Arvajová
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Petr Kočí, Ph.D.

U klasických benzínových motorů dochází k oxidaci CO a nespálených uhlovodíků (HC) a současně redukci oxidů dusíku (NO_x) na trojcestném katalyzátoru. To je možné pouze díky udržování vyváženého stechiometrického poměru vzduch:palivo. Vznětové (dieselové) motory spalují palivo za přísunu většího množství vzduchu (chudá směs), což vede k nižší spotřebě paliva, ale na druhé straně vzniká problém s nedostatečnou redukcí NO_x. V přebytku kyslíku pak funguje běžný katalyzátor pouze jako oxidační. V rozmezí teplot 150-300°C sice může v závislosti na aktuálních koncentracích CO a HC docházet k částečné redukci NO_x, ale produktem této neúplné redukce bývá často N₂O. Tato práce zkoumá dosahované konverze CO, HC a NO_x a selektivitu redukce NO_x na oxidačním katalyzátoru v závislosti na teplotě a složení směsi. V laboratorním reaktoru je provedena řada pomalých teplotních ramp pro různá složení vstupního plynu, při kterých se sledují výstupní koncentrace NO, NO₂, N₂O, CO, HC. Z těchto dat je pak vyhodnocena kinetika jednotlivých reakcí a vzájemné inhibiční efekty, které ovlivňují zapálení. Ukazuje se, že rozsah redukce NO_x silně závisí zejména na koncentraci HC a redukce pomocí CO prakticky neprobíhá. Pro simulaci reaktoru je použit 1D heterogenní model s pístovým tokem a pro vyhodnocení kinetických parametrů simplexová optimalizační metoda.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Příprava a charakterizace bifunkčních vzduchových elektrod

Autor: Jan Dundálek
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Josef Chmelař, Ing. Jaromír Pociďč, Ph.D., doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Nové výrobky a inovace v oblasti přenosné elektroniky (notebooků, mobilních telefonů, atd.) a elektromobilů během posledních let kladou stále větší nároky na používaná mobilní úložiště energie, kterými jsou nejčastěji elektrochemické články mající vysokou specifickou energii (Wh/kg) a dostatečný specifický výkon (W/kg). Alternativou k dnes nejpoužívanějším NiMH či Li-Ion akumulátorům by mohly být baterie s otevřenou strukturou, jež jsou schopny konkurovat ať již cenou základních materiálů tak vysokou specifickou energií. Tato zařízení jsou schopna uložit větší množství energie vztažené na jejich hmotnost díky tomu, že jeden z elektrodových materiálů není obsažen přímo v baterii. Příkladem jsou zinko-vzduchové články, kde v alkalickém prostředí dochází k oxidaci zinku vzdušným kyslíkem. Pro sekundární zinko-vzduchové baterie je potřeba bifunkčních vzduchových elektrod, které pomocí vhodného katalyzátoru umožňují redukci kyslíku při vybíjení a jeho zpětné uvolňování při nabíjení. Cílem práce je návrh a příprava bifunkčních vzduchových elektrod na základě vypracované literární rešerše a jejich následná charakterizace pomocí vhodných elektrochemických metod.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Experimentální studie toku kapaliny po nakloněné desce

Autor: Martin Isoz
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. František Jonáš Rejl, Ph.D.

Pro pochopení procesů sdílení hmoty v plněných kolonách je nutné porozumět hydrodynamice toku kapaliny po výplních. Moderní strukturovaná výplň je však systémem stále ještě příliš komplikovaným na to, aby bylo možné jej použít přímo. V práci proto bylo provedeno zjednodušení problému až na úroveň filmového toku kapaliny po hladké skloněné desce. Dále byl studován speciální případ toku, tok typu potůček. Cílem práce bylo změřit velikost mezifázové plochy (I) – (g) pro tento případ toku, pro různé kapaliny a úhly sklonění desky. Byl sepsán program umožňující automatické vyhodnocení experimentálních dat a studovány vlivy různých faktorů, zejména úhlu sklonění desky, povrchového napětí, viskozity a objemového toku kapaliny na velikost měřené plochy mezifázového rozhraní.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Difúze v polymerech měřená na základě dynamiky tlakové odezvy

Autor: Petr Matuška
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Josef Chmelař, Doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Difúze v polymerech je proces s velkým významem pro výrobu polymerů a jejich aplikace. V rámci této práce byla přestavěna a otestována aparatura pro měření dynamiky tlakové odezvy („pressure-decay“), která slouží k měření difúzních koeficientů nízkomolekulárních látek v polymerech. Kromě popisu nové konstrukce aparatury bude též představena metodika pro vyhodnocení naměřených difúzních dat a jejich teplotních závislostí. Aparatura „pressure-decay“ je vhodná pro vzorky ve formě filmů a je schopna měřit do teplot 200°C a tlaků 3 MPa. Díky vysoké maximální teplotě je možné měřit též děje probíhající v polymerních taveninách. Z měření dynamiky tlakové odezvy lze také vyhodnocovat základní morfologické parametry porézních částic polyolefinů a zkoumat mechanismy difúze v semi-krytalických polymerech. Výsledky získané v rámci této práce byly též porovnány se staršími daty naměřenými pro jiný typ polyethylenu.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Příprava mikrocelulárních polymerních pěn pomocí vysokotlakého CO₂

Autor: Adam Rygl
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Andra Nistor, doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

V současnosti dostupné komerční polymerní pěny obsahují buňky o velikosti větší než 100 μm . Oproti tomu velikost buněk v mikro- (a nano-) celulárních pěnách je menší než 10 μm (respektive 100 nm). Jelikož zmenšením velikosti buněk pod 100 μm se rapidně snižuje tepelná vodivost pěny, nacházejí polymerní mikro- a nanopěny uplatnění hlavně jako tepelně izolační materiály, dále pak jako zvukové či dielektrické izolanty s malou spotřebou materiálu a mimořádnými mechanickými vlastnostmi oproti konvenčním pěnám. Tato práce se zabývá optimalizací vypěňovacího procesu s cílem připravit mikrocelulární pěny. Namísto běžně užívaných organických nadouvadel se pro přípravu mikro- a nanopěn používá oxid uhličitý, a to zpravidla v superkritickém stavu. Tato práce popisuje vyvinutou experimentální metodiku od přípravy polystyrenových filmů pomocí vytahování (tzv. dip coating) na aparatuře vlastní konstrukce, přes vypěňování v tlakové cele několika technikami (např. teplotně či tlakově inicializované vypěňování) až po charakterizaci morfologie především pomocí mikrotomografie (mikro-CT).

