

Seznam sekcí a složení komisí

- Sekce:** **Analytická chemie**
posluchárna A105, 8.00 hod
- Komise:**
- Předseda:** doc. Ing. Vladimír Setnička, Ph.D.
- Členové:** doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.
doc. RNDr. Dr. David Sýkora
Dr. Ing. Jindřich Koubek, Ph.D.
Ing. Ladislav Tenkl (zástupce firmy Nicolet CZ)
Mgr. Filip Dvořák (zástupce firmy P-Lab)
- Soutěžící:** Bc. Marek Bot
Filip Grelich
Bc. Milan Jakubek
Bc. Jakub Koktan
Bc. Stanislav Kykal
Bc. Václav Parchaňský
Helena Ryšavá
Jakub Sedláček
Bc. Danuše Vavřinová
Lukáš Vrzal
- Sekce:** **Fyzikální chemie I.**
Místnost A125, 9.00 hod
- Komise:**
- Předseda:** prof. RNDR. Petr Voňka, CSc.
- Členové:** doc. Ing. Lubomír Hnědkovský, CSc.
Ing. Michal Bureš, CSc.
- Soutěžící:** Baránková Eva
Fujan Lukáš
Hollas Daniel
Chmela Jiří
Lanč Marek
Mahnel Tomáš
Rotrekl Jan
Štejfa Vojtěch
- Sekce:** **Fyzikální chemie II.**
Místnost A402, 8.30 hod
- Komise:**
- Předseda:** prof. RNDr. Jiří Kolafa, CSc.
- Členové:** Ing. Štěpán Hovorka, Ph.D.
Ing. Daniel Ondo, Ph.D.
- Soutěžící:** Beran Pavel
Čerhová Marie
Červinka Ctirad

Klajmon Martin
Kubelová Lucie
Radotínský Daniel
Velas Jiří
Vlk Ondřej

Sekce: **Matematické modelování v chemickém inženýrství
posluchárna B III, 8.30 hod**

Komise:

Předseda:

Členové:

prof. Ing. Igor Schreiber, CSc.
Ing. Otto Hadač
zástupce sponzora Ricardo – ing. Lubor Buřič
zástupce sponzora Chemoprojekt
Ing. Michal Vonka
Ing. Jiří Maršálek

Soutěžící:

Antecký Tomáš
Bc. Dudák Michal
Fačkovec Boris
Ferkel Pavel
Hloužek Jakub
Kadlecová Marcela
Konopka Ladislav
Kroupa Martin
Labík Libor
Toulec Miloš

Sekce: **Procesní a chemické inženýrství 1
posluchárna B139, 8.30 hod**

Komise:

Předseda:

Členové:

doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha
Vladislav Nevoral, Ph.D.
zástupce sponzora ŠkodaPower – ing. Zdeněk Jůza
zástupce sponzora Bochemie
Ing. Jitka Čejková
Ing. Josef Chmelař

Soutěžící:

Beránek Pavel
Gubiš Jan
Jakubec Martin
Korčák Miloš
Leskovjan Martin
Roubíčková Tereza
Sarvašová Nina
Smrčka David
Solich Jaroslav
Václavík Marek

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 2

knihovna B141b, 8:30 hod

Komise:

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

Členové: Ing. Oldřich Holeček, CSc.
zástupce sponzora Mondi
zástupce sponzora
Ing. Alexandr Zubov
Ing. Pavel Kovačík

Soutěžící: Dundálek Jan
Fišer Jan
Ira Jiří
Isoz Martin
Kohoutová Štěpánka
Kremláčková Zuzana
Mráček David
Pittermanová Anna
Zygulová Petra

**Sekce: Procesní a chemické inženýrství 3
posluchárna B03, 8.30 hod**

Komise:

Předseda: doc. Ing. Dalimil Šnita, Ph.D.
Členové: Ing. Lenka Schreiberová, CSc.
zástupce sponzora Momentive
zástupce sponzora Lovochemie
Ing. Marek Nebyla
Ing. Jiří Dohnal

Soutěžící: Kolda Jan
Kotala Tomáš
Matuška Petr
Nistor Andra
Roder Pavel
Skala Martin
Štěrbák Martin
Vostal Radek
Vrána Jiří
Zuček Karel

**Sekce: Podnikový management a marketing
posluchárna C11, 8.00 hod**

Komise:

Předseda: doc. Ing. Jaroslava Hyršlová, Ph.D.
Členové: Ing. Jana Dostálová, Ph.D.
Ing. Jakub Dyntar, Ph.D.
Ing. Miroslav Vágner, MBA, Ph.D.

Soutěžící: Bc. Dušková Marie
Bc. Kalfusová Eliška
Bc. Křenovská Barbora
Bc. Loszonsky Gabriel
Bc. Ludvík Miroslav
Bc. Nývltová Lucie
Bc. Pogrebnicenco Tatiana
Bc. Sýkora Roman
Bc. Trčka Filip

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: Baškatová Viktorija
Bc. Kommová Lucie
Kotůčková Soňa
Bc. Kvasničková Eva
Lattenberk Lukáš
Mikeš Jiří
Bc. Rusová Kateřina
Bc. Štěpánková Barbora
Živčáková Martina

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: Čechová Judita
Hájek Michal
Hasal Ludvík
Polák Ondřej
Bc. Rejta Michal
Schatz Martin
Ťupa Ondřej
Vacek Miroslav

Sekce:	Analytická chemie (přednášková) posluchárna A105, 8.00 hod
Komise:	
Předseda:	doc. Ing. Vladimír Setnička, Ph.D.
Členové:	doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D. doc. RNDr. Dr. David Sýkora Dr. Ing. Jindřich Koubek, Ph.D. Ing. Ladislav Tenkl (zástupce firmy Nicolet CZ) Mgr. Filip Dvořák (zástupce firmy P-Lab)
Soutěžící:	Bc. Marek Bot Filip Grelich Bc. Milan Jakubek Bc. Jakub Koktan Bc. Stanislav Kykal Bc. Václav Parchaňský Helena Ryšavá Jakub Sedláček Bc. Danuše Vavřinová Lukáš Vrzal

Sponzoři sekce Analytická chemie:

Nicolet CZ
Beckman Coulter Česká republika
Merck
Siad Czech
P-Lab
RMI
Sigma-Aldrich
Maneko
Chemstar Czech Republic



Partner sekce Analytická chemie:

Národní technické muzeum



Sekce: Analytická chemie

Studium substituovaných jodokarboranů pomocí ESI-MS, CID a IMS

Autor: Marek Bot
Ročník: M1
Ústav: organické chemie a biochemie AV ČR, v. v. i.
Školitel: Dr. habil. Detlef Schröder

Karborany nachází využití jako slabě koordinující anionty pro syntézu superkyselin, při přípravě molekulárních součástí nebo jako nosiče pro cílenou distribuci léků. Tato práce se zabývá studiem substituovaných 1-karba-12-jodo-closo-dodekaborátů pomocí hmotnostní spektrometrie (elektrosprejová ionizace) v kombinaci s IMS (spektroskopie iontové mobility) a CID (kolizemi indukovaná disociace) experimenty. Cílem těchto experimentů je získání informací o vlivu substituentů na vazbu B – I a o chování těchto karboranů při kolizích s inertním plynem. Získané informace by pak měly posloužit právě k prohloubení znalostí v oblasti syntézy a reaktivity tohoto typu molekul.

Sekce: Analytická chemie

Whiteova multireflexní kyveta a její užití v mikrovlnné oblasti

Autor: Filip Grelich
Ročník: B3
Ústav: analytické chemie
Školitel: Prof. RNDr. Štěpán Urban, CSc.

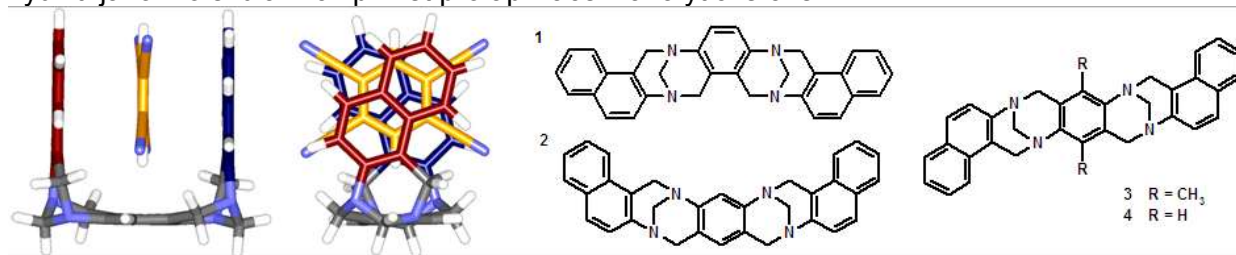
Analytická chemie stopových množství látek v plynech má řadu aplikací v průmyslu, v lékařství, kriminalistice, v analýze životního prostředí, případně při výzkumu atmosféry nebo při výzkumu mnohem vzdálenějších prostředí. Vedle plynové chromatografie, je pro tyto aplikace účinným prostředkem také vysoce rozlišená spektroskopie v mikrovlnné oblasti, která v principu umožňuje rozlišit několik stovek různých stopových molekul vedle sebe. Problematika stopových množství je ekvivalentní k měření absorpčních spekter plynů o nízkých koncentracích, kdy naměřené absorpční linie jsou obvykle velmi málo intenzivní nebo dokonce zanikají v šumu. Obdobně obtížně měřitelné jsou také linie tak zvaných „zakázaných“ přechodů nebo přechodů, jejichž intenzita je blízka nule. Jednou z možností, jak lze zvýšit citlivost měření a umožnit měření stopových koncentrací a zakázaných přechodů, je prodloužení délky optické dráhy pomocí zrcadel například v kyvetě Whiteova typu. Cílem této práce bylo nalézt optimální nastavení zrcadel a změřit absorpční přechod izotopologů oxidu uhelnatého s izotopy kyslíku ^{18}O , resp. ^{17}O (jejichž koncentrace v přirozeném vzorku je oproti izotopologu se standardním kyslíkem ^{16}O 500x, resp. 2500x menší). Odhadovaná délka dosažené efektivní optické dráhy je 36 metrů. V nejbližší době bude tato kyveta používána pro měření zakázaných přechodů vybraných osově symetrických molekul a molekul bez dipólového momentu, popřípadě pro detekci stopových množství molekul v plynech.

Sekce: Analytická chemie

Vazebná studie naftalenových bis-Trögerovýchází pomocí spektroskopie NMR

Autor: Milan Jakubek
Ročník: M2
Ústav: analytické chemie
Školitel: Doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.

Práce navazuje na předchozí výsledky studia potenciálních molekulárních receptorů bisTB **1** a **2**, studií konstitučních isomerů bisTB **3** a **4**, a jejich komplexací s elektronově deficitními analyty v roztoku (CDCl_3). Studovány byly anti i syn diastereoizomery. Titrační experimenty monitorované ^1H NMR spektry ukázaly, že *syn*-bisTB tvoří vždy stabilnější komplexy nežli *anti*-bisTB, a že stabilita komplexů bisTB s 1,2,4,5-tetrakyanobenzenem stoupá v následujícím pořadí: *syn*-**1** ($K_a = 18 \text{ M}^{-1}$), *syn*-**2** ($K_a = 103 \text{ M}^{-1}$), *syn*-**3** ($K_a = 665 \text{ M}^{-1}$), *syn*-**4** ($K_a = 5640 \text{ M}^{-1}$). Výrazně vyšší hodnota K_a nových bisTB derivátů **3** a **4** dává naději na jejich využití jako molekulárních pinzet pro aplikace v analytické chemii.



Sekce: Analytická chemie

Interakce aniontů s porfyrinovými deriváty imobilizovanými na povrch nanočástic ušlechtilých kovů ve vodném prostředí

Autor: Jakub Koktan
Ročník: M1
Ústav: analytické chemie
Školitel: Ing. Pavel Žvátora

Anionty hrají důležitou roli v mnoha biologických a chemických procesech. Z tohoto důvodu je jejich stanovení v přirozeném prostředí jedním ze zajímavých úkolů moderní analytické chemie. K dnešnímu dni byla syntetizována již řada molekul pro selektivní stanovení různých aniontů. Tyto látky však z nejrůznějších příčin často nelze použít při analýzách ve vodných matricích. Tato práce se zabývá studiem interakcí aniontů s alkaloidovými deriváty porfyriu. Porfyrinové deriváty jsou díky rozsáhlé konjugaci dvojných vazeb silné chromofory, a proto lze při sledování interakcí využít UV-Vis spektroskopii, která je rychlá a snadno dostupná. Z důvodu omezené rozpustnosti derivátů porfyriu byly tyto receptory imobilizovány na povrch nanočástic ušlechtilých kovů. Imobilizace byla provedena pomocí iontové interakce dvěma různými způsoby, a to konkrétně přímo s povrchem nanočástic a nebo pomocí bifunkční spojky. Připravené systémy (nanočástice-receptor) byly zkoumány pomocí titrace se síranovým a heparinovým aniontem. Při analýze naměřených dat byl porovnán vliv imobilizace a vlastností použitých nanočástic na interakce připravených systémů s anionty.

Sekce: Analytická chemie

Konformační studie melektinu metodami elektronového a vibračního cirkulárního dichroismu

Autor: Stanislav Kykal
Ročník: M1
Ústav: analytické chemie
Školitel: Doc. Ing. Vladimír Setnička, Ph.D.

Za posledních několik desítek let si stále více druhů mikroorganismů dokázalo vytvořit různé mechanismy, díky kterým se staly rezistentní na antibiotika. V současné době je proto pozornost obrácena na látky s rozdílným mechanismem účinku, a to na antimikrobiální peptidy, které by v budoucnu mohly nahradit konvenční antibiotika a hrát tak významnou roli ve farmaceutickém průmyslu. Biologická aktivita antimikrobiálních peptidů je dána několika parametry, jedním z nejdůležitějších je konformace těchto peptidů.