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Povrchová úprava alginátových částic a studium jejich vlastností

Autor: Viktor Sládek
Ročník: B2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Alginátové mikročástice lze použít jako reservoárů pro cílené doručování účinných látek, jako nosiče imobilizovaných enzymů či mikroorganismů, nebo jako „umělé buňky“ s vnitřní strukturou organel. Alginátový hydrogel sám o sobě však není dostatečně odolný vůči změnám v okolním prostředí (pH, teplota, atd.). Cílem práce proto bylo připravit mikročástice alginátu s povrchovou vrstvou oxidu křemičitého, která by zvýšila jejich stabilitu a umožnila další funkcionalizaci povrchu např. pro cílenou adhezi. Vrstva oxidu křemičitého byla připravena dvěma metodami - „sol-gel“ a „layer-by-layer“. Takto upravené částice byly charakterizovány konfokální a elektronovou mikroskopií, dále byla studována jejich stabilita v prostředích o různém pH, iontové síle a teplotě, a jejich mechanická odolnost. Důležitým parametrem je též rychlost difuze skrze vrstvu oxidu křemičitého a alginát. Vrstva oxidu křemičitého propůjčuje částicím schopnost ovlivňovat difusi a další vlastnosti pouze pasivně. Proto je naším dalším cílem schopnost aktivně ovlivňovat difusi, čehož se snažíme docílit zapojením responsivních polymerů (na změnu pH, teplotu, vlnovou délku světla, chemický signál) do uměle vytvořené struktury nanočástic oxidu křemičitého a polyelektrolytů. Do budoucna budeme dále upravovat částice ve směru specifického rozpoznávání a adsorpce.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Studium kinetiky reaktivní granulace pro výrobu detergentů

Autor: David Smrčka
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Sodná sůl kyseliny dodecyl-benzensulfonové je v současnosti nejrozšířenější povrchově aktivní látkou používanou v pracích práscích a dalších čisticích prostředcích. Vyrábí se suchou neutralizací kyseliny dodecyl-benzensulfonové pomocí uhličitanu sodného v reakčním granulátoru, kde dochází k nástřiku kyseliny do mechanicky promíchávaného lože uhličitanu. Specifikem této technologie je, že kyselina kromě reaktantu plní i funkci pojiva mezi částicemi uhličitanu a reakční kinetika tedy neovlivňuje pouze celkovou konverzi ale i fyzikálně-chemické vlastnosti vznikajících granulí. V této práci budou prezentovány výsledky z měření kinetiky suché neutralizace v laboratorním granulátoru. Reakční kinetika byla vyhodnocena ze závislosti objemu vyvinutého oxidu uhličitého – vedlejšího produktu suché neutralizace – na čase při různých teplotách a rychlostech míchání. Byl rovněž sestaven matematický model popisující kinetiku suché neutralizace a jeho platnost byla ověřena sérií experimentů. Kinetické experimenty byly rozšířeny o zkoumání kinetiky formování granulí v závislosti na velikosti primárních uhličitanových částic a době granulace. Prezentovány budou distribuce velikosti granulí v závislosti na výše zmíněných proměnných. Struktura částic byla zkoumána elektronovou mikroskopií a rentgenovou tomografií.

Sekce: **Procesní a chemické inženýrství 3**
posluchárna B03, 9:00 hod

Komise:

Předseda: doc. Ing. Dalimil Šnita, Ph.D.

Členové: Ing. Michal Kordač, PhD.

Ing. Jan Nájemník (Momentive)

Ing. Martin Hubička (Lovochemie)

Ing. Josef Chmelař

Ing. Marek Nebyla

Soutěžící:

Fojtíková Romana

Bc. Hulík Radim

Bc. Macháč Václav

Bc. Pittermannová Anna

Schneider Patrik

Šoltys Marek

Václavík Marek

Bc. Zíka Jan

Sponzoři sekce Procesní a chemické inženýrství 3

Mondi Štětí a.s.
Momentive Specialty Chemicals, a.s.
Interpharma Praha, a.s.
Glass Service, a.s.
Chemoprojekt, a.s.
Lovochemie, a.s.
Ricardo Prague sro.
Lonza Biotec s.r.o.



Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

Využití elektrosprejovacího procesu pro přípravu superkapacitorů

Autor: Romana Fojtíková
Ročník: B2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jiří Maršálek, doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Stále se zvyšující energetické nároky spojené s rychlým rozvojem elektrických zařízení (elektromobilů, mobilních telefonů atd.) jsou důvodem k poptávce po mobilních uložiscích schopných dodávat vysoký výkon. Takovými uložisci mohou být též superkapacity. Tato zařízení se vyznačují vysokou specifickou kapacitou a krátkými, řádově sekundovými nabíjecími časy. Kapacita superkapacitorů je přímo úměrná měrnému povrchu elektrod, a proto jsme pro jejich přípravu zvolili metodu elektrorozprašování. Tato metoda umožňuje připravovat nanočástice různých oxidů kovů s velice úzkou distribucí jejich velikostí. Dávkováním roztoku prekursorů požadovaných nanočástic do kapiláry a následnou aplikací elektrického pole vysokého napětí je vytvořen sprej generující mikroskopické aerosolové částice, které se v důsledku působení elektrostatických sil dispergují až na nanočástice. Takto lze nanášet nanostrukturované vrstvy na různé substráty, v našem případě MnO₂ na hliníkovou fólii, jež slouží jako základní konstrukční prvek (elektroda) pro superkapacity. Provedli jsme charakterizaci připravených vrstev pomocí různých metod (cyklická voltametrie, Ramanova spektroskopie, ...). Naším cílem je další zvyšování námi dosažené specifické kapacity (100 F/g) a následný návrh výroby superkapacitorů pomocí paralelizace elektrosprejů.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

Dynamika a selektivita redukce NO_x v automobilovém katalyzátoru typu NSRC

Autor: Radim Hulík
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Úsporné vznětové motory spalují palivo za přísunu většího množství kyslíku než motory zážehové. Nižší spotřeba paliva je však vykoupena problémem s emisemi oxidů dusíku (NO_x). Pro splnění nejpřísnějších emisních limitů a účinnou redukci NO_x je nutné zařadit za standardní oxidační katalyzátor ještě speciální deNO_x katalyzátor. Tuto funkci může zastávat katalyzátor s ukládáním NO_x, jehož činnost spočívá v periodické adsorpci a následné rychlé redukci nahromaděných oxidů dusíku. Ta probíhá za přebytku redukčních činidel, čehož se dosahuje řízeným krátkodobým obohacením palivové směsi. Tato práce sleduje dynamický průběh výstupních koncentrací NO_x, NH₃ a N₂O za periodického provozu průmyslového katalyzátoru s ukládáním NO_x, a to při teplotách v rozmezí 150°C až 500°C za použití redukovadel CO, HC, H₂, a to jak samostatně, tak i ve směsi. Měření jsou prováděna v laboratorním reaktoru se syntetickými plyny. V závislosti na aktuálních provozních podmínkách jsou vyhodnoceny integrační konverze a selektivity redukce NO_x. Je diskutována dynamika výstupních koncentrací během bohaté fáze, kdy reaktorem postupuje redukční fronta a výstupní signál reaguje na změnu vstupu s podstatným zpožděním. Takto naměřené data mohou sloužit pro správné nastavení řídicí jednotky.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

Konstrukce kolony se smáčenou stěnou

Autor: Václav Macháč
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. František Rejl, Ph.D.

Rektifikace je jeden z tradičních a nejrozšířenějších průmyslových separačních procesů. Moderní přístup k návrhu rektifikačních kolon představuje tzv. „rate-based“ modelování. Pro použití tohoto přístupu je nezbytně nutné znát hodnoty koeficientů přestupu hmoty. Jelikož přímé určení koeficientů přestupu hmoty při destilaci není možné, byla skupinou Sdílení hmoty na ÚCHI VŠCHT Praha vyvinuta tzv. „profilová metoda“ určování transportních koeficientů k_{Ga} a k_{La} . K ověření smysluplnosti koeficientů získaných profilovou metodou je nyní nutné porovnat výsledky získané při rektifikaci s výsledky získanými při absorpci ve stejném experimentálním zařízení. K tomuto účelu byla zvolena právě kolona se smáčenou stěnou, která má při použití různých systémů a pro různé průtoky stále stejnou mezifázovou plochu. Hlavní část kolony tvoří skleněná vertikální trubka o délce 1,4 m a vnitřním průměru 2,5 cm. Cílem této práce je navrhnout a otestovat distributor kapaliny, který vytvoří film o stejné intenzitě toku po celém vnitřním obvodu kolony. Správná funkce distributoru je nezbytným předpokladem k zajištění konstantní mezifázové plochy.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

Specifická bioadheze modifikovaných silikových nanočástic

Autor: Anna Pittermannová
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Pro použití kompozitních termoresponzivních mikročástic jako nosičů aktivních látek je důležité znát bioadhezní vlastnosti jejich povrchu, jenž je tvořen modifikovanými silikovými nanočásticemi. Z tohoto důvodu se zabývám zkoumáním specifické adheze silikových nanočástic. Silikové nanočástice byly připraveny pomocí Stöberovy metody. Aby je bylo možné sledovat konfokálním mikroskopem, byly obarveny fluorescenčním roztokem. Na povrch nanočástic byla následně navázána specifická a nespecifická protilátka. Adhezní vlastnosti byly zkoumány na speciálních podložních sklíčkách modifikovaných antigenem, jenž je komplementární ke specifické protilátce navázané na částicích. Interakce jednotlivých typů částic na podložní sklíčko s antigenem byla sledována v adhezní cele s dobře definovaným laminárním tokem vody. Procento částic přilnutých na antigen bylo vyhodnoceno z obrazu z konfokálního mikroskopu pomocí obrazové analýzy. Byly provedeny experimenty s nemodifikovanými nanočásticemi, s částicemi se specifickou protilátkou a s částicemi s nespecifickou protilátkou jako negativní kontrola. Byla proměřena závislost procenta navázaných částic na objemovém průtoku uvnitř adhezní cely, což umožnilo odhadnout adhezní sílu založenou na interakci antigen-protilátka.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

Experimentální studium měknutí polyethylenu

Autor: Patrik Schneider
Ročník: B2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Josef Chmelař, Doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Měknutí polymerů je velmi významný problém při polymeracích v plynně-disperzních reaktorech. Měknutí posiluje tendence k aglomeraci a ulpívání částic ve fluidních reaktorech či odplynovacích věžích, což může vést až k odstavení celé výrobní linky a velkým ekonomickým ztrátám. Určení teploty měknutí je tudíž nezbytné pro průmyslovou výrobu. V této práci je teplota měknutí určována pomocí techniky laserové dilatometrie. Tato aparatura umožňuje studium měknutí nejen na vzduchu, ale též v organických atmosférách (ethylen, hexan) za tlaků až 30 bar. Využívána je též nukleární magnetické resonance (NMR), na které je pomocí experimentů Free induction decay (FID) a Hahn-Echo charakterizována pohyblivost řetězců. Na základě naměřených teplot měknutí studujeme vliv krystalinity polymerních vzorků, typu atmosféry a sorpce penetrantů. Pozorován je růst teploty měknutí s krystalinitou a její pokles vlivem sorpce (bobtnání), což je v souladu s teoretickými předpoklady. K interpretaci pozorovaných jevů přispívá též srovnání výsledků získaných z NMR experimentů a příslušných teplot měknutí.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