Cílem této práce bylo studovat konformaci jednoho z potenciálně zajímavých antimikrobiálních peptidů nazvaného melektin. Tento peptid byl získán z jedu kleptoparazitické včely *Melecta albifrons* a je složen z 18 aminokyselin, jejichž sekvence je Gly-Phe-Leu-Ser-Ile-Leu-Lys-Lys-Val-Leu-Pro-Lys-Val-Met-Ala-His-Met-Lys. Konformace nejen tohoto peptidu, ale i jeho syntetických analogů, včetně N-koncových a C-koncových fragmentů, byla studována metodami elektronového (ECD) a vibračního (VCD) cirkulárního dichroismu v různých rozpouštědlech: D₂O, TFE-d₃ a ve směsi TFE-d₃/D₂O (40/60, v/v). Dále bylo zjištěno zastoupení α -helikální konformace v jednotlivých peptidech, neboť právě tato konformace je podstatným faktorem ovlivňujícím jejich antimikrobiální aktivitu.

Sekce: Analytická chemie

Využití kvantově chemických výpočtů NMR spekter při strukturní analýze

Autor: Václav Parchaňský
Ročník: M2
Ústav: analytické chemie
Školitel: Doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.

V případě dostatečného rozlišení lze kovalentní strukturu nesymetrických molekul stanovit použitím NMR experimentů. Naproti tomu u diastereoisomerů symetrických molekul často nastává případ, kdy je sice možné diastereoizomery rozlišit, ale není možné jednoznačně pouze s pomocí NMR experimentů určit jejich strukturu. K rozlišení diastereoizomerů se používají empirická pravidla, jejichž platnost pro nové molekuly není zaručena. Proto byla ověřena shoda empirických pravidel s výsledky výpočtů, které by měly být použitím pro rozlišení diastereoizomerů univerzálnější.

Sekce: Analytická chemie

Enantioseparace derivátů Trögerovýchází kapilární elektroforézou s využitím cyklodextrinů jako chirálních selektorů

Autor: Helena Ryšavá
Ročník: B3
Ústav: analytické chemie
Školitel: RNDr. Ing. Pavel Řezanka, Ph.D.

Trögerovy báze jsou kondenzační sloučeniny aromatických aminů s formaldehydem, jejich chiralita je tvořena dvěma stereogenními atomy dusíku spojenými methylenovou skupinou. Deriváty Trögerovýchází jsou syntetizovány ve formě směsí chirálních diastereoizomerů, které je nutné charakterizovat před jejich následným využitím. Pro tento účel lze použít kapilární elektroforézu, která umožňuje studium Trögerovýchází při minimální spotřebě analytu.

V rámci této práce byly separovány vybrané deriváty Trögerovýchází kapilární elektroforézou. Jako chirální selektory byly použity α -, β - a γ -cyklodextriny. Součástí práce bylo studium závislosti parametrů separace (rozlišení, separační faktor a migrační časy) derivátů Trögerovýchází na chirálním selektoru, jeho koncentraci a na koncentraci organického rozpouštědla.

Sekce: Analytická chemie

Příprava a charakterizace syn-diamino-bis-Trögerovy báze

Autor: Jakub Sedláček
Ročník: B2
Ústav: analytické chemie
Školitel: Doc. Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.

Trögerovy báze vznikají kondenzací arylaminů se zdrojem formaldehydu v kyselém prostředí. Bis-Trögerovy báze jsou tvořené třemi areny spojenými dvěma diazocinovými jednotkami, díky nimž tvoří syn a anti diastereoizomery. Syn diastereoizomer má krajní areny na stejné straně vzhledem k centrálnímu benzenu a strukturně patří mezi molekulární pinzety. Cílem práce byla příprava syn-diamino-bis-Trögerovy báze, z níž bude možné díky reaktivním amino skupinám připravit barevné indikátory na základě molekulárních pinzet. Diastereoizomery připravených dinitro a diamino derivátů bis-Trögerovýchází byly izolovány a charakterizovány pomocí NMR spektroskopie a tenkovrstevné chromatografie. Signály ^1H a ^{13}C NMR spekter byly jednoznačně přiřazeny kombinací 2D NMR spekter gCOSY, gHSQC a gHMBC. Byla ověřena použitelnost empirických pravidel pro určení relativní konfigurace připravených diastereoizomerů. Další výzkum bude směřován k přípravě barevných indikátorů a studiu jejich vlastností.

Sekce: Analytická chemie

Možnosti využití technik povrchem zesílené vibrační spektroskopie při analýze homeopatického přípravku

Autor: Danuše Vavřinová
Ročník: M1
Ústav: analytické chemie
Školitel: Prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka

Metody povrchem zesílené vibrační spektroskopie (povrchem zesílený Ramanův rozptyl a povrchem zesílená infračervená absorpce) umožňují zesílit signál o mnoho řádů. V důsledku toho je za optimalizovaných podmínek možno detegovat i velmi malé koncentrace analytů. Základní podmínkou pro vznik povrchem zesíleného Ramanova rozptylu (SERS) a povrchem zesílené infračervené absorpce (SEIRA) je adsorpce molekul vzorku na nanostrukturovaném kovovém substrátu.

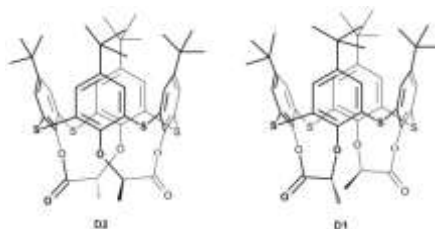
Cílem této práce bylo vyzkoušet možnost využití těchto technik pro detekci složek homeopatického přípravku Chamomilla vulgaris ve srovnání s obdobně prováděnou analýzou extraktu heřmánkového čaje na elektrochemicky pozlacených substrátech. Měřena byla Ramanova spektra při různých excitačních vlnových délkách (633 nm, 785 nm a 1064 nm). Infračervená spektra byla zaznamenávána v reflexním módu s využitím nástavce pro difusní reflexi.

Sekce: Analytická chemie

Studium prostorové struktury inherentně-chirálních diastereomerů přemostěného thiakalix[4]arenu pomocí NMR spektroskopie

Autor: Lukáš Vrzal
Ročník: B3
Ústav: Centrální laboratoře VŠCHT Praha
Školitel: Ing. Hana Dvořáková, CSc., Ing. Jiří Vlach, Ph.D.

Předmětem mé práce bylo určit strukturu inherentně-chirálních diastereomerů thiakalix[4]arenu přemostěného na spodním okraji (D1, D2). Pomocí standardních NMR experimentů (^1H , ^{13}C , COSY, HMQC, HMBC) jsem přiřadil všechny ^1H i ^{13}C rezonance ve strukturách D1 a D2. S využitím nukleárního Overhauserova efektu (NOE) a měřením reziduálních dipolárních interakcí (RDC) jsem potvrdil stereochemické uspořádání obou diastereomerů. Tyto výsledky jsou v případě diastereomeru D1 ve shodě se strukturou vypočtenou pomocí metod molekulové mechaniky (MM2). U diastereomeru D2, vzhledem k možnému dynamickému procesu, který byl prokázán pomocí ^1H i ^{13}C NMR teplotně závislých spekter, nebylo zatím dosaženo jednoznačných výsledků.



Sekce: **Fyzikální chemie I. (přednášková)**

Místnost A125, 9.00 hod.

Komise:

Předseda: prof. RNDR. Petr Voňka, CSc.

Členové: doc. Ing. Lubomír Hnědkovský, CSc.
Ing. Michal Bureš, CSc.

Soutěžící:

Baránková Eva

Fujan Lukáš

Hollas Daniel

Chmela Jiří

Lanč Marek

Mahnel Tomáš

Rotrekl Jan

Štejfa Vojtěch

Sponzoři sekce Fyzikální chemie I.

Amedis (www.amedis.cz)

Anton Paar (www.anton-paar.cz)

Chart-Ferox (www.chart-ferox.com)

Chromservis (chromservis.cz)

Mega (www.mega.cz)

Oerlikon Leybold Vacuum (www.tevak.cz)

Thermo Scientific (www.nicoletcz.cz)

VWR International (cz.vwr.com)

The logo for AMEDIS, featuring the word "AMEDIS" in a blue, stylized, sans-serif font. The letters are outlined, and there is a horizontal line underneath the letters "D" and "I".

Sekce: Fyzikální chemie I.

Nová presná metóda ku stanoveniu rovnováhy kvapalina - para v systémoch obsahujúcich iónovú kvapalinu: aplikácia na 1-butyl-1-methylpyrrolidinium dikyanamid + methanol + methylacetát

Autor: Eva Baránková
Ročník: M2
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Doc. Ing. Vladimír Dohnal, CSc..

Bola zostavená aparátúra a vypracovaný experimentálny postup umožňujúci presné a relatívne rýchle stanovenie izotermnej rovnováhy kvapalina-para viacložkových systémov využívajúci techniku headspace plynovej chromatografie (HS-GC). Vzhľadom k nízkej spotrebe látok je metóda zvlášť vhodná ku štúdiu systémov s iónovými kvapalinami. S použitím novej aparatury a metódy bola stanovená rovnováha kvapalina-pára v binárnych systémoch iónovej kvapaliny 1-butyl-1-methylpyrrolidinium dikyanamidu [BMPYR][DCA] s methanolom a s methylacetátom a v odpovedajúcom ternárnom systéme pri teplote 328.15 K. Dáta pre binárny azeotropický systém methanol + methylacetát boli stanovené už skôr (SVK 2010) inou HS-GC metódou využívajúcou headspace autosampleru. Dáta pre binárne systémy s iónovou kvapalinou boli doposiaľ korelované modelovými vzťahmi bežne užívanými pre roztoky neelektrolytov. Práce na modelovaní i meraní ternárnych dát pokračujú, okrem iného i s cieľom určiť minimálny obsah iónovej kvapaliny eliminujúci azeotropické chovanie systému methanol + methylacetát.

Sekce: Fyzikální chemie I.

Teplotní závislost limitních aktivitních koeficientů ketonů C5 a C6 ve vodě

Autor: Lukáš Fujan
Ročník: M1
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Ing. Štěpán Hovorka, Ph.D.

V rámci hledání přesného popisu teplotních závislostí limitních aktivitních koeficientů byla provedena měření s pěti ketony (2-pentanon, 3-pentanon, 3-methyl-2-butanon, 2-hexanon, 4-methyl-2-pentanon), pro které nebyly v databázích nalezeny dostatečně přesné údaje. Limitní aktivitní koeficienty byly měřeny v teplotním rozmezí 278.15-328.15 K (s krokem 10 K) pomocí metody IGS (inert gas stripping), založené na měření rychlosti eluce těkavé látky z jejího zředěného roztoku proudem inertního plynu. Pro popis teplotní závislosti limitních aktivitních koeficientů byla použita rovnice $\ln \gamma_1^\infty = A + B/\tau + C \cdot \ln \tau$ se třemi nastavitelnými parametry (A, B, C) a bezrozměrnou teplotou τ ($\tau = T/298.15$). Z parametrů získaných metodou nejmenších čtverců byly vypočítány hodnoty parciálních molárních dodatkových veličin $\bar{H}_1^{E,\infty}$ a $\bar{C}_{p,1}^{E,\infty}$ v nekonečném zředění a srovnány s jejich hodnotami z kalorimetrických měření provedených na ÚFCH.

Sekce: Fyzikální chemie I.

Kvantová termodynamika: Výpočet tepelných kapacit pomocí dynamiky s dráhovými integrály (PIMD)

Autor: Daniel Hollas
Ročník: M1
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Doc.RNDr. Petr Slaviček, Ph.D.

Tepelná kapacita představuje jednu z mála veličin, kterou kvantová povaha jader ovlivňuje už při běžných teplotách. Běžně prováděné teoretické výpočty tepelných kapacit plynů nejsou použitelné pro kondenzovanou fázi. Navíc harmonická aproximace selhává u molekul, ve kterých dochází k vzájemné rotaci skupin atomů (např. lineární alkany).

Jinou možností je využití molekulárně dynamických simulací. Pro výpočet termodynamických veličin systému se zahrnutím kvantové povahy jader je možné s výhodou použít alternativní formulace kvantové teorie pomocí dráhových integrálů. Výsledná metoda (Path Integral Molecular Dynamics - PIMD) je použitelná pro plyny i kondenzované fáze. Výhodou PIMD je absence aproximací. Při použití dostatečně přesné ab initio metody pro generování hyperplochy potenciální energie konverguje PIMD simulace k přesnému kvantově mechanickému řešení. Nevýhodou je řádově vyšší výpočetní náročnost.

Prvotním úkolem tohoto projektu byla implementace výpočtu tepelných kapacit do stávajícího programu pro PIMD simulace, který byl vyvinut v naší laboratoři. Kód byl otestován na simulacích dvouatomových plynů za použití aproximace harmonického oscilátoru. Byla dosažena dobrá shoda s experimentálními daty, včetně vystihnutí teplotní závislosti.

Sekce: Fyzikální chemie I.

Modelování spektroskopických vlastností hydratovaného elektronu

Autor: Jiří Chmela
Ročník: M1
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Doc. RNDr. Petr Slaviček, Ph.D.

Solvatovaný, zvláště pak hydratovaný elektron je důležitou reaktivní částicí radiační chemie: hraje roli v reakcích ovlivňujících stabilitu nukleových kyselin a bílkovin v buňkách, působí jako redukční species v organické syntéze a spekuluje se o jeho významu pro heterogenní procesy vedoucí k destrukci ozónové vrstvy. Ačkoliv je hydratovaný elektron znám přes 50 let, jeho struktura je stále předmětem vášnivých kontroverzí.

Má práce si klade za cíl přispět k určení struktury solvatovaného elektronu pomocí metod kvantové chemie a molekulového modelování. Ve své práci uvažuji tři klastrové modely hydratovaného elektronu: kavitový model, iontový pár kation (konkrétně H_3O^+)..e⁻ a model záporně nabitého vodního klastru. Ve všech třech případech jsem modeloval absorpční a fotoelektronová spektra. Výsledky byly srovnány s experimentem.

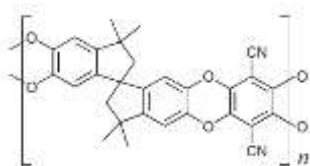
Výše zmíněné výpočty poukázaly na nutnost vývoje některých nových technik, zejména v souvislosti s konečnou velikostí mých modelů a difúzním charakterem hydratovaného elektronu. Začal jsem tudíž vyvíjet model „proměnlivého pružného okraje“ (fluctuating elastic boundary, FEB), ve kterém obklopíme studovaný kluster sítí (klecí) kvazičástic. Tyto kvazičástice budou reprezentovány repulzivním elektronovým pseudopotenciálem, což by mělo zabránit nepřirozenému vypuzení elektronu na povrch klastru.