Příprava dutých silikových nanočástic povrchově modifikovaných magnetitem

Autor: Marek Šoltys
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Cílem práce bylo připravit povrchově modifikované duté silikové nanočástice (100 – 500 nm) s oxidem železitým, které mohou sloužit jednak jako vnitřní zásobníky reaktantů v tělech chemických robotů, ale také jako autonomní nosiče pro enkapsulaci a cílené vylučování účinných látek. Porézní siliková stěna propůjčuje nanočásticím mechanickou odolnost a umožňuje regulovat rychlost difuze látek z a do vnitřního prostoru částice. Oxid železitý díky svým magnetickým vlastnostem umožňuje s částicemi manipulovat s pomocí vnějšího magnetického pole, lokálně ovlivňovat teplotu radiofrekvenčním ohřevem a vizualizovat částice pomocí magnetické rezonance (MRI). K přípravě nanočástic byla použita emulzní metoda. Kyselina olejová byla míchána za pokojové teploty v roztoku ethanolu. Za konstantního míchání byl přidán (3-aminopropyl)ethoxysilan a tetraethoxysilan, jejichž hydrolýzou a polykondenzací vznikl oxid křemičitý. Pro povrchovou úpravu jsme použili dvě metody: 1) magnetické částice byly přidány během procesu přípravy křemičitých nanočástic; 2) magnetické částice byly vysráženy v již hotových nanočásticích. Charakterizace vlastností produktu byla provedena skenovacím elektr. mikroskopem (SEM), transmisním elektr. mikroskopem (TEM), metodou dynamického rozptylu světla, radiofrekvenčním ohřevem a Brunauer-Emmett-Tellerovou metodou analýzy velikosti pórů (BET). Obě metody přípravy byly porovnány z hlediska jejich vlivu na difusní vlastnosti částic a jejich schopnost radiofrekvenčního ohřevu.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

Příprava porézních polystyrenových mikročastic

Autor: Marek Václavík
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Porézní materiály mají své uplatnění v mnoha oborech. Důležitou roli hrají také při separaci směsí – konkrétně v kapalinové chromatografii. Tato práce popisuje přípravu polystyrenových mikročastic, tzv. mikroclusterů, definované velikosti, tvaru a vnitřní struktury, zabývá se jejich charakterizací a také použitím v chromatografických kolonách. Výchozím materiálem jsou polystyrenové nanočástice, jež podléhají kontrolovanému shlukování (agregaci) v míchaném reaktoru za dvou různých podmínek. V prvním případě jsou vlastnosti mikročastic ovlivněny pouze rychlostí míchání reakční směsi, dochází totiž k ustavení rovnováhy mezi růstem agregátů a jejich lámáním v důsledku proudění tekutiny. Takto vzniklé částice mají nepravidelný tvar. Podstatou druhé metody je příprava inverzní emulze vody v silikonovém oleji. Shlukující se nanočástice jsou uzavřeny do kapek vody, které mají ze své podstaty kulový tvar. Tím je ovlivněn i výsledný tvar mikročastic.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 3

Příprava a charakterizace tuhých lipidových nanočastic

Autor: Jan Zíka
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Tuhé lipidové nanočástice jsou sférické částice o velikostech v řádu stovek nanometrů, skládají se z lipidových jader stabilizovaných vrstvou surfaktantu a jsou obvykle dispergovány ve vodě nebo vodném roztoku surfaktantu. Biodegradabilita, snadné metody přípravy bez použití organických rozpouštědel a možnost vylučování předem inkorporované hydrofobní látky pomocí změny teploty z nich činí vynikající kandidáty nosičů účinných látek. Cílem této práce je prozkoumat možnosti přípravy tuhých lipidových nanočastic jednou z méně používaných metod, vysokorychlostní homogenizací, a zmapovat vliv procesních parametrů na vlastnosti výsledných disperzí. 500 mg palmového oleje (teplota tání 35 °C) bylo přidáno do cirkulujícího vodného roztoku surfaktantů (směs lecitin:Tween 60, 1:1, celkem 100 mg) o objemu 300 ml. Byl systematicky mapován vliv všech relevantních procesních parametrů na vlastnosti disperze. V odebraných vzorcích byla distribuce částic měřena metodami statického a dynamického rozptylu světla. Různými postupy se podařilo připravit stabilní nanočástice s relativně úzkou distribucí velikosti a střední velikostí od 150 do 500 nm. Potvrdil se předpoklad, že zvýšení intenzity homogenizace příznivě ovlivňuje kvalitu disperze.

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

Komise:

Předseda: doc. Ing. Stanislava Grosová, CSc.

Členové: Ing. Olga Kutnohorská, Ph.D.

Ing. Dana Strachotová, Ph.D.

Ing. Miroslav Vágner, MBA, Ph.D.

Soutěžící:

Bc. Applová Renáta

Bc. Kadlecová Lucie

Bc. Kšírl Michal

Bc. Kubeš Stanislav

Bc. Labík Libor

Bc. Mokrý Ondřej

Bc. Švorčík Adam

Bc. Weber Pavel

Sekce: Podnikový management a marketing

Finanční analýza nákladů na nákup spotřebního materiálu

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

Obsahem práce je zjištění efektivity vynaložených nákladů na nákup spotřebního materiálu v podmínkách státní organizace a hledání možností zvýšení této efektivity při současné dodržování platných zákonů. V první části tohoto projektu jsou shrnuty obecné poznatky týkající se procesního zabezpečení nákupu tonerů (tj. získávání požadavků na typy a počty ks tonerů, průzkum trhu, vypsání veřejné zakázky, smluvní zajištění dodávky, kontrola plnění dodávky včetně její distribuce, finální přejímka splněné dodávky a její fakturace). Druhá část se zabývá konkrétními náklady na plnění skutečné dodávky tonerů pomocí klasického otevřeného nadlimitního řízení a zároveň je zde popsána možnost využití rámcové smlouvy na uskutečnění shodné dodávky. Pomocí ukazatelů finanční analýzy je zhodnocena efektivita vynaložení finančních prostředků organizace.

Cílem práce bylo zhodnocení využívaného způsobu nákupu spotřebního materiálu pro tiskárny a hledání slabých míst s cílem nalezení takových opatření, které by vedly k efektivnějšímu způsobu zajištění dodávek.

Sekce: Podnikový management a marketing

Příprava marketingového plánu pro produkt Almiral

Autor: Bc. Lucie Kadlecová
Ročník: M2
Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Doc. Ing. Stanislava Grosová, CSc.

Práce se týká tvorby marketingového plánu pro volně prodejný farmaceutický produkt Almiral gel. Cílem práce je celková analýza trhu, positioning, SWOT analýza pro daný produkt, strategie a taktika a odhad plánů prodeje až do roku 2015.

Sekce: Podnikový management a marketing

Zkoumání závislostí mezi vlastnostmi přírodních kaučuků

Autor: Bc. Michal Kšířl
Ročník: M2
Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Mgr. Ing. Marek Botek, Ph.D.

Práce se zabývá hledáním a analyzováním závislostí mezi naměřenými vlastnostmi přírodních kaučuků. Je založena na datech, která byla získána v průběhu letní praxe ve firmě Mitas a.s. Jedná se o data ze vstupní kontroly přírodních kaučuků, při které se měřilo sedm parametrů - viskozita, index D, PO, PRI, těkavé látky, popel a pach. Výsledky práce mohou být využity pro lepší prognostiku chování používaných přírodních kaučuků a plánování výrobního procesu s ohledem na výše uvedené parametry.

Sekce: Podnikový management a marketing

Optimalizace tiskařského stroje

Autor: Bc. Stanislav Kubeš
Ročník: M2
Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Jakub Dyntar, Ph.D.

Cílem realizace projektu bylo prověřit metodou dynamické simulace dopady plánovaného navýšení objemu výroby plechových kol na pracovišti potisku kol.

Součástí realizace projektu bylo provedení analýzy současného stavu s důrazem na zmapování zkoumaného procesu a získání časových náměrů klíčových manipulací a operací při potisku kol a při uložení kol do expedičního skladu.

Sekce: Podnikový management a marketing

Dynamická simulace dopravníkového systému

Autor: Bc. Libor Labík
Ročník: M2
Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Jakub Dyntar, Ph.D.

Cílem práce bylo vytvořit dynamickou simulaci dopravníkového systému a s využitím této simulace zjistit, zdali navrhovaný dopravníkový systém dokáže přepravit požadované množství palet. Podle návrhu firmy Promus Katowice Sp. z o.o. byl sestaven model simulující práci dopravníkového systému, jež bude sloužit k přepravě palet mezi dvěma halami ve Škoda auto a.s. Touto simulací byla ověřena schopnost systému dlouhodobě přepravovat požadované množství palet z jedné haly do druhé. Byly testovány scénáře s poruchami na vybraných zařízeních v systému. Byl testován scénář s významnou změnou systému. Podařilo se prokázat, že krátkodobá porucha na daných prvcích dopravníku významně nenaruší chod systému. Při významné změně systému (snížení počtu odběrových míst) klesne prostupnost o 27%.

Sekce: Podnikový management a marketing

Rizika návratnosti intenzifikačních projektů v chemickém průmyslu

Autor: Bc. Ondřej Mokřý
Ročník: M2
Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Ivan Souček, PhD.

Projekt je zaměřen na kvantifikaci rizika intenzifikačních projektů v chemickém průmyslu. V práci je použitý příklad projektu druhé intenzifikace jednotky Nového hydrokraku (NHC) společnosti ČESKÁ RAFINÉRSKÁ, a.s., v rafinérii Litvínov. Po úspěšném uvedení intenzifikované jednotky do provozu v roce 2007 a dosažení plánované výkonnosti se jednotka začala potýkat s problémy, které pravděpodobně vznikly z provedení intenzifikace nad únosný limit původního projektového řešení a nakonec způsobily neplánované odstavení celé jednotky v roce 2010 za účelem provedení oprav a dalších úprav. Toto vedlo ke značným ztrátám umocněným nutností snížit provozní kapacitu jednotky (pod původně plánovanou úroveň, avšak vyšší než před provedenou intenzifikací), aby jednotka mohla být dlouhodobě bezpečně provozována.

Cílem práce bylo na základě postinvestičního vyhodnocení provozu jednotky identifikovat možná rizika související s tímto typem projektů a pokusit se o jejich kvantifikaci tak, aby je bylo možné zohlednit při plánování podobných projektů v budoucnu.

Sekce: Podnikový management a marketing

Návrh nového layoutu

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

Na tomto projektu jsem spolupracoval několik měsíců. Úkolem bylo navrhnout nové rozložení strojů, lakovacích a balčích linek ve společnosti, která vyrábí nábytek.

Na začátku projektu jsme provedli měření ve výrobní hale společnosti. Změřili jsme a nafotili veškeré stroje. Zjišťovali jsme podrobné informace o návaznostech a také o tom, jak jsou na jednotlivé stroje přidělovány polotovary.

Po zpracování vstupních dat následovala analýza toků materiálů a jejich náročnost během výroby.

Byly vytvořeny varianty layoutu, které se lišily v rozložení strojů a v tocích materiálů. Na varianty byl aplikován model v programu Witness, který nám ukázal, který layout je nejlepší možnou variantou.

Sekce: Podnikový management a marketing

Specifický požadavek zákazníka – specifikace, kalkulace, hodnocení efektivity pracovníků

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

Zabýval jsem se implementací způsobů kalkulace zakázek a obecně mechanismem přerodu individuální a specifické poptávky klienta přes specifikaci a nabídku po objednávku a samotnou realizaci.

Dále jsem se zabýval měřením a hodnocením efektivity pracovníků ve výrobě a v obchodě a navržením motivačních/bonusových programů v návaznosti na efektivitu práce.

Následně jsem navrhl mechanismus implementace tohoto procesu do vnitropodnikového IS a řídil implementaci až do zdárného konce.

Sekce: **Fyzika a měřicí technika**
posluchárna B220, 8.00 hod

Komise:

Předseda: doc. Ing. Jaroslav Hofmann, CSc.

Členové: Mgr. Dr. Jana Jirešová

Ing. Ladislav Fišer, Ph.D.