Sekce: Fyzikální chemie I.

Vliv nanoplňiva ZIF-8 na sorpci plynů v polymerech s vnitřní mikroporozitou (PIM)

Autor: Marek Lanč
Ročník: B3
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Ing. Karel Friess, Ph.D.

V předkládané práci byla studována sorpce plynů v plochých membránách z polymeru s vnitřní mikroporozitou (PIM). Tyto polymery vykazují vlastnosti charakteristické jak pro porézní, tak i pro neporézní materiály. Konkrétně byl testován PIM-1, syntetizovaný z 5,5',6,6'-tetrahydroxy-3,3,3',3'-tetramethyl-1,1'-spirobisindanu a tetrafluoro-tereftalonitrilu. Sorpční experimenty byly prováděny při 25°C gravimetricky s použitím McBainových spirálních vážek v nově zkonstruované vysokotlaké cele. Následně byl studován vliv porézního nanoplňiva ZIF-8 na sorpční vlastnosti membrán pro vybrané plyny (CO₂, CH₄). Pro posouzení kvalitativního vlivu tohoto plniva byla uskutečněna měření na vzorcích s 16, 32, 48 a 60 hm.% nanoplňiva. Z naměřených údajů byly vypočteny sorpční a difúzní koeficienty membrána/plyn.



Obr.1 Schématický vzorec polymeru s vnitřní mikroporozitou PIM-1

Sekce: Fyzikální chemie I.

Vývoj spolehlivých dat pro polycyklické aromatické uhlovodíky

Autor: Tomáš Mahnel
Ročník: B3
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Ing. Michal Fulem, Ph.D.

Polyaromatické uhlovodíky jsou látky nepříznivě ovlivňující lidské zdraví a životní prostředí, a proto jim je dlouhodobě věnována zvýšená pozornost a úsilí predikovat a modelovat jejich distribuci mezi jednotlivé složky životního prostředí. K tomu je nezbytně nutná znalost tlaku nasycených par, a to pro potřeby environmentálních modelů obvykle za pokojových teplot – nejčastěji se jedná o tlaky nasycených par nad tzv. podchlazenou kapalinou. Ty lze určit buď nepřímo metodou plynové chromatografie na základě znalosti redukováných retenčních časů dané látky a standardu nebo kalorimetrickým měřením její teploty tání, entalpie tání, tepelných kapacit a tlaku nasycených par nad pevnou fází a následným přepočtem na tlak nasycených par nad podchlazenou kapalinou. Cílem této práce je analýza literárních dat a jejich doplnění v rámci možností buď experimentálně nebo na základě metod výpočetní chemie či odhadových metod.

Sekce: Fyzikální chemie I.

Stanovení termochemických veličin diethylaminu

Autor: Jan Rotrekl
Ročník: M2
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Dr. Ing. Pavel Vrbka

Pro zpracování dřívějších experimentálních dat o rovnováze kapalina – pevná látka u směsí diethylamin + iontová kapalina je nutná i entalpie tání diethylaminu, jejíž hodnotu se nepodařilo nalézt v literatuře. Náplní této práce tedy bylo experimentální stanovení hodnoty této veličiny.

Ke stanovení byla aplikována metoda diferenciální skenovací kalorimetrie (DSC). Vzorkovnice kalorimetru byly plněny a uzavírány za snížené teploty, aby bylo zajištěno hermetické slisování víčka a dna vzorkovnice, což se u této látky zpočátku vůbec nedařilo. Za tímto účelem bylo zkonstruováno speciální chladicí zařízení a plnění probíhalo v suché a inertní atmosféře rukavicového boxu. Opakované kontrolní vážení naplněných vzorkovnic prokázalo jejich úplnou těsnost. Pro diethylamin byly poté stanoveny následující fyzikálně-chemické veličiny: teplota tání, entalpie tání a izobarická tepelná kapacita v tuhé i kapalně fázi.

Sekce: Fyzikální chemie I.

Thermodynamic study of α -pinene and its derivatives

Autor: Vojtěch Štejfá
Ročník: M1
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Ing. Michal Fulem, Ph.D.

This project is a part of ongoing collaboration of the two workplaces, Department of Physical Chemistry of Institute of Chemical Technology, Prague and Department of Chemistry and Biochemistry, of the University of Porto, Portugal.

The project presents a systematic study of vapor pressures and related properties of selected monoterpenes. Four similar bicyclic compounds were studied up to now: α -pinene, β -pinene, cis-verbenol and S-verbenone. Importance of these compounds is in their participation in BVOC amount and use in food processing and perfume industry. These applications request knowledge of basic thermodynamic properties at ambient temperatures. Vapor pressures of phases present at ambient temperatures were determined using static method. Phase change enthalpy measurements were performed using Calvet calorimeter. Heat capacities were measured with mDSC calorimeter and in some cases drop calorimeter. Ideal gas heat capacities were theoretically calculated to complete the list of thermodynamically linked properties.

Three data evaluating programs in Agilent VEE were written to reduce time demands and inaccuracy brought in by the human factor.

Sekce: **Fyzikální chemie II. (přednášková)**
Místnost A402, 8.30 hod

Komise:

Předseda: prof. RNDr. Jiří Kolafa, CSc.

Členové: Ing. Štěpán Hovorka, Ph.D.

Ing. Daniel Ondo, Ph.D.

Soutěžící:

Beran Pavel

Cerhová Marie

Červinka Ctirad

Klajmon Martin

Kubelová Lucie

Radotínský Daniel

Velas Jiří

Vlk Ondřej

Sponzoři sekce Fyzikální chemie II.

Amedis (www.amedis.cz)

Anton Paar (www.anton-paar.cz)

Chart-Ferox (www.chart-ferox.com)

Chromservis (chromservis.cz)

Mega (www.mega.cz)

Oerlikon Leybold Vacuum (www.tevak.cz)

Thermo Scientific (www.nicoletcz.cz)

VWR International (cz.vwr.com)

The logo for AMEDIS, featuring the word "AMEDIS" in a blue, stylized, sans-serif font. The letters are connected, and there is a horizontal line underneath the entire word.

Sekce: Fyzikální chemie II.

Popis mechanismu aktivace malých molekul frustrovanými Lewisovými páry pomocí analýzy doménově průměrovaných Fermiho děr

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

Jeden z největších problémů provedení hydrogenace je, že většina pro ni dnes používaných katalyzátorů pracuje na bázi vzácných transičních kovů. Objev možnosti aktivace vodíku pomocí frustrovaných Lewisových párů (FLP), proto vyvolal obrovský zájem, který vedl k navržení či syntéze velkého množství různých FLP použitelných nejen k aktivaci vodíku, ale i celé řady dalších malých molekul. Vzhledem k značnému syntetickému potenciálu FLP, byla takovému reakcím věnována značná pozornost i ze strany chemické teorie. Řada výpočetních studií se snažila především o detailní objasnění mechanismu FLP aktivace molekulárního vodíku, avšak mechanismus tohoto procesu do této chvíle nebyl uspokojivě popsán. V naší práci se snažíme přispět k jeho objasnění pomocí analýzy tzv. doménově průměrovaných Fermiho děr a zobecněné populační analýzy. Na základě uvedených metodik lze navrhnout nový mechanismus, ve kterém k aktivaci vazby H-H dochází díky současnému přenosu 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. Aplikace uvedených metodik na další typy FLP aktivací potvrzuje, že uvedený model je obecný a platí i pro jiné typy vazeb.

Sekce: Fyzikální chemie II.

Experimentální stanovení limitních aktivitních koeficientů 1-oktanolu ve vodě

Autor: Marie Cerhová
Ročník: B3
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Ing. Dana Fenclová, CSc.

Obsahem této práce bylo experimentální stanovení limitních aktivitních koeficientů (γ^∞) 1-oktanolu ve vodě pomocí saturační metody (IGS) v intervalu teplot 293-333 K. Z naměřených údajů byly spolu s literárními daty o rovnováze kapalina-pára v nekonečném zředění a spolu s literárními kalorimetrickými údaji vyhodnoceny parametry rovnice, která popisuje teplotní závislost limitního aktivitního koeficientu 1-oktanolu ve vodě od teploty tání až po normální teplotu varu vody.

Sekce: Fyzikální chemie II.

Metodika a aplikace výpočtu termodynamických veličin ideálního plynu metodami teoretické chemie

Autor: Ctirad Červinka
Ročník: M2
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Ing. Michal Fulem, Ph.D.

Práce navazuje na bakalářskou práci a článek přijatý k publikaci, jejichž cílem bylo statisticky vyhodnotit možnosti kvantové chemie a statistické termodynamiky, co se týče přesnosti vypočtených hodnot tepelných kapacit pro ideální plyn. Práce se zaměřuje na homologickou řadu α,ω -diaminů, jež mají význam v průmyslu i jako biogenní látky. Pro tuto skupinu látek byly aplikovány čtyři různě složité výpočetní modely, spočítány hodnoty izobarických tepelných kapacit a entropií a výsledky všech modelů navzájem srovnány. V omezené míře bylo rovněž provedeno srovnání vypočtených hodnot s experimentálními daty s cílem posouzení vhodnosti použití jednotlivých modelů pro α,ω -diaminy. Druhá část práce zahrnovala vytvoření vlastního programu pro numerické řešení jednorozměrné Schrödingerovy rovnice s obecným potenciálem. Tento program byl úspěšně otestován při řešení molekulových vibrací, pro něž je rovněž dostupné analytické řešení. Předpokládá se použití programu pro získávání energetických hladin vnitřních rotací molekul.

Sekce: Fyzikální chemie II.

Predikce rovnováhy kapalina-kapalina pro dvoufázové reakční prostředí

Autor: Martin Klajmon
Ročník: M1
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Ing. Pavel Morávek, Ph.D.

Dvousložkové kapalně systémy složené z fluorované látky a organického rozpouštědla se využívají jako média pro moderní efektivní organické syntézy – tzv. reakce ve dvoufázovém reakčním prostředí. Tato práce se zabývá výpočetním stanovením vzájemné rozpustnosti takových systémů, a to pomocí odhadové příspěvkové metody UNIFAC a stavové rovnice PC-SAFT. Celkem byly predikovány rozpustnostní křivky sedmdesáti vytipovaných systémů, z nichž mnohé by díky svým vlastnostem mohly splňovat aplikační požadavky reakcí ve dvoufázovém prostředí. Právě takové systémy lze doporučit k dalšímu experimentálnímu přezkoumání.

Jelikož výsledky získané z rovnice PC-SAFT se zvolenou konstantní hodnotou binárního interakčního parametru k_{12} nejsou vždy uspokojivé, byla jeho teplotní závislost u vybraných systémů ještě zjištěna pomocí výpočetního programu ze známých literárních experimentálních dat o vzájemné rozpustnosti.

Sekce: Fyzikální chemie II.

Fotodisociace dusičnanového aniontu

Autor: Lucie Kubelová
Ročník: M2
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Doc. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.

Práce je zaměřena na modelování fotochemie dusičnanového aniontu ve vodných kapičkách. Fotodisociace dusičnanového aniontu představuje klíčovou reakci v chemii troposféry, vedoucí v konečném důsledku ke tvorbě nejdůležitějšího oxidačního činidla v atmosféře, OH radikálu.

S pomocí metod teoretické chemie jsem v této práci modelovala absorpční spektra NO_3^- a provedla jsem výpočty relevantních částí hyperploch potenciální energie tohoto aniontu. Cílem mé práce bylo najít vhodnou metodu pro výpočet absorpčních spekter dusičnanu a menších dusičnanových klastrů. K tomu bylo nutné prozkoumat v jaké míře dochází k narušení symetrie vlivem molekulových vibrací a solvatací. K výpočtu absorpčních spekter jsem proto využívala různých metod popisu kvantových efektů a porovnáním s experimentem se snažila nalézt nejdůvěryhodnější metodu. Dále jsem v rámci své práce modelovala hyperplochy potenciální energie pro popis chování dusičnanu po elektronové excitaci, vysvětlující nízký kvantový výtěžek fotodisociace NO_3^- .

Sekce: Fyzikální chemie II.

Sorpce směsí par v polymerních membránách s velkým volným objemem

Autor: Daniel Radotínský
Ročník: M2
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Ing. Karel Friess, PhD.

Cílem této práce je porovnání hodnot transportních parametrů organických par v polymerních membránách získaných pomocí gravimetrické metody a měřením na aparatuře vybavené infračerveným spektrometrem. Ke stanovení sorpce par čistých organických látek se s úspěchem využívá gravimetrická metoda. Jelikož touto metodou není možné rozlišit sorpci jednotlivých složek z jejich směsí, není zmíněná metoda vhodná k měření sorpce směsí. Tato skutečnost byla důvodem ke konstrukci nové sorpční aparatury, která je vybavena IČ spektrometrem. Jelikož každá látka absorbující v IČ oblasti má charakteristické spektrum, je možné z úbytku absorpce během sorpčního měření vyhodnotit sorpci dané složky z příslušné směsi.

V této práci byla studována sorpce par a jejich směsí (C_1 - C_4 alkoholy) v plochých polymerních membránách z kopolymeru 2,2-bis(trifluoromethyl)-4,5-difluoro-1,3-dioxolu (87%) s tetrafluoroethylenem (13%) {Teflon AF 2400} a z polymeru s vnitřní mikroporozitou {(PIM-1}, připraveného z 5,5',6,6'-tetrahydroxy-3,3',3'-tetramethyl-1,1'-spirobisindanu a tetrafluorotereftalonitrilu.

Sekce: Fyzikální chemie II.

Měření a predikce rozpustností vybraných léčiv v organických rozpouštědlech

Autor: Jiří Velas
Ročník: M1
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Doc. Ing. Karel Řehák, CSc.