Soutěžící:

Havlas Michal

Hermannová Kristýna

Kloudová Iva

Matějka Jiří

Tomeček David

Valentová Marie

Živčáková Martina

Sekce: Fyzika a měřicí technika

Závislost dekontaminačních účinků korónového výboje na salinite vodní suspenze

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

Práce se snaží o podporu nebo vyvrácení hypotézy o mechanismech působení nízkoteplotního plazmatu generovaného v korónovém výboji. Koncentrace roztoku chloridu sodného působí osmotickým tlakem proti osmotickému tlaku uvnitř buňky, což může při porušení bakteriální stěny hrát významnou roli pro přežívání mikroorganismů. Jako reprezentativní bakterie byly vybrány Gram-negativní *Escherichia coli* a Gram-pozitivní *Staphylococcus epidermidis* a eukaryotní kvasička *Candida albicans*, která bakteriální stěnu postrádá.

Sekce: Fyzika a měřicí technika

Použití cely s planárními elektrodami pro Měření impedance pomerančových šťáv

Autor: Kristýna Hermannová
Ročník: B2
Ústav: fyziky a měřicí techniky
Školitel: Mgr. Jaromír Seidl

Cílem práce bylo zhodnocení možností využití impedanční spektroskopie jako rychlou metodu pro rozlišení různých druhů komerčně vyráběných pomerančových šťáv. Impedanční spektroskopie je nová, rozvíjející se metoda, která má také značný potenciál při analýze potravin. Její jedinečnost spočívá v tom, že poskytuje fyzikálně-chemické informace o vzorku, zároveň je to poměrně rychlá a nedestruktivní metoda. Měřené impedanční spektrum je závislostí impedance na frekvenci a je ovlivňováno strukturou a chemickým složením potravin, přičemž největší vliv má obsah vody, minerálů, kyselin a stupeň jejich disociace. Impedanční spektroskopie našla uplatnění v laboratorní kontrole ovoce a zeleniny (sledování kvality technologického zpracování). Součástí práce bylo seznámení se s impedančním analyzátozem Agilent 4294A, vypracování metodiky měření s planárními elektrodami a analýza 6 vybraných reálných vzorků pomerančových džusů.

Sekce: Fyzika a měřicí technika

Využití impedanční spektroskopie při analýze sirupů

Autor: Iva Kloudová
Ročník: B2
Ústav: fyziky a měřicí techniky
Školitel: Dr. Mgr. Jana Jirešová

Impedanční spektroskopie je relevantní metodou pro určování kvality a stáří rozličných potravinářských vzorků. Příkladem může být hovězí maso, jablka, kiwi, zmrzlina a další. Sirupy jsou vyráběny z cukru (glukózy, fruktózy), vody, kyseliny citrónové, barviv a příchutí. Kvalitnější, dražší sirupy obsahují navíc ovocnou složku v množství přibližně od 10 % do 36 %. Cílem práce je dokázat, že pomocí impedanční spektroskopie je možné odhalit podíl přidané ovocné složky v sirupu. Experimenty jsou prováděny ve skleněné cele o rozměrech $16 \times 7 \times 9$ cm. Impedanci proměříme mezi dvěma planárními elektrodami z nerezové ocele při frekvencích od 100 Hz do 1 MHz. Pomocí závislosti reálné části impedance na frekvenci, její imaginární části na frekvenci a Nyquistova diagramu a znalosti cukernatosti a deklarovaného obsahu ovocné složky se snažím prokázat souvislost mezi hodnotami impedance a obsahem ovocné složky v sirupu.

Sekce: Fyzika a měřicí technika

Dekontaminační účinky různých módů korónového výboje na studovaných mikroorganismech

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

Práce se zabývá porovnáním různých módů korónového výboje z hlediska jejich účinnosti při dekontaminaci vodní suspenze mikroorganismů. Porovnání je provedeno pro tři modelové mikroorganismy (*Escherichia coli*, *Staphylococcus epidermidis*, *Candida albicans*) a čtyři módy impedančně stabilizovaného výboje. Zmapovali jsme závislost těchto mikrobicidních účinků na fyzikálních a elektrických vlastnostech výboje.

Sekce: Fyzika a měřicí technika

Aktivní vrstvy chemických vodivostních senzorů na bázi organických polovodičů a nanočástic kovů

Autor: David Tomeček
Ročník: B3
Ústav: fyziky a měřicí techniky
Školitel: Ing. Přemysl Fitl, Ph.D.

Chemické vodivostní senzory patří mezi základní detektory výbušných, zdraví škodlivých či jinak nebezpečných plynů. Výraznou výhodou těchto senzorů ve srovnání s klasickými analytickými instrumentálními technikami jsou jejich nízké provozní a výrobní náklady.

V současné době dochází ve výzkumu a vývoji vodivostních senzorů k přeorientování z anorganických materiálů na materiály z okruhu organických látek (přesněji organických polovodičů). Vodivostní senzory s organickými aktivními vrstvami se dají provozovat při pokojové teplotě a zároveň vykazují výrazně vyšší selektivitu z důvodu odlišných interakčních mechanismů mezi plynem a aktivní vrstvou. Jednou z možností, jak vylepšit vlastnosti těchto senzorů, je nanášet nanočástice katalyzátorů na povrch jejich aktivních vrstev nebo je zabudovávat rovnoměrně za vzniku kompozitních nanovrstev.

V rámci práce byly připraveny technikou vysokovakuového napařování aktivní vrstvy ftalocyaninů mědi, cínu, zinku a stříbra. Na tyto vrstvy byly posléze připrašovány katalytické nanočástice. Podmínky napařování i naprašování byly zoptimalizovány a pro lepší kontrolu nad naprašovacím procesem byla nakalibrována QCM mikrováha. Součástí činnosti bylo též vyvinutí a odzkoušení systému pro automatizované měření vodivosti aktivních vrstev senzorů již v průběhu depozice kovových nanočástic, což dovoluje připravit vždy optimální množství katalyzátoru pro každý konkrétní senzor, aniž by byl překročen jeho perkolační práh. Měřicí software byl vytvořen v prostředí NI LabVIEW.

Sekce: Fyzika a měřicí technika

Mikroflóra na historických fotografiích

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

Analyzovali jsme mikroflóru historických fotografií s ohledem na možnosti uložení těchto fotografií v depozitáři umělecké galerie. Fotografie jsme z hlediska microbiální bezpečnosti shledali jako nezávadné, jelikož byly kontaminovány pouze malým množstvím spor mikromycet obsažených v běžné vzdušné mikroflóře. Dále jsme analyzovali historické fotografie dlouhodobě

skladovány ve vlhkém prostředí a pokusili se o jejich dekontaminaci.

Sekce: Fyzika a měřicí technika

Farebná rozmanitost' obnôžkového peľu

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

V naší práci sme sa sústredili na obnôžkový peľ. Zaujímala nás hlavne farebná distribúcia a tvar peľových zrníček vybraných drevín či bylín. K dispozícii sme mali vzorky peľu ako napr. agát, repku, slnečnicu, faceliu a vrbu. Z každej skupiny vzoriek sme realizovali meranie pre sto kusov peľových zrníček. Farebná distribúcia bola vyhodnotená pomocou obrazovej analýzy a softwaru NIS-Elements. Výsledky boli spracované pre farebný model RGB i pre model CIE $L^*a^*b^*$. Nakoniec sme namerané výsledky porovnali s meraním pomocou programu Labview.

Sekce:	Inženýrská informatika, zpracování obrazů a řízení procesů posluchárna A335, 8.30 hod
Komise:	
Předseda:	prof. Aleš Procházka, CSc.
Členové:	doc. Jaromír Kukal, Ph.D. Ing. Jana Finkeová, CSc. doc. Miroslav Kubíček, CSc.
Soutěžící:	Kopal Jakub Polák Ondřej Sedlecká Lucie Schätz Martin Špale Martin Šťástka Ladislav Bc. Ťupa Ondřej Bc. Vavryčuková Julie Yudina Olga

Sekce: Inženýrská informatika, zpracování obrazů a řízení procesů

Grafické uživatelské prostředí pro spektrální analýzu EEG dat

Autor: Jakub Kopal
Ročník: B3
Ústav: počítačové a řídicí techniky
Školitel: MUDr. O. Vyšata, Ph.D., Prof. Ing. Aleš Procházka, CSc

Diskrétní Fourierova transformace představuje základní matematický nástroj pro spektrální analýzu signálů. Práce je zaměřena na rozbor a algoritizaci Bartlettovy procedury pro zpřesnění odhadu frekvenčních komponent signálů určených na základě periodogramů stanovených pro zvolená časová výběrová okna pozorovaných časových řad. Práce je zaměřena na analýzu spektrálních složek navazujících a nepřekrývajících se úseků signálů a jejich průměrování. Navržený algoritmus je ověřen pro testovací data a dále aplikován na vícekanálové EEG signály. Součástí práce je popis způsobu pořízení reálných dat včetně vymezení jejich významných frekvenčních pásem a analýza zvoleného úseku EEG záznamu. Součástí práce je návrh grafického uživatelského prostředí pro čtení, výběr časového úseku dat, jejich číslicovou filtraci a spektrální analýzu ve výpočetním prostředí systému MATLAB.

Sekce: Inženýrská informatika, zpracování obrazů a řízení procesů

Mobilní řízení LEGO robota MINDSTORM NXT

Autor: Ondřej Polák
Ročník: B3
Ústav: počítačové a řídicí techniky
Školitel: prof. Ing. Jan Náhlík, CSc.

Podíl chytrých telefonů na českém trhu rok od roku roste. Momentálně používá 45 % chytrých telefonů v České republice operační systém Android od společnosti Google. V mé práci se zaměřím právě na vytvoření mobilní aplikace pro mobilní telefony s tímto operačním systémem. Aplikace je určena k dálkovému ovládání pohybu LEGO robota MINDSTORM NXT. V práci jsem se seznámil s možnostmi ovládání robota a vytvořil jsem jednoduchou aplikaci pro pohyb robota. S pomocí mé aplikace je možné s robotem jet dopředu, dozadu a samozřejmě se otáčet. Aplikace je s robotem spojena pomocí komunikačního protokolu Bluetooth. Pomocí něho odesílám potřebné příkazy přímo robotu. Syntaxe jednotlivých příkazů byla převzata z LEGO Bluetooth developer kit. Jedním z cílů této práce je řešerše možností mobilních aplikací pro řízení nebo ovládání různých zařízení počínaje jednoduchými přístroji až ke komplexním systémům jako je například ovládání domácnosti.

Sekce: Inženýrská informatika, zpracování obrazů a řízení procesů

Zpracování obrazů ve forenzní analýze - daktyloskopie

Autor: Lucie Sedlecká
Ročník: B1
Ústav: počítačové a řídicí techniky
Školitel: Ing. Martina Mudrová, Ph.D.

Práce je zaměřena na možnosti klasifikace otisků prstů, tedy obrazců vytvořených papilárními liniemi. Obsahuje rešeršní část popisující jednotlivé dermatoglyfy a markanty, popisuje také způsoby snímání otisků a uchování těchto informací jednotlivých osob ve formě standardizované v ČR. Dále se zabývá možnostmi importu otisků do programového prostředí Matlab a řeší prvotní problémy spojené s úlohami identifikace otisku a jeho dalšího zpracování na reálně získaných otiscích pokusné osoby.

Sekce: Inženýrská informatika, zpracování obrazů a řízení procesů

Wavelet komprese EKG záznamů a jejich PL modelování

Autor: Martin Schätz
Ročník: B3
Ústav: počítačové a řídicí techniky
Školitel: Prof. Aleš Procházka, CSc, MUDr. Oldřich Vyšata, Ph.D.

Práce prezentuje možnosti zpracování EKG signálů zaznamenaných při různé zátěži, pomocí Haarovy Wavelet transformace. Navržený algoritmus se zabývá kompresí pozorovaných dat a PL modelováním záznamů s následným určením tepové frekvence. Cílem příspěvku je popis navrženého programového celku a grafického uživatelského rozhraní pro kompresi vlastních EKG záznamů, pro jejich PL modelování a pro přehlednou prezentaci zaznamenaných EKG měření včetně výsledků PL modelování a přepočtu frekvence tepu. Součástí práce je rozbor matematických operací pro zpracování naměřených dat, jejich číslicové filtrace a ověření navržených algoritmů ve výpočetním prostředí systému MATLAB.