Jednou z esenciálních potřeb při optimalizaci, či návrhu průmyslových separací léčivých složek z preparačních roztoků je znalost rozpustností těchto látek v co nejširším spektru rozpouštědel. Tato práce popisuje jednu z možných metod určení rozpustností pevných organických látek a zabývá se metodikou kvalifikovaného výběru rozpouštědel založeném na modelu NRTL-SAC. Cílem práce bylo experimentální stanovení rozpustnostních dat vybraných léčiv a odhad jejich rozpustností v dalších rozpouštědlech. V experimentální části práce byla u cloroxinu a mirtazapinu naměřena rozpustnostní data v 5-ti rozpouštědlech při různých teplotách. Tato data byla následně zpracována vytvořenými programy sloužícími pro odhad rozpustností a pro optimalizaci parametrů NRTL-SAC modelu. Výpočty byly získány rozpustnosti cloroxinu, a mirtazapinu v dalších 57 rozpouštědlech při 3 teplotách. V práci je rovněž popsáno řešení další dílčí úlohy, a to měření teplot a entalpií tání diferenčním kalorimetrem, přičemž takto získané údaje byli dalším možným vstupem do optimalizačního programu.

Sekce: Fyzikální chemie II.

Měření tepelných kapacit metodou diferenční skenovací kalorimetrie s modulací teploty

Autor: Ondřej Vlk
Ročník: M1
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Ing. Michal Fulem, Ph.D.

V návaznosti na předchozí práce s kalorimetrem TA Q1000, kde byla ověřována použitelnost různých metod měření tepelných kapacit diferenční skenovací kalorimetrií, se jevila metoda s modulací teploty (MDSC) jako nejvhodnější. Tato metoda umožňuje separování na tzv. „vratné a nevratné“ tepelné kapacity, přičemž „nevratná“ složka odpovídá kinetickým dějům. Modulaci teploty v závislosti na čase lze vyjádřit rovnicí $T = T_0 + \beta \cdot t + a \cdot \sin(2 \cdot \pi \cdot t / P)$. Cílem této práce bylo ověřit vliv hodnot amplitudy a periody modulací (a , P) na přesnost a opakovatelnost měření tepelných kapacit. Látky použité pro měření byly antracen a difenylether, u kterých jsou známa dostatečně přesná tabelovaná data a zároveň se jejich použití osvědčilo v předchozí práci.

Sekce: **Matematické modelování v chemickém inženýrství
posluchárna B III, 8.30 hod**

Komise:

Předseda: Prof. Ing. Igor Schreiber, CSc.

Členové: Ing. Otto Hadač

zástupce sponzora Ricardo – ing. Lubor Buřič

zástupce sponzora Chemoprojekt

Ing. Michal Vonka

Ing. Jiří Maršálek

Soutěžící:

Antecký Tomáš

Bc. Dudák Michal

Fačkovec Boris

Ferkl Pavel

Hloužek Jakub

Kadlecová Marcela

Konopka Ladislav

Kroupa Martin

Labík Libor

Toulec Miloš

Sponzoři sekce Matematické modelování v chemickém inženýrství

Bochemie a.s.
GlassService
Chemoprojekt, a.s.
Lonza Biotec s.r.o.
Lovochemie, a.s.
MemBrain s.r.o.
Momentive Specialty Chemicals, a.s.
Mondi Štětí, a.s.
Ricardo Prague sro.
ŠkodaPower



Sekce: Matematické modelování v chemickém inženýrství

Vliv modelu pro koeficient odporu na CFD simulaci suspendace v mechanicky míchané nádobě

Autor: Tomáš Antecký
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

Náplní práce byla studie suspendace pevné fáze v mechanicky míchané nádobě pomocí počítačové dynamiky tekutin. Práce se především zaměřuje na různé možnosti popisu mezifázové odporové síly, která významným způsobem ovlivňuje kvalitu výsledné vícefázové simulace. Bylo vyzkoušeno několik korelací pro koeficient odporu vyvinutých pro turbulentní oblast proudění. Zmíněné modely však nejsou dostupné v použitém simulačním softwaru ANSYS FLUENT, a proto byly v rámci studie implementovány v podobně uživatelsky definovaných funkcí. Na závěr byly představeny a porovnány dosavadní výsledky získané pomocí CFD simulace pro odlišně zvolené korelace koeficientu odporu.

Sekce: Matematické modelování v chemickém inženýrství

3D modelování porézní katalytické vrstvy na mikroúrovni

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

Vysoké ceny platiny, rhodia a paladia přispívají ke snaze o optimalizaci množství použitého aktivního kovu v heterogenních katalyzátorech při zachování provozních vlastností. Pomocí počítačové simulace lze stanovit vliv difuzních omezení konverze v závislosti na porézní struktuře katalytické vrstvy. Skutečný porézní materiál je v digitální podobě reprezentován kulovými částicemi o dané distribuci velikostí, které jsou nejprve náhodně rozmístěné v prostoru a následně stlačené na hodnotu naměřené makroporozity. Tento proces odpovídá skutečné přípravě vrstvy ze suspendovaných mikročástic nosiče katalyzátoru.

Cílem práce bylo zrekonstruovat skutečné vzorky katalyzátorů do podoby 3D digitálního porézního média, provést simulace transportu a oxidace CO v katalytické vrstvě, a získat tak tabulky efektivních rychlostí reakce a difúze v jednotlivých vzorcích. S využitím těchto dat pak byly provedeny simulace celého kanálku monolitu a předpovězeno makroskopické chování reaktoru – tzv. křivka zapálení. Pro většinu vzorků bylo dosaženo velmi dobrého shody s naměřenými daty.

Sekce: Matematické modelování v chemickém inženýrství

Vývoj programového vybavenia pre analýzu komplexných reakčných systémov: príklad aplikácie na prietokový systém H_2O_2 - $\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$ - SO_3^{2-}

Autor: Boris Fačkovec
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: prof. Ing. Igor Schreiber, CSc.

Analýza stechiometrických sítí (SNA) predstavuje systematický prístup štúdia komplexných reakčných systémov, umožňujúci popísať kvalitatívne črty siete bez nutnosti znalostí rychlostných konštánt jednotlivých reakcií. Cieľom práce je vyvinúť programové vybavenie umožňujúce efektívne využitie SNA pri skúmaní reálnych systémov. Veľkým problémom SNA je exponenciálne škálovanie časovej náročnosti s počtom reakcií. V rámci projektu boli navrhnuté vysoko efektívne implementácie a modifikácie obvykle používaných algoritmov, znižujúce výpočtovú a pamäťovú náročnosť, a zvyšujúce spoľahlivosť určenia stability, resp. nestability podsietí. Vysledná metodológia bude ilustrovaná na príklade zjednodušeného prietokového systému H_2O_2 - $\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$ - SO_3^{2-} publikovaného v práci „Chaotic pH Oscillations in the Hydrogen Peroxide-Thiosulfate-Sulfite Flow System, Rabai G., Hanazaki I., J. Phys. Chem. A 1999, 103, 7268-7273“.

Sekce: Matematické modelování v chemickém inženýrství

Sdílení tepla v heterofázových materiálech

Autor: Pavel Ferkl
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Juraj Kosek, Richard Pokorný

Popis sdílení tepla v heterofázových prostředích jako jsou polymerní pěny nebo aerogely zahrnuje celou řadu jevů, jejichž význam je třeba pečlivě uvážit. V těchto materiálech je třeba uvažovat kombinované sdílení tepla vedením molekulami v celách, fonony v pevné fázi a zářením fotony přes celý materiál. Tepelné záření může být v materiálu absorbováno, znovu vyzářeno, rozptýleno nebo odraženo na fázovém rozhraní. Pro studium výše zmíněných jevů byly na základě bilančních a transportních vztahů vyvinuty jedno- i vícerozměrné matematické modely. Dále byly popsány numerické metody pro řešení soustav parciálních diferenciálních rovnic. V práci je diskutován vliv spektrálních vlastností heterofázových materiálů na jejich tepelně-izolační vlastnosti. V pěnách s velkou porozitou se radiace může podílet i více než 30% na celkovém tepelném toku. V takovýchto pěnách můžeme navíc pozorovat nelineární teplotní profil. V souladu s experimentálními daty naše modely předvídají minimální tepelnou vodivost při určité porozitě pěny. Konečným cílem tohoto projektu je výpočet tepelné vodivosti nano a mikrocelulárních materiálů v závislosti na jejich struktuře.

Sekce: Matematické modelování v chemickém inženýrství

CFD simulace procesu denitrifikace spalin metodou SNCR

Autor: Jakub Hloužek
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Pavlína Basařová

Jedním ze způsobů snižování emisí oxidů dusíku, vznikajících v průmyslových kotlích, je aplikace selektivní nekatalytické redukce (SNCR). Tato práce je zaměřena na ověření možnosti použití počítačové dynamiky tekutin pro popis procesu denitrifikace spalin pomocí metody SNCR. Simulace je kompletně provedena v programu ANSYS FLUENT. Numerická simulace zahrnuje dvě vlastní fáze. První fázi tvoří samostatný výpočet spalování pevného paliva v kotli se zahrnutou tvorbou oxidů dusíku. Ve druhé fázi výpočtu je do výpočetní geometrie zahrnuta injektaž redukčního činidla. Pomocí implementovaného modelu SNCR je řešena změna koncentrace oxidů dusíku na výstupu ze sledované geometrie. Výsledná koncentrace vystupujícího plynu, zjištěná pomocí numerické simulace, je porovnána s materiálovou bilancí reagujících látek.

Sekce: Matematické modelování v chemickém inženýrství

Přenos signálu v astrocytech šířením reakčně-difúzních Ca^{2+} vln

Autor: Marcela Kadlecová
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Prof. Ing. Igor Schreiber, CSc.

Nervový systém se skládá ze dvou druhů buněk – neuronů a glií, jež jsou stejnou měrou zodpovědné za jeho správnou funkci. Astrocyty jsou charakteristické hvězdčovitě globové buňky, které jsou z hlediska struktury nejčastěji se vyskytujícím typem buněk v celém centrálním nervovém systému. Astrocyty mají na své membráně receptory pro mnoho neurotransmiterů, jejichž aktivace vede k oscilacím Ca^{2+} . Tyto oscilace indukují uvolnění chemických transmiterů jako je glutamát, D-serin a ATP. Astrocyty se také přímo podílejí na regulaci signalizace mezi neurony a poskytují živiny do nervové tkáně. Mnoho základních fyziologických procesů je řízeno vápníkem. Primární roli však hraje Ca^{2+} jako intra- nebo intercelulární posel nesoucí informaci. Sousední buňky jsou propojeny tzv. volnými spoji, které umožňují vzájemný přenos Ca^{2+} vln, molekul a iontů. Pomocí těchto volných spojů se Ca^{2+} vlny šíří nejenom uvnitř buňky, ale jsou schopny propagace i do větších vzdáleností. Pro simulační studii byl vybrán deterministický model s typem komunikační cesty přes volné spoje. Ca^{2+} vlny se šíří v reakčně-difúzním prostředí pomocí uměle vyvolané perturbace uvnitř jedné buňky. Matematický model byl vyvinut za účelem analýzy vzájemného působení procesů zapojených do propagace vln a bližšího porozumění dynamice Ca^{2+} vln.

Sekce: Matematické modelování v chemickém inženýrství

Modelování osmotického transportu v porézních membránách

Autor: Ladislav Konopka
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Juraj Kosek, Richard Pokorný

Tato práce se zabývá matematickým modelováním transportních procesů, konkrétně osmózou, elektroosmózou a hydraulickým tokem v tenké kapiláře (mikrokanálku). Takovou kapiláru bereme jako první aproximaci pro studium vlastností porézních membrán, které se používají například při elektrodialýze, v palivových článcích a podobně. Hlavním cílem práce je studium osmotického toku, který v takových prostředích způsobuje transport rozpouštědla (např. vody) mezi dvěma médii oddělenými iontově-výměnnou membránou. Na několika modelových příkladech je ukázán vliv osmózy na koncentrační, potenciálové a rychlostní pole v kapiláře. Výsledky ukazují, že osmóza může často významně ovlivňovat efektivitu celého separačního procesu.

Sekce: Matematické modelování v chemickém inženýrství

Studium aglomerace koloidních částic metodou diskrétních elementů

Autor: Martin Kroupa
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Dr. Ing. Juraj Kosek, Ing. Michal Vonka

Koloidní systémy se vyskytují v mnoha odvětvích chemického průmyslu. Znalost mechanismů jejich aglomerace je nezbytná pro realistický popis jevů jako jsou například emulzní či suspenzní polymerace, agregace sypkých hmot, zachycení částic v nanofiltrech a další. Mechanismy aglomerace koloidních částic stejně jako vliv různých faktorů na její průběh nejsou dosud přesně známy. Program použitý v této práci popisuje vzájemné silové poměry v systému pomocí Derjaguin–Landau–Verwey–Overbeek teorie, Hookeova zákona a Stokesova zákona za použití metody diskrétních elementů. Tento program je založen na druhém Newtonově zákoně a uvažuje kombinace sil popsanych výše zmíněnými teoriemi. S jeho pomocí byla studována dynamika interakce dvou nebo mnoha částic s důrazem na charakterizaci faktorů vedoucích k aglomeraci. Tato práce navazuje na dřívější studie a představuje další krok k bližší charakterizaci koloidních systémů a k možnosti předpovídat jejich chování a stabilitu na základě jejich vlastností.

Sekce: Matematické modelování v chemickém inženýrství

Vyhodnocení objemového koeficientu přestupu hmoty při metodě záměny plynů

Autor: Libor Labík
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Tomáš Moucha, Dr.

Cílem práce bylo setavit model popisující průběhy koncentrací kyslíku v kapalině a plynu v mechanicky míchaném probublávaném fermentoru po skokové záměně koncentrace plynu na vstupu. Na jeho základě byl vytvořen program pro vyhodnocení objemového koeficientu přestupu hmoty $k_L a$. Dále tímto programem byla vyhodnocena data z experimentů a byla porovnána s výsledky z dynamické tlakové metody. Výsledky byly porovnány s obdobnými pokusy provedenými na fermentoru laboratorního měřítka. Ukázalo se, že metoda záměny plynů je nevhodná pro fermentory obou měřítek, z důvodu přílišné citlivosti na stanovení zádrže při vyšších otáčkách míchadel.

Sekce: Matematické modelování v chemickém inženýrství

Modelování galvanických článků

Autor: Miloš Toulec
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Dr. Ing. Juraj Kosek, Ing. Alexandr Zubov

Tato práce se zabývá matematickým modelováním dynamiky primárních a sekundárních galvanických článků (baterií). Model je formulován jako jednorozměrný, přičemž jeho kostrou je látková bilance iontů společně s Poissonovou rovnicí pro výpočet rozložení potenciálu. Transport iontů je uvažován mechanismem difúze a migrace. Výsledná soustava parciálních diferenciálních rovnic je diskretizována metodou konečných objemů, přičemž výpočetní síť je výrazně zhuštěna v oblasti elektrod. Model je sestaven dostatečně obecně, aby mohl být aplikován na popis a studium chování různých typů článků, v této práci byl jako konkrétní systém zvolen klasický olověný akumulátor. V současné fázi vývoje je již model schopen predikovat zátěžovou charakteristiku baterie (tj. závislost svorkového napětí na množství odebíraného proudu) a do budoucna se počítá s možností srovnání výsledků simulací s experimentálními daty.

Sekce:	Procesní a chemické inženýrství 1 posluchárna B139, 8.30 hod
Komise:	
Předseda:	doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha
Členové:	Vladislav Nevoral, Ph.D. zástupce sponzora ŠkodaPower – ing. Zdeněk Jůza zástupce sponzora Bochemie Ing. Jitka Čejková Ing. Josef Chmelař
Soutěžící:	Beránek Pavel Gubiš Jan Jakubec Martin Korčák Miloš Leskovjan Martin Roubíčková Tereza Sarvašová Nina Smrčka David Solich Jaroslav Václavík Marek

Sponzoři sekce Procesní a chemické inženýrství 1

Bochemie a.s.
GlassService
Chemoprojekt, a.s.
Lonza Biotec s.r.o.
Lovochemie, a.s.
MemBrain s.r.o.
Momentive Specialty Chemicals, a.s.
Mondi Štětí, a.s.
Ricardo Prague sro.
ŠkodaPower



Sekce: Procesní a chemické inženýrství 1

Optimalizace technologie výroby mikroelektrodových polí

Autor: Pavel Beránek
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jiří Lindner, Ph.D.

V mikrofluidních systémech lze realizovat řadu procesů – od směšování přes separační procesy a chemické reakce, ale také jejich kombinace, které vedou ke komerčně využitelným aplikacím (mikroreaktory, DNA chipy aj.). Řada procesů v mikroměřítku probíhá odlišně ve srovnání s analogickými procesy v běžném měřítku.

Pro objasnění příčin těchto odlišností je nutné provést experimenty zahrnující měření veličin pomocí polí mikroelektrod. V současné době je snaha takové senzory zmenšovat, s klesajícími rozměry však roste náročnost jejich výroby. Defekty způsobující nefunkčnost zařízení nejsou výjimkou a jejich přítomnost není vždy na první pohled patrná.

V práci jsou popsány některé možnosti eliminace vzniku vad při výrobě průtočného senzoru pro měření elektrické vodivosti a ukázána detekce vadných mikroelektrod pomocí impedanční spektroskopie.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 1

Konstrukční návrh kolony se smáčenou stěnou

Autor: Jan Gubiš
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. František Jonáš Rejl, Ph.D., Ing. Jan Haid

V laboratoři sdílení hmoty byla vyvinuta tzv. profilová metoda pro získávání objemových koeficientů přestupu hmoty $k_L a$, $k_G a$ na výplních za destilačních podmínek. Závislosti těchto veličin na průtoku fází poskytované profilovou metodou jsou však v rozporu s obecně přijímanými představami a je tedy zamýšleno provést ověření této metodiky v jednodušším experimentálním uspořádání. Jako nejvhodnější aparát se jeví kolona se smáčenou stěnou, neboť mezifázová plocha dosahovaná v tomto zařízení je známá a shodná pro různé průtoky fází a pro absorpční i destilační podmínky. Profilová metoda v tomto uspořádání pak umožňuje stanovení přímo hodnoty koeficientů přestupu hmoty (k_G , k_L) a jejich závislosti na průtocích fází pro destilační podmínky, zatímco experimenty se standardními absorpčními systémy poskytují obdobné výsledky za podmínek absorpce. Cílem práce je navrhnout experimentální kolonu se smáčenou stěnou, kterou bude možné provozovat za absorpčních/desorpčních i destilačních podmínek a bude poskytovat možnost měření koncentračních profilů podél její výšky – zdrojová data potřebná pro použití profilové metody. Mezi hlavní body konstrukčního návrhu se řadí výška kolony, příkon vařáku, návrh distributoru kapalné fáze a konstrukce odběrových míst.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 1

Příprava strukturovaných mikročástic rozprašovacím sušením s využitím třífázové trysky

Autor: Martin Jakubec
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Práce se zabývá přípravou stabilních mikročástic určených pro transport a cílené vylučování aktivních látek metodou rozprašovacího sušení. Rozprašovací sušení je běžně používáno v mnoha průmyslových odvětvích například k výrobě práškového mléka, léčiv nebo nanomateriálů. V této práci bylo využito inovativní kombinace speciální třífázové trysky a laboratorní rozprašovací sušárny, pomocí níž byly připraveny chitosanové mikročástice, které byly zevnitř zesíťovány a byly prozkoumány jejich parametry (morfologie, velikost, míra bobtnání ve vodě a zeta potenciál). To vše bylo prováděno jako příprava na budoucí enkapsulaci prekursorů antibakteriálních aktivních látek obsažených v česneku (alliin a enzym alliináza) do těchto mikročástic a vytvoření umělé česnekové buňky pro budoucí *in vivo* aplikace.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 1

Charakteristika výplně Mellapak 452Y

Autor: Miloš Korčák
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. František Jonáš Rejl, PhD., Ing. Jan Haidl

Strukturovaná výplň Mellapak 452Y je jednou ze strukturovaných výplní vyráběných firmou Sulzer. Na této výplni byly při atmosférické destilaci systému methanol-propanol při nekonečném zpětném toku naměřené koncentrační profily pro různé průtoky fází. Naměřené koncentrační profily poskytly základ k výpočtu HETP, jako jednoho z ukazatelů separační účinnosti výplně. Zároveň byla při destilaci propanolu naměřena tlaková ztráta na výplni jako funkce F-faktoru a vyhodnoceny body zavěšení a zahlcení. Vypočítané hodnoty HETP a hydraulické vlastnosti výplně byly porovnány s hodnotami naměřenými na výplni Mellapak 252 stejného výrobce a v další práci poslouží ke komplexnějšímu porovnání těchto výplní.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 1

Simulační studie kombinovaného systému DOC–NSRC–SCR pro konverzi automobilových výfukových plynů

Autor: Martin Leskovjan
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Neustálé zpřísnování emisních limitů pro automobily nutí výrobce používat stále složitější a dražší systémy pro ošetření spalín. Optimalizace parametrů katalyzátoru (velikost, vzdálenost od motoru, hustota kanálků atp.) je výhodná nejen z finančního hlediska, ale stále častěji hrají roli i prostorové důvody. Tato práce je ve formě parametrické simulační studie a zabývá se kombinovaným systémem složeným z katalyzátorů DOC, NSRC a NH₃-SCR, řazených za sebou. Je zkoumán vliv velikosti jednotlivých monolitů, hustot kanálků a vzdáleností katalyzátorů od motoru (odpovídající jinému průběhu teplot). Jsou porovnávány dosažené konverze CO, HC a NO_x během standardního Evropského jízdního cyklu NEDC.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 1

Degradace textilních barviv v rotačním reaktoru s imobilizovanou houbou *Irpex lacteus*

Autor: Tereza Roubíčková
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Prof. Ing. Pavel Hasal, CSc.

Cílem projektu bylo zprovoznit laboratorní rotační biologický reaktor s imobilizovanou houbou *Irpex lacteus* pro degradaci textilních barviv a zvolit vhodný typ nosiče pro imobilizaci houby, protože nosič může zásadním způsobem ovlivnit účinnost reaktoru. Dalším cílem u tohoto reaktoru provést pokusy s degradací textilních barviv. Pro experimenty byl sestaven reaktor s půlkruhovou vanou. Na hřídeli je připevněn buben, který je uvnitř rozdělen na tři části shodné velikosti. Během experimentu byla testována pórovitá výplň ve tvaru válečků nazývaných AL-Schwimmbettmedium. Reaktor byl provozován ve vsádkovém režimu. Pro degradční pokusy bylo použito barvivo Remazolová brilantní modř R. Dalším úkolem bylo zjistit koeficient přestupu hmoty pro kyslík do růstového média. Rozpuštěný kyslík je jedním z mnoha faktorů, který ovlivňuje růst houby a její schopnost odbarvovat textilní barviva.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 1

Syntéza hybridných SiO_2 /Pnipam/ Fe_3O_4 mikročastíc

Autor: Nina Sarvašová
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství a Laboratoř chemické robotiky
Školitel: Doc. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Cieľom tejto práce je pripraviť hybridné mikročastice, ktoré budú obsahovať siliku, termoresponzívny polymér poly-N-isopropylakrylamid a magnetitové nanočastice. Každý z daných materiálov dodáva žiadaným časticiam unikátne vlastnosti ako odolnosť a tvrdosť siliky, schopnosť zmeny objemu v závislosti na teplote, ktorou disponuje Pnipam, a možnosť indukčného ohrevu ako následku prítomnosti magnetitových nanočastíc. Syntéza takýchto mikročastíc sa skladá z viacerých krokov. Základom je získanie dutých silikových makroporéznych mikročastíc s použitím metódy pevného templátu, ktoré sú následne modifikované naviazaním termoresponzívneho polyméru na ich povrch. Čo sa magnetitových nanočastíc týka, boli použité dva postupy. V prvom boli častice inkorporované už v procese tvorby dutých silikových mikročastíc, zatiaľ čo v druhom boli naviazané na kompozitné mikročastice SiO_2 /Pnipam v poslednom kroku syntézy výsledných hybridných mikročastíc. Boli skúmané viaceré metódy modifikácie silikových mikročastíc termoresponzívnym polymérom za účelom výberu tej najvhodnejšej varianty a takisto bola premeraná schopnosť indukčného ohrevu takto získaných častíc.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 1

Studium kinetiky reaktivní granulace pro výrobu detergentů

Autor: David Smrčka
Ročník: M1
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 pravost byla ověřena sérií experimentů.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 1

Distribuce pevných částic a jejich vliv na mezifázovou plochu

Autor: Jaroslav Solich
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Michal Kordač, Ph.D.

Některé vlastnosti pevných částic používaných při experimentech jsou už v dnešní době známe a využívá se jich v různých aplikacích. Příkladem je aktivní uhlí, o němž se ví, že dokáže z vody odstraňovat organické látky. Další využívanou vlastností pevných částic, je netečnost k systému, ve kterém se vyskytují. Takovým případem jsou částice Al_2O_3 , Glass Hollow, SiO_2 , které se využívají v systému, v němž probíhá reakce siřičitanu sodného s kyslíkem. Tento systém je velmi náchylný na nečistoty, které způsobují například zpomalení či zrychlení zmíněné reakce. Vliv částic na tuto vlastnost je již prozkoumaný a známý, ale pomocí siřičitanového systému se také zjišťuje mezifázová plocha. Pro její určení je potřeba zjistit zda zmíněné částice mají na mezifázovou plochu vliv. U všech používaných částic je deklarována výrobcem velikost. Ve skutečnosti jsou tam částice v určitém intervalu velikostí a je zapotřebí znát všechny velikosti tohoto intervalu. Určením všech velikostí intervalu lze zjistit i plochu těchto částic a měřením lze ověřit jejich vliv na siřičitanový systém.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 1

Vliv místa odebrání vzorků z katalytického monolitu a jejich uložení v laboratorním reaktoru na měřená data

Autor: Marek Václavík
Ročník: B2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Práce se zabývá optimalizací postupů používaných při měření konverzí automobilových výfukových plynů na vzorcích katalytického monolitu v laboratorním reaktoru. Je zkoumán vliv místa odebrání vzorku na získaná data. Ukazuje se, že aktivní katalytická vrstva je v průmyslově vyráběném monolitu nanesená do jisté míry nerovnoměrně, přičemž její množství má zásadní vliv na celkové konverze. Výsledky ovlivňuje také způsob uložení vzorků v laboratorním reaktoru a v neposlední řadě i způsob utěsnění prostoru kolem nich, což je demonstrováno na měřených datech. Na základě získaných poznatků jsou navrženy zásady pro vhodný výběr vzorků a jejich uložení v reaktoru, aby byla získána reprezentativní a opakovatelná data.

Sekce: **Procesní a chemické inženýrství 2**
knihovna B141b, 8:30 hod

Komise:

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

Členové: Ing. Oldřich Holeček, CSc.

zástupce sponzora Mondi

zástupce sponzora

Ing. Alexandr Zubov

Ing. Pavel Kovačík

Soutěžící:

Dundálek Jan

Fišer Jan

Ira Jiří

Isoz Martin

Kohoutová Štěpánka

Kremláčková Zuzana

Mráček David

Pittermanová Anna

Zygulová Petra

Sponzoři sekce Procesní a chemické inženýrství 2

Bochemie a.s.
GlassService
Chemoprojekt, a.s.
Lonza Biotec s.r.o.
Lovochemie, a.s.
MemBrain s.r.o.
Momentive Specialty Chemicals, a.s.
Mondi Štětí, a.s.
Ricardo Prague sro.
ŠkodaPower



Sekce: Procesní a chemické inženýrství 2

Konstrukce primární zinek/vzduchové baterie

Autor: Jan Dundálek
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Dr. Ing. Juraj Kosek, Ing. Josef Chmelař, Ing. Jaromír Pociďič

S rozvojem mobilních elektrických spotřebičů (elektromobily, notebooky, mobilní telefony, atd.) jsou kladeny stále větší požadavky na jejich zdroje energie, kterými jsou nejčastěji baterie. Vývoj nových elektrických článků si klade za cíl zvýšit výkon a množství uložené energie vztažené na hmotnost článku při použití levných a dostupných materiálů šetrných k životnímu prostředí. Zinek/vzduchové baterie využívající oxidace zinku v alkalickém prostředí vzdušným kyslíkem splňují výše uvedené požadavky. Při srovnání s NiMH či Li-Ion akumulátory, které jsou dnes nejvíce používané zdroje elektrické energie pro mobilní zařízení, dosahuje systém Zn/vzduch více jak 2x větší specifické energie (Wh/kg) a přitom využívá netoxických a dostupných materiálů, nicméně nedosahuje tak dobrých hodnot specifického výkonu (W/kg). Práce je zaměřená na návrh konstrukce primární Zn/vzduchové baterie. Na základě vypracované literární rešerše je sestavována laboratorní baterie.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 2

Vývoj mikrofluidního elektrochemického imunosenzoru

Autor: Jan Fišer
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Michal Přibyl, PhD

Práce je zaměřena na vývoj elektrochemického mikrofluidního senzoru pro imunoafinitní detekci proteinových molekul. Elektrochemická detekce je založena na monitorování redoxní reakce katalyzované enzymem HRP (horseradish peroxidase) cyklickou voltametrií. Enzym je obvykle vázán na detekční (sekundární) protilátky a v přítomnosti peroxidu vodíku katalyzuje oxidaci řady organických sloučenin (substrátů). Pro uvedený účel byl zkonstruován mikrofluidní čip z plexiskla se třemi zlatými mikroelektrodami o šířce 100 μm . Vyvinutý mikrofluidní čip byl nejprve testován při monitorování redoxní přeměny ferro/ferrikyanid v roztoku KNO_3 . Byla získána kalibrační křivka závislosti elektrochemického signálu na koncentraci ferro/ferrikyanidu. V dalším kroku byl zkoumán biochemický systém obsahující volný enzym HRP, hydrochinon jako enzymový substrát a peroxid vodíku jako oxidační činidlo. Cílem je získání kalibrační závislosti elektrochemického signálu na koncentraci volného enzymu v reakční směsi. Následovat budou experimenty s imobilizovaným enzymem, které již budou napodobovat chování reálného imunoanalytického senzoru.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 2

Měření a vyhodnocení experimentálních dat pro modelování tepelného rozkladu pevných materiálů

Autor: Jiří Ira
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

Znalost reakčního schématu společně s kinetickými parametry (aktivační energie, pre-exponenciální faktor, řád reakce) tepelné degradace je nezbytná pro matematické modelování pyrolýzy pevných materiálů. Kinetické parametry modelu se vyhodnocují na základě termogravimetrické analýzy. Analýza byla provedena pro zkušební vzorky borovice a buku ve dvou atmosférách (vzduch, dusík) při rychlostech zahřívání 5 K/min, 15 K/min a 25 K/min. Hlavním cílem této práce bylo vyhodnotit získaná data pomocí tzv. isokonverzních metod. Kvůli značným zjednodušením použitým v těchto metodách slouží získané výsledky především jako počáteční odhad pro další vyhodnocování kinetických parametrů pomocí pokročilých optimalizačních metod jako jsou např. genetické algoritmy. Dále byla pro stejnou sadu vzorků získána data z kónického kalorimetru při tepelných výkonech zářiče 35 a 50 kW/m². Kónická kalorimetrie poskytuje informace o hmotnostním úbytku a rychlosti uvolňování tepla během hoření. Obdržená data byla srovnána s tabelovanými hodnotami a v budoucnu se využijí k porovnávání výsledků matematických modelů s experimenty.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 2

Metody hodnocení separační účinnosti výplní při destilaci ternárních systémů

Autor: Martin Isoz
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. František Jonáš Rejl, PhD.

Dělicí účinnost výplní při destilaci binárních systémů je obvykle charakterizována hodnotou HETP. Výpočet HETP u ternárních systémů více, či méně selhává a je proto nutné metodiku výpočtu modifikovat, nebo přistoupit ke zcela jinému popisu separační účinnosti. V této práci byly použity tři rozdílné přístupy k výpočtu s cílem porovnat získané hodnoty HETP. Výpočet byl proveden na základě koncentračních profilů naměřených při atmosférické destilaci systému methanol-ethanol-propan-1-ol na výplních Intalox-25 a Mellapak 250Y. Získané hodnoty HETP byly vyneseny v závislosti na F-faktoru a byla diskutována jejich shoda. V závěru práce byl nastíněn Maxwell-Stefanův přístup k hodnocení účinnosti výplně, kterým se student bude dále zabývat.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 2

Posouzení spolehlivosti experimentální techniky záměny vstupního plynu pro měření objemového koeficientu přestupu hmoty.

Autor: Štěpánka Kohoutová
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha

Práce posuzuje použitelnost experimentální techniky záměny vstupního plynu pro stanovení objemového koeficientu přestupu hmoty (k_{La}) v poloprovozním mechanicky míchaném fermentoru. Představuje analytické řešení matematického modelu přestupu hmoty mezi plynem a kapalinou, který zahrnuje popis postupného vyplachování zádrže plynu po skokové změně koncentrace ve vstupním plynu. Jsou ukázány "váhové koeficienty" části modelu popisující rychlost přestupu hmoty (danou hodnotou k_{La}) a části popisující rychlost vyplachování zádrže plynu (danou dobou prodlení plynu). Srovnání modelu s experimentálními daty ukazuje, že při vyšších frekvencích otáčení míchadel je průběh koncentrace kyslíku v kapalině určován rychlostí vyplachování plynu v zádrži a nikoli rychlostí přestupu hmoty mezi plynem a kapalinou. Metoda záměny vstupního plynu tedy není vhodná pro vyhodnocení vyšších hodnot k_{La} a to ani v mezích potřebných pro návrh průmyslových zařízení.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 2

Příprava kompozitních SiO_2 mikročástic pro cílené vylučování látek

Autor: Zuzana Kremláčková
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Pevné duté porézní mikročástice z oxidu křemičitého jsou ideální pro použití k cílenému vylučování látek. Výhodou jsou především mechanická a chemická odolnost a snadná modifikace povrchu. Cílem této práce je příprava dutých kompozitních mikročástic $\text{SiO}_2\text{-Fe}_x\text{O}_y$ a jejich charakterizace. Dále pak schopnost uzavřít látku do těchto mikročástic a tu následně vyloučit v daném čase. Pro přípravu kompozitních dutých mikročástic byla použita metoda s pomocí kapalně šablony s Fe_xO_y částicemi předpřipravenými redoxní reakcí Fe-solí. Po předchozí studii vlivu zabudovaného Fe_xO_y na pevnost částic byly připraveny částice s proměnným hmotnostním zastoupením oxidu železnato-železitého. Pro získání přehledu o proměnlivosti parametrů v závislosti na podmínkách přípravy byly následně studovány jejich vlastnosti - velikost, morfologie, schopnost indukčního ohřevu ve vnějším elektromagnetickém poli a byly provedeny vylučovací experimenty s modelovou látkou, vitamínem B12. Výsledky provedených experimentů ukazují, že uzavřená látka se ve vodném prostředí pomocí difuze vyloučí v řádu desítek hodin. Pro praktické využití je však nezbytné, abychom byli schopni nesenou látku v částicích uchovat alespoň několik dnů. Současná práce se tedy zabývá studiem možností uzavření modelové látky (vitamín B12) v částicích, tedy uzavření pórů, jednoduchými lipidy, které po zahřátí póry opět uvolní.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 2

Porovnání vlastností čerstvého a vystařeného vzorku automobilového katalyzátoru s ukládáním NO_x

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

Automobilové katalyzátory během svého provozu podléhají stárnutí, které má za následek postupné zhoršování jejich účinnosti (deaktivaci). Jeden z mechanismů stárnutí probíhá v důsledku teplotního namáhání katalyzátoru, což se projeví změnami ve struktuře katalytické vrstvy – slinutím a zmenšením aktivního povrchu katalytických center. Tato práce se zabývá laboratorním zkoumáním průmyslového katalyzátoru s ukládáním a redukcí NO_x (typ NSRC) a jeho následným matematickým modelováním. Nejprve byla provedena série měření se vzorky čerstvého katalyzátoru (zápalné křivky oxidace CO a HC, adsorpce a redukce NO_x, ukládací kapacita kyslíku). Následně byly stejné experimenty provedeny i s vystařeným vzorkem téhož katalyzátoru. Porovnáním takto získaných dat bylo možné popsat rozdíly v některých důležitých vlastnostech mezi čerstvým a vystařeným vzorkem katalyzátoru a vyhodnotit příslušné parametry matematického modelu.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 2

Syntéza, charakterizace a adhezní vlastnosti tepelně-citlivých hydrogelových mikročástic

Autor: Anna Pittermannová
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Materiály specificky reagující na změnu vlastností vnějšího prostředí jsou dnes hojně studovány zejména pro jejich potenciální využití v cíleném vylučování aktivních látek. Proto se zabýváme syntézou mikročástic z termoresponzivního polymeru jenž je schopen měnit své vlastnosti a objem. Kompozitní mikročástice jsou složeny z termoresponzivního hydrogelu poly-N-isopropyl-akrylamidu (PNIPAMu), z nanočástic oxidu železa a z nanočástic oxidu křemičitého. Syntéza takto strukturovaných kompozitů byla prováděna pomocí metody inverzní Pickeringovy emulzní polymerace. Pro budoucí uplatnění kompozitních mikročástic jako nosičů aktivních látek je nezbytně nutné, abychom dokázali předem odhadnout místo, na které se přichytí. Proto se zabýváme studiem adhezních vlastností mikročástic. Adhezní vlastnosti se studovaly při různých teplotách, při různých objemových průtocích a na různých typech substrátu. Substráty byly voleny tak, ať jsou zastoupené jak hydrofilní tak hydrofobní povrchy. Ke studiu adhezních vlastností byla využita průtočná cela s definovaným rychlostním profilem proudící tekutiny. Míra adheze byla vyhodnocována jako procento ulpělých částic na jednotkové ploše substrátu v závislosti na průtoku kapaliny.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 2

Ověření schopnosti houby *Irpex lacteus* kolonizovat nosič Mutag BioChip TM a jeho využití v biofiltrech

Autor: Petra Zygulová
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Prof. Ing. Pavel Hasal, CSc.

Tato práce se zabývá experimentálním testováním schopnosti houby *Irpex lacteus* kolonizovat nosič Mutag BioChip TM a ověřit možnost využití tohoto nosiče pro odbarvování textilních barviv. V rámci této práce byla použita následující barviva: Remazolová brilantní modř R a Reaktivní oranž 16. Součástí práce je popis provedených odbarvovacích pokusů ve stacionárních baňkových kulturách nejen s nosičem Mutag BioChip TM, ale i s pěnovým nosičem Filtren TM. Pro experimentální odbarvování byla použita výše zmíněná barviva s počáteční koncentrací $200 \text{ mg} \cdot \text{dm}^{-3}$. Druhou část této práce tvoří popis experimentálního měření v nově navrženém probublávaném reaktoru s výplní z nosiče Mutag BioChip TM. V tomto reaktoru byly provedeny odbarvovací pokusy s barvivem Remazolová brilantní modř R o počátečních koncentracích 300 a $200 \text{ mg} \cdot \text{dm}^{-3}$. V této práci jsou ilustrovány výsledky obou experimentálních modifikací.

Sekce: **Procesní a chemické inženýrství 3**
posluchárna B03, 8.30 hod

Komise:

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

Členové: Ing. Lenka Schreiberová, CSc.
zástupce sponzora Momentive
zástupce sponzora Lovochemie
Ing. Marek Nebyla
Ing. Jiří Dohnal

Soutěžící:

Kolda Jan
Kotala Tomáš
Matuška Petr
Nistor Andra
Roder Pavel
Skala Martin
Štěrbák Martin
Vostal Radek
Vrána Jiří
Zuček Karel

Sponzoři sekce Procesní a chemické inženýrství 3

Bochemie a.s.
GlassService
Chemoprojekt, a.s.
Lonza Biotec s.r.o.
Lovochemie, a.s.
MemBrain s.r.o.
Momentive Specialty Chemicals, a.s.
Mondi Štětí, a.s.
Ricardo Prague sro.
ŠkodaPower



Sekce: Procesní a chemické inženýrství 3

Dynamický model transportních procesů v koloně pro inverzní plynovou chromatografii

Autor: Jan Kolda
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Dr. Ing. Juraj Kosek, Ing. Alexandr Zubov

Inverzní plynová chromatografie (iGC) je experimentální metoda umožňující charakterizaci difúzního transportu v porézních částicích. Naměřená data z iGC jsou zpracovávána modelem podle van Deemtera nebo přímým srovnáním naměřených a simulovaných koncentračních pulsů. Experimenty s laboratorní iGC kolonou prováděné za různých tlaků ukázaly, že žádný v současné době dostupný model nedokáže interpretovat difúzi probíhající paralelně jak v pórech, tak v pevné fázi polymerních částic. Proto je vyvíjen více-škálový model prostorově trojrozměrné rekonstruované iGC kolony. Model uvažuje příspěvky k axiální disperzi vzniklé různými mechanismy: disperzí způsobenou rychlostním polem proudu plynu, přestupem hmoty na povrch částic i transportem uvnitř částic. V současné verzi modelu byl opuštěn původní předpoklad vazkého (Stokesova) toku a Navierovy-Stokesovy rovnice jsou tak řešeny v plné formulaci. Vyvinutá metodika je aplikována na simulaci např. kapilární chromatografie (kapilára s vnitřní stěnou pokrytou adsorbentem) nebo disperze koncentračního pulzu na izolované porézní částici polymeru.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 3

Technologické aspekty zmenšování měřítka v mikrofluidních zařízeních z polymerních substrátů

Autor: Tomáš Kotala
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jiří Lindner, Ph.D.

Mikrofluidika je obor zabývající se studiem toku tekutiny v kanálech o charakteristickém rozměru do 1000 μm . Mikrofluidní zařízení mají již řadu komerčně dostupných aplikací (např. analytické mikročipy) a jsou používána v základním i aplikovaném výzkumu. V naší laboratoři používáme převážně polymerní substráty (PMMA, PS). Mikrokanály široké přes 200 μm lze poměrně snadno vyrobit např. mikrofrézováním. Pro některé aplikace je však potřeba vyrobit kanály užší (šířka $\sim 10^1$ μm), kdy takto vyrobená zařízení lze využít např. ke studiu systému elektrolytická dioda, nebo jako model jednotlivého póru v membráně apod. Snížení charakteristických rozměrů mikrokanálů o řád přináší řadu komplikací při výrobě mikrozařízení. Některé metody jsou již za limitem použitelnosti (mechanické mikroobrábění), další vyžadují úpravy a velmi pečlivé provedení (např. tepelné slinování). V rámci této práce byly studovány nové možnosti výroby úzkých mikrokanálů a jsou popsány a diskutovány jeho jednotlivé kroky. Zde navržený postup využívá UV litografie, mikrostrukturální leptání kovového substrátu, které využívá řízení reakce díky polo vsádkovému systému, vtláčování za tepla a tepelné slinování.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 3

Sorpce a difúze v polymerech měřená na základě dynamiky tlakové odezvy

Autor: Petr Matuška
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Juraj Kosek, Ing. Josef Chmelař

Sorpce a difúze v polymerech jsou procesy s velkým významem pro výrobu polymerů a jejich aplikace. V rámci této práce byla zásadně přestavěna a otestována aparatura pro měření dynamiky tlakové odezvy („pressure-decay“), která je vhodná pro měření difúzních koeficientů a sorpčních rovnováh nízkomolekulárních látek v polymerech. Kromě popisu nové konstrukce aparatury bude též představena metodika pro vyhodnocování rovnovážných naměřených dat. Aparatura „pressure-decay“ je vhodná pro vzorky ve formě částic i 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. Tato data jsou využívána k určení binárních interakčních parametrů pro stavovou rovnici PC-SAFT (Perturbed-chain statistical associating fluid theory). Z měření dynamiky tlakové odezvy lze také vyhodnocovat základní morfologické parametry porézních částic polyolefinů a zkoumat mechanismy difúze v semi-krytalických polymerech.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 3

Příprava a charakterizace nanopěn

Autor: Andra Nistor
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Juraj Kosek, Klára Smolná

Nanopěny jsou polymerní pěny s velikostí buněk 10 – 500 nm a s celkovou porozitou nad 90%. Díky své struktuře nabízejí oproti standardním polymerním materiálům vynikající dielektrické, tepelné, zvukové a rázové izolační vlastnosti. Tím se nanopěnám otevírají možnosti využití nejen ve stavebnictví a v automobilovém průmyslu, ale i v dalších průmyslových odvětvích. V rámci příspěvku nejdříve vysvětlíme, jaké typy struktur umožní dosáhnout zlepšení izolačních vlastností, a poté diskutujeme různé způsoby přípravy požadovaných struktur. Příprava nanopěn je stále ve fázi výzkumu. Cílem této práce je navázat na znalosti získané v literatuře, zvolit vhodnou průmyslově aplikovatelnou metodu a sestavit aparaturu pro přípravu nanopěn. Zároveň se tato práce zabývá možnostmi charakterizace morfologie nanopěn pomocí rentgenové mikro-tomografie (μ -CT) a mikroskopie atomárních sil (AFM).

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 3

Měření objemového koeficientu přestupu hmoty v plynné fázi na strukturovaných výplních při absorpci

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

Cílem práce bylo změřeni objemového koeficientu přestupu hmoty (k_G) na strukturovaných výplních při absorpci SO_2 ze vzdušiny do roztoku NaOH . Měření bylo provedeno na výplních Mellapak M250Y od firmy Sulzer a RSP250 od firmy Raschig s geometrickou plochou $250\text{m}^2/\text{m}^3$. Pro dané výplně byly změřeny hydraulická data a v závislosti na transportních charakteristikách bylo provedeno porovnání výplní z procesního hlediska. Koncentrace SO_2 byly měřeny na IR spektrometru Sick S710 na rozsahu 5 – 3000ppm s relativní přesností 3%. Byl vyhodnocen vliv průtoků kapalné fáze v rozsahu $B = 5\text{--}80\text{ l/min}$ a průtoků plynné fáze v rozsahu $u_G = 0,5\text{--}2,0\text{ m.s}^{-1}$ na objemový koeficient přestupu hmoty k_G . Průtoky fází byly voleny tak, aby byly splněny podmínky, při kterých běžně probíhají absorpce i destilace.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 3

Recording and processing of oxygen probes' signal

Autor: Martin Skala
Ročník: B2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Moucha Tomáš

The work modernises the experimental technique of measuring of the volumetric mass transfer coefficient between gaseous and liquid phase in a pilot-plant fermentor. In this case the measuring of oxygen concentration in liquid phase is recorded by using oxygen probes. Particular contribution of this work is the development of software on Control Web 2000 platform. This software allows to read and to process the signal of oxygen probes. The probe signal is led through an A/D convertor and then saved in a PC. Recorded data are used for calculation of parameters of observed process e.g. the time constant of transient characteristics of probe or the mass transfer coefficient.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 3

Srovnací studie vlivu metody přípravy lipozomů na stabilitu a kinetiku vylučování enkapsulované látky

Autor: Martin Štěrbák
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D.

Lipozomy jsou duté částice, zpravidla o velikosti 30 nm – 5 μm, tvořené fosfolipidovou dvojvrstvou, jejichž použití spočívá v (cílené) dopravě a uvolňování enkapsulované látky. Existuje mnoho metod přípravy lipozomů, přičemž vlastnosti výsledné částice mohou být ovlivněny zvolenou metodou přípravy. Cílem práce je porovnat vybrané metody z hlediska výsledné velikosti, distribuce a stability připravených částic a účinnosti enkapsulace modelové látky. Zde použité lipozomy byly připraveny z dipalmitoylfosfatidylcholinu pomocí Banghamovy a Mozafariho metody. Banghamova metoda spočívá v přípravě tenkého fosfolipidového filmu, který je následně hydratován, což vede ke vzniku lipozomů. Mozafariho metoda využívá ke tvorbě částic hydratace fosfolipidů v roztoku glycerolu za zvýšené teploty. K homogenizaci a zvýšení účinnosti enkapsulace je v obou metodách používána extruze. Byl sledován vliv počtu extruzních cyklů na střední velikost a distribuci částic za použití dynamického rozptylu světla. Do lipozomů byla enkapsulována modelová látka 5(6)-karboxyfluorescein. Byla porovnána účinnost enkapsulace částic připravených výše uvedenými metodami. Následně byla studována kinetika vylučování při různých teplotách a dlouhodobá stabilita připravených částic.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 3

Ověření vhodnosti rozšíření korelace pro výpočet objemového koeficientu přestupu hmoty v aerované míchané nádobě pro zvětšování měřítka

Autor: Radek Vostal
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Dr. Ing. Tomáš moucha

Cílem práce bylo ověřit vhodnost rozšíření klasické korelace pro výpočet objemového koeficientu přestupu hmoty kLa v aerované míchané nádobě pro zvětšování měřítka. Byla zde zpracována měření z poloprovozní nádoby o vnitřním průměru 0,59 m a z laboratorní nádoby o vnitřním průměru 0,29 m. Obě měření byla provedena pro míchadla se šikmými lopatkami 45°, s čerpacím účinkem nahoru (PBU), dolů (PBD), pro míchadlo Lightning (LTN) a pro míchadlo Techmix s čerpacím účinkem nahoru (TXU). Postup byl následující: Získané hodnoty kLa z nádob obou velikostí byly korelovány v závislosti na postupné rychlosti aeračního plynu a celkové energii disipované ve vsádce. Ověřovaný způsob popisu obou souborů dat spočíval v rozšíření původní rovnice o člen zahrnující závislost na velikosti zařízení, a sice člen úměrný obvodové rychlosti lopatek. Jako měřítko přiléhavosti korelací byla vzata směrodatná relativní odchylka dat vypočtených od dat naměřených a upravený korelační koeficient.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 3

Charakteristiky redoxní průtočné baterie

Autor: Jiří Vrána
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Marek Bobák, Ph.D., Doc. Dr. Ing. Juraj Kosek

Zvyšující se produkce elektrické energie z obnovitelných zdrojů, snaha o efektivnější využití stávajících elektrických přenosových soustav a požadavky koncových zákazníků na kvalitu a stabilitu dodávek elektrické energie jsou pravděpodobně jedny z hlavních důvodů zvyšující se poptávky po spolehlivých systémech pro ukládání elektrické energie ve stacionárních úložištích. Jako jeden z vhodných systémů, který umožňuje účinné ukládání a následné uvolňování elektrické energie se jeví redoxní průtočná baterie. Podstatou funkce systému je vratná oxidace a redukce probíhající ve dvou elektrolytech oddělených iontovým spojením, které zajišťuje iontově propustná membrána. Jedním z typů redoxních průtočných baterií je vanadová redoxní baterie, kde jsou reagujícími iontovými páry kationty $\text{VO}_2^+/\text{VO}^{2+}$ a $\text{V}^{3+}/\text{V}^{2+}$. V této práci se zabýváme sestavením vanadové průtočné baterie a přípravou elektrolytů z oxidu vanadičného. Vhodným uspořádáním součástí baterie (objem elektrolytů, koncentrace reagujících iontů, plocha baterie, počet článků a průtok elektrolytů) lze docílit požadovaných parametrů (množství uložené energie, výkon, napětí) daného stacionárního energetického úložiště. Byly proměřeny a interpretovány základní charakteristiky sestavené baterie.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 3

Příprava tenkých vrstev elektrorozprašováním pro aplikace v energetice

Autor: Karel Zuček
Ročník: M1
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Juraj Kosek, Ing. Jiří Maršálek

Elektrozprašování se nedávno vyvinulo v jednu z konkurenceschopných metod k přípravě a současné depozici nanočástic a nanostrukturovaných vrstev. Tyto materiály mohou mít výjimečné vlastnosti, které nacházejí uplatnění v různých oblastech jako např. energetika, katalýza, medicína, ... Efektivní výroba těchto materiálů je ovšem klíčová pro jejich široké praktické využití. Metoda elektrozprašování skýtá několik výhod. Investiční i provozní náklady jsou velmi nízké, nanášení vrstev je dostatečně rychlé a zvýšení produkce může být jednoduše realizováno paralelizací procesu. V naší výzkumné skupině bylo nedávno navrženo a zkonstruováno takovéto elektrozprašovací zařízení. Cílem této práce bylo připravit vybrané anorganické nanostrukturované vrstvy a diskutovat možné aplikace v energetice. Energetickými aplikacemi máme na mysli jak získávání, tak ukládání energie.

Sekce: **Podnikový management a marketing
posluchárna C11, 8.00 hod**

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Jaroslava Hyršlová, Ph.D.

Členové: Ing. Jana Dostálová, Ph.D.

Ing. Jakub Dyntar, Ph.D.

Ing. Miroslav Vágner, Ph.D.

Soutěžící:

Bc. Dušková Marie

Bc. Kalfusová Eliška

Bc. Křenovská Barbora

Bc. Loszonsky Gabriel

Bc. Ludvík Miroslav

Bc. Nývltová Lucie

Bc. Pogrebnicenco Tatiana

Bc. Sýkora Roman

Bc. Trčka Filip

Sekce: Podnikový management a marketing

Vybrané oblasti řízení jakosti se zaměřením na kovové materiály

Autor: Bc. Marie Dušková
Ročník: M2
Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Doc. Ing. Sláva Balatka, CSc.

Projekt se zabývá kovovými materiály (označení: slitina IN 738LC a slitina IN 713LC). Konkrétněji popisem a provedením laboratorní zkoušky tahem v závislosti na různých teplotách (prováděno v laboratoři podniku UJP Praha a.s., podle české normy ČSN EN 10002-1). Následně pak vyhodnocením naměřených hodnot pomocí základních statistických charakteristik.

Sekce: Podnikový management a marketing

Operativní plánování výroby

Autor: Bc. Eliška Kalfusová
Ročník: M2
Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: ing. Dana Strachotová, PhD.

Tento příspěvek se zabývá ve své první, teoretické části vymezením pojmu operativní plánování výroby, jeho místem a významem ve výrobních podnicích. Druhá, praktická část pojednává o postupu při tvorbě operativního plánu výroby, jeho změnách podle aktuálního stavu okolností a obtížích, které během těchto činností nastávají.

Projekt se uskutečnil ve firmě BAEST Machines & Structures, a.s. v Benešově, jeho hlavním cílem bylo vytvořit pomocí programovacího jazyka VBA v programu MS Excel automatický plánovač výroby s možností automatické aktualizace plánu po zadání aktuálního stavu výrobní zakázky. Přínosem této práce bylo zejména snížení nákladů na operativní plánování výroby.

Sekce: Podnikový management a marketing

Cenová strategie na trhu s plynem

Autor: Barbora Křenovská
Ročník: M2
Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Doc. Ing. Stanislava Grosová, CSc.

Práce se zabývá problematikou tvorby cen na trhu s plynem. V první části jsou popsány zdroje, zásoby a systém distribuce plynu. Evropa je zásobována zemním plynem z Ruska a ze Severního moře (Norsko). Druhá část pojednává o dodavatelích zemního plynu v České republice a provozovateli přepravní plynárenské soustavy v České republice. Třetí část je věnovaná cenové strategii na trhu s plynem. Cena plynu pro odběratele se skládá ze dvou částí: ceny za komoditu a ceny za přepravu a distribuci plynu. Cena za přepravu a distribuci plynu je regulovaná a nad procesem její tvorby dohlíží Energetický regulační úřad. Cena za komoditu je volná, plyn je nakupován buď přímo u dodavatele nebo na burze v Lipsku.

Sekce: Podnikový management a marketing

Dílčí implementace vybraných pilířů TPM u vybraných výrobních zařízení

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

Práce je zaměřena na oblast TPM (Management produktivity výrobních zařízení) ve firmě Baest a.s. v Benešově. Cílem této práce bylo vyhodnocení formulářů CEZ (u vybraných zařízení) a návrh odměňování dle vyhodnocení těchto formulářů CEZ. Součástí je analýza současného stavu pracoviště pomocí přímých metod jako je miniaudit pořádku, čistoty a vizualizace, a snímek pracovního dne. Na základě analýzy pracoviště jsou v projektu dále vypracovány návrhy na vizualizaci nástěnky TPM na vybraných pracovištích.

Sekce: Podnikový management a marketing

Alokace nákladů

Autor: Bc. Miroslav Ludvík
Ročník: M2
Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: doc. Ing. Jaroslava Hyršlová, Ph.D.

Efektivní řízení nákladů a jejich přiřazování jednotlivým útvarům a objektu jsou stěžejní činnosti každého konkurenceschopného podniku. Práce je zaměřena na kalkulace nákladů v podniku, jehož portfolio výrobků se skládá z léčiv, doplňků stravy a kosmetiky. Projekt se zabývá alokací nákladů a výpočtem kalkulací s důrazem na vlastní náklady výroby. U zvoleného produktu (léčiva) byly na základě stávajících dokumentů, přímých informací z úseku výroby a dat z účetního systému firmy poskytnuty informace o způsobu zjištění nákladů na kalkulační jednici. S využitím literárních pramenů byl zhodnocen stávající kalkulační vzorec a v závěru byla navržena nová možnost přístupu k alokaci nákladů, zohledňující technologický způsob výroby na jedné straně a přínos pro manažerské řízení firmy na straně druhé.

Sekce: Podnikový management a marketing

Reklamní kampaň

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

Naše požadavky a přání jsou čím dál více rozmanitější. Trh se nám přizpůsobuje a nabízí nám široký výběr produktů, z nichž si volíme ten produkt, který nám přináší největší přidanou hodnotu. Firmy se snaží samozřejmě o to, abychom si koupili jejich výrobek či službu. Nejúčinnějším nástrojem, jak nás přesvědčit, je reklama. Produkt, který nemá reklamu, jakoby neexistoval.

Práce se zabývá zpracováním reklamní kampaně pro stávající produkty značky Bonavita na jaro 2012. Pracuje se zde s reálným rozpočtem, s konkrétními čísly a cenami reklamních služeb.

Sekce: Podnikový management a marketing

Analýza legislativy a regulačních podmínek v oblasti klinického hodnocení léčiv

Autor: Bc. Tatiana Pogrebnicenco
Ročník: M2
Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Olga Kutnohorská

Farmaceutický průmysl je jedním z nejrychleji se rozvíjejících odvětví a vývoj léků patří mezi velmi rizikové, nákladné a zdoluhavé podnikání. Klinické hodnocení nových léčivých přípravků představuje polovinu doby a dvě třetiny nákladů na vývoj nového léku, a není proto překvapující, že se mnoho farmaceutických společností snaží najít nové cesty k uskutečnění tohoto procesu. Jednou z nich je převedení klinických studií do jiných zemí, přičemž jedním z nejatraktivnějších regionů je dnes střední a východní Evropa. Ale kterou zemi zvolit? Regulační podmínky týkající se provádění klinických studií se výrazně liší od jedné země k druhé. Roste počet zemí zlepšujících své standardy, ale v mnoha z nich legislativa ještě potřebuje dopracování, nebo dokonce i reformy. Cílem této práce je zjistit, které země nabízejí nejlepší příležitosti, a to pomocí vyhodnocení dle důležitých kritérií.

Sekce: Podnikový management a marketing

Ked' sa povie E-learning

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

Od 60. rokov minulého storočia sa s vývojom počítačov začal vyvíjať nový "mladý" odbor výučby prostredníctvom rozvíjajúcich sa informačných technológií. Tento odbor dostal názov e-learning. Predkladaná práca má poukázať na vývoj a transformácie e-learningu od 60. rokov minulého storočia až do dnešnej doby. Druhá časť práce je zameraná na praktickú ukážku vývoja e-learningu v praxi a jeho funkčnosť pre spoločnosti ako možnosť výučby veľkého množstva zamestnancov novým technológiám.

Sekce: Podnikový management a marketing

Vyhodnocení výkonnosti balicí linky při výrobě plátkované uzeniny

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

Práce byla zaměřena na měření výkonnosti staré balicí linky (složené z nářezového stroje, dopravníku a balicí jednotky) a nově zakoupeného stroje ve firmě MP Krásno, a.s. Nová balicí linka je složená ze stejných částí jako stará, ale z technologicko-hygienického hlediska odpovídá nejvyššímu možnému standardu. Splňuje veškeré dnes kladené požadavky na moderní balicí linku v odvětví masného průmyslu.

Práce byla vyhodnocena pomocí ukazatele CEZ - celková efektivita zařízení, pomocí které bylo porovnávána výkonnost staré a nové balicí linky.

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:

Baškatová Viktorija

Bc. Kommová Lucie

Kotúčová Soňa

Bc. Kvasničková Eva

Lattenberk Lukáš

Mikeš Jiří

Bc. Rusová Kateřina

Bc. Štěpánková Barbora

Živčáková Martina

Sekce: Fyzika a měřicí technika

Přežívání koryšů *Artemia salina* při expozici korónovému výboji

Autor: Viktorija Baškatová
Ročník: B2
Ústav: fyziky a měřicí techniky
Školitel: Ing. Josef Khun, Ph.D.

V této práci je zkoumán vliv netermálního plazmatu generovaného v korónovém výboji na mnohobuněčné koryše *artemia salina*. Zkoumán je vliv netermálního plazmatu na přežívání vajíček nebo živých jedinců ve fyziologickém roztoku. Netermální plazma může na organismy působit jak přímo tak i prostřednictvím stabilních částic vznikajících v samotném roztoku (např. změna pH). Experimenty jsou rozděleny na případy, kdy jsou vajíčka, či živý jedinci po expozici ponecháni v původním exponovaném roztoku, či inokulaci do neexponovaného fyziologického roztoku. Bylo zjištěno, že při působení výboje na fyziologický roztok s vajíčky nebo živými jedinci dochází k jejich usmrcení již za několik minut.

Sekce: Fyzika a měřicí technika

Regulace vlhkosti v atmosféře výboje

Autor: Bc. Kommová Lucie
Ročník: M2
Ústav: Fyziky a měřicí techniky
Školitel: Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.

Studium vlastností korónového výboje je už několik let prací celé skupiny. Dalším cílem je prozkoumání chování korónového výboje při různě vlhké okolní atmosféře. Dojde tak k dalšímu ucelení poznatků o vlastnostech výboje, které mají vliv na jeho účinnost. Prvním krokem bylo navržení aparatury, výběr potřebných součástí a její sestavení. V sestavené aparatuře byla provedena základní měření, která nám pomohla seznámit se s ovládáním servomotorů, LED diod a čtení hodnot potenciometru a senzoru vlhkosti. Díky tomu jsme byli schopni naměřit přechodové charakteristik soustavy. Naměřené dynamické vlastnosti soustavy byly zpracovány a výsledkem bylo matematické vyjádření přenosu soustavy prvního řádu a rovnice pro akční zásah regulátoru. Navržená rovnice pro akční zásah regulátoru byla následně modifikována metodou pokus-omyl, přesto nám poskytla poměrně dobrý prvotní nástřel. V současné době jsme schopni dosáhnout požadované vlhkosti, s akceptovatelnou regulační odchylkou, které je zadána uživatelem.

Sekce: Fyzika a měřicí technika

Energetická zásoba ATP v mikroorganismech a korelace přežití v "mrtvé vodě"

Autor: Soňa Kotúčová
Ročník: B4
Ústav: fyziky a měřicí techniky
Školitel: Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.

Mikroorganismy v prostředí dostatečného množství živin obsahují určité množství ATP, které nám současně poskytuje informaci o životaschopnosti buněk. Pokud se buňky nacházejí v nehostinném prostředí, jejich metabolismus se naruší a obsah ATP v nich začne klesat, až dojde k usmrcení buněk. V této práci se zabývám schopností mikroorganismů přežít ve vodě exponované korónovému výboji. Vzniklá „mrtvá voda“ má na mikroorganismy letální účinek v závislosti na době expozice vody výboji a délce pobytu mikroorganismů ve vodě. Mikrobicidní účinky zaznamenáváme kromě kultivačních metod také pomocí množství ATP, které se nachází uvnitř buněk a klesá s dobou pobytu v mrtvé vodě. Jako modelové mikroorganismy používám ze skupiny prokaryot Gram-pozitivní bakterii *Staphylococcus epidermidis*, Gram-negativní bakterii *Escherichia coli* a eukaryotní kvasinku *Candida albicans*.

Sekce: Fyzika a měřicí technika

Mezinárodní spolupráce VŠCHT a Università di Bologna v oblasti netermálního plazmatu

Autor: Bc. Eva Kvasničková
Ročník: M1
Ústav: fyziky a měřicí techniky
Školitel: Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.

Na konferenci NATO ARW - Plasma for bio-decontamination, medicine and food security na Slovensku byla navázána spolupráce mezi mikrobiologickou laboratoří boloňské univerzity, využívající plazma především pro dekontaminaci povrchu vajec, a týmem z Vysoké školy chemicko-technologické v Praze, zabývajícím se mikrobicidními účinky netermálního plazmatu. Při expedici do laboratoří boloňské univerzity jsme použili jejich bariérového výboje k expozici námi běžně využívaných mikroorganismů, konkrétně bakterií *Escherichia coli*, *Staphylococcus epidermidis*, kvasinky *Candida albicans* a spor plísní *Aspergillus oryzae*, *Byssoschlamys sp.* a *Cladosporium sphaerospermum* jak ve vodní suspenzi, tak na pevném médiu. Dále jsme produkovali tzv. „mrtvou vodu“. Jelikož v naší laboratoři používáme výboj korónový, je toto porovnání vůbec první studií, zabývajících se mikrobicidními účinky dvou různých výbojů na stejnou matrici. Ze získaných výsledků byla vypracována komparativní studie, která bude prezentována na této konferenci.

Sekce: Fyzika a měřicí technika

Měření rozměrů částic práškových materiálů pro přípravu pelistorů obrazovou analýzou

Autor: Lukáš Lattenberk
Ročník: B1
Ústav: fyziky a měřicí techniky
Školitel: Ing. Anna Korbářová, Ph.D.

Pelistorové senzory, jejichž funkce je založena na principu katalytického spalování, patří k nejstarším a dosud nejčastěji používaným senzorům v přístrojích určených pro měření koncentrace hořlavých plynů a par. Pelistor má nejčastěji tvar koule nebo válce o průměru 1 až 2 mm. Jádrem pelistoru je vinutí z platinového drátu, které je zapouzdřeno uvnitř keramické perličky, na jejímž povrchu je nanesen katalyzátor. Odporové vinutí je vyrobeno z platinového drátu o průměru 0,03 až 0,1 mm. Žárovzdorná keramická perlička, jejíž složení je předmětem analýzy v této práci, je vytvořena na bázi oxidu hlinitého (minimálně 75 % hmotnosti, dalšími složkami mohou být např. SiO_2 , hlinitokřemičitany apod.). Jako katalyzátor se nejčastěji používá platina nebo směs platiny a paladia. V této práci jsme se soustředili na analýzu materiálů, používaných pro přípravu keramické perličky. Jednalo se o tři různé směsi, které vždy obsahovaly dva druhy práškového Al_2O_3 a pojivo (kaolín, jíl,...). Pomocí obrazové analýzy s využitím světelného mikroskopu a softwaru NIS-Elements byl stanovován ekvivalentní průměr a plocha částic jednotlivých složek i hotových směsí. V závěru byly vlastnosti směsí vzájemně porovnány a vytipována předpokládaná ideální směs pro přípravu pelistorové perličky.

Sekce: Fyzika a měřicí technika

Aplikace korónového výboje při dekontaminaci plastových obalů v potravinářství

Autor: Bc. Kateřina Rusová
Ročník: M1
Ústav: konzervace potravin a technologie masa
Školitel: Dr. Ing. Miroslav Čeřovský

V rámci dlouhodobějšího projektu zaměřeného na aplikaci korónového výboje při dekontaminaci plastových obalů v potravinářství byla ověřena řada úprav metodiky sledování kombinovaného účinku plazmatu a aerosolu peroxidu vodíku na testovací kmen *Trichoderma atroviride*. Byla testována funkce nově uspořádaného expozičního nástavce umožňujícího sledovat prostorový vliv výboje, byly zpřesněny údaje o parametrech výboje a byla testována modifikovaná média usnadňující vyhodnocení kombinovaných účinků na růst testovaného kmene plísně.

Sekce: Fyzika a měřicí technika

Využití technologie Ink-Jet pro přípravu substrátů senzorů

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

Princip technologie Ink-Jet spočívá ve vystřelování mikroskopických kapiček inkoustu z tiskové hlavy na potiskované médium. Nejčastěji používaným médiem je papír. Tuto technologii lze však snadno adaptovat i pro průmyslové či experimentální zařízení a tisknout inkousty na široké spektrum substrátů (např. alumina, leštěný křemík, sklo, kov, média organické či biologické povahy). Způsoby tohoto tisku se dají obecně rozdělit na kontinuální tisk, a tisk na vyžádání (Drop-on-Demand).

Cílem této práce bylo provést úvodní experimenty s tištěním vodivých spojů pomocí nové aparatury využívající technologii Ink-Jet typu Drop-on-demand. Pro nanášení inkoustu na substráty bylo využito piezoelektrické trysky umístěné na třiosém posuvu řízeném pomocí počítače. Součástí aparatury je kamera, pomocí které byl snímán tvar, kvalita a velikost vystřelovaných kapek v závislosti na vloženém napětí, délce pulzů a frekvenci nanášení.

Tištěn byl stříbrný koloidní inkoust na vybrané substráty (sklo, papír, plast), pro tento inkoust byla experimentálně stanovena vhodná frekvence a napětí na trysce. Pomocí metod obrazové analýzy byla změřena šířka nanášené linie (~ 200 mikronů) a průměr kapky (~100 mikronů). Na závěr byla ověřena kvalita vodivých linií měřením jejich elektrického odporu.

Sekce: Fyzika a měřicí technika

Nové módy korónového výboje

Autor: Bc. Barbora Štěpánková
Ročník: M2
Ústav: fyziky a měřicí techniky
Školitel: Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.

Sledovali jsme korónový výboj při různých hodnotách předřadné impedance a získali jsme představu o jeho chování, stabilitě a režimech, které zde vznikají. Přidáním paralelně zapojených kondenzátorů jsme získali nové režimy a odlišné tvary charakteristik. V kladné koróně jsme navíc pozorovali dosud v literatuře nepopsané režimy nazvané pracovní jako „zakřivená jiskra“ (zhruba v polovině jiskry je vidět malé zakřivení) nebo „kanál-nic-kanál