Sekce: Inženýrská informatika, zpracování obrazů a řízení procesů

Síťová komunikace programovatelného automatu Siemens Simatic S7-1200

Autor: Martin Špale
Ročník: B3
Ústav: počítačové a řídicí techniky
Školitel: Prof. Ing. Jan Náhlík, CSc

Příspěvek se zabývá možností síťové komunikace PLC Siemens SIMATIC S7-1200. Postupně popisuje komunikační standard PROFINET – průmyslový Ethernet a jeho strukturu a uplatnění v integrované automatizaci. Stručně je nastíněn referenční model ISO/OSI a síťové protokoly, které využívá Profinet. Dále bude diskutována operátorská komunikace s PLC – zejména použití PLC jako web serveru, a mobilní komunikace prostřednictvím SMS zpráv.

Bude popsán současný stav úlohy řízení fyzikálního modelu pícky a výhledově možnosti realizace řízení tohoto modelu na dálku v síti s PLC fungujícím jako web server a řízení pomocí přídatného modulu SINAUTIC pro komunikaci v síti GSM.

Sekce: Inženýrská informatika, zpracování obrazů a řízení procesů

Uživatelské rozhraní pro komunikaci s modelem robotického ramene

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

Práce se zabývá komunikací počítače s modelem robotického ramene vytvořeného s využitím sady Lego Mindstorms a vytvořením uživatelského rozhraní (GUI) pro jeho řízení. GUI vytvořené v prostředí Matlab poskytne možnosti ovládání jednotlivých částí modelu ramene, ale i možnost pohybu celého modelu po zadané dráze. GUI dále umožní sledovat pohyb ramene dvěma způsoby. První způsob je pomocí webové kamery, která pořízený záznam přenáší do okna GUI, druhou možností je sledování pohybu ve 2-D projekcích a 3D grafu.

Sekce: Inženýrská informatika, zpracování obrazů a řízení procesů

ROC křivky a jejich aplikace v EMG analýze

Autor: Ondřej Ťupa, Bc.
Ročník: M1
Ústav: počítačové a řídicí techniky
Školitel: Prof. Aleš Procházka, CSc, MUDr. Oldřich Vyšata, Ph.D

ROC křivky (Receiver Operating Characteristic Curves) je užitečný nástroj pro hodnocení kvality klasifikace binárního rozhodovacího testu pro jedno kritérium rozhodování. Výsledek testu nám poskytuje vztah mezi specifitou a senzitivitou daného testu pro všechny možné hodnoty prahu. Vhodnost zvolení prahu posuzujeme podle velikosti plochy pod takovou ROC křivkou.

Definici ROC křivek bude ukázána na modelovém příkladu. Vzorový testovací soubor jsou lidé nemocní chřipkou a zdraví jedinci, rozhodovacím kritériem je zde tělesná teplota.

Dále pak na přímé aplikaci při studiu reálných EMG záznamů. Studie je zaměřena na srovnání hodnot Willisonovy amplitudy (WAMP) a nově definované amplitudy (TAMP). Podle velikostí ploch pod ROC křivkami můžeme posoudit rozhodovací možnosti těchto ukazatelů. Testovanými skupinami jsou zdraví jedinci a pacienti s neuropatií.

Sekce: Inženýrská informatika, zpracování obrazů a řízení procesů

Geometrické transformace v registraci biomedicínských obrazů

Autor: Bc. Julie Vavryčuková
Ročník: M1
Ústav: počítačové a řídicí techniky
Školitel: Prof. Ing. Aleš Procházka, CSc., MUDr. Oldřich Vyšata, Ph.D.

Registrace obrazů je proces, který umožňuje prostorové ztotožnění a následné porovnání dvou nebo více obrazů. Jedná se o multidisciplinární téma na hranici zpracování obrazů, počítačového vidění a teorie informace. V oblasti biomedicíny je možné s pomocí registrace např. vyhodnocovat snímky pořízené různými zobrazovacími metodami, v různém čase nebo při různých pozicích pacienta. Předložená práce se věnuje geometrickým transformacím (změna měřítka, posunutí, rotace, složené geometrické transformace) v tzv. rigidní registraci MRI obrazů. V práci je rovněž na reálných biomedicínských datech ilustrován postup rigidní registrace. Prvním krokem je výběr tzv. kontrolních bodů v obou porovnávaných obrazech, následuje výpočet transformační matice a samotná geometrická transformace jednoho z obrazů. Cílem je detekce změn tkáně na MRI obrazech pořízených v různých časových intervalech. Výše uvedený proces je zpracován ve výpočetním systému MATLAB.

Sekce: Inženýrská informatika, zpracování obrazů a řízení procesů

Development of software tool supporting ergotherapeutic rehabilitation

Autor: Olga Yudina
Ročník: B2
Ústav: počítačové a řídicí techniky
Školitel: Grajciarová Lucie, RNDr.

ERGOSOFT application is a software tool to support occupational rehabilitation therapy. Often it is very difficult to return to normal life for some people with serious diseases because in most cases even in adulthood they are to learn even basic skills such as walking, talking, cooking, dressing, etc. Without occupational therapy they (or their relatives) are forced to use a generous amount of equipment and do a lot of exercises. This application should simplify not only work for doctors, but also for the patients themselves or their careers. The tool contains the database of the ergotherapy equipment and exercises that can be easily edited. ERGOSOFT serves as an interactive support with a list of appropriate tools/exercises for patients with specific diseases or disabilities. Therefore, the application was developed on the basis of proposals and suggestions of experts from the Department of Rehabilitation Medicine, First Faculty of Medicine, Charles University in Prague and General University Hospital in Prague. This application is programmed on JAVA and contains a clear and apprehensible graphical user interface, MySQL database and finally contains a function of reporting in XML format so that user can save or print a report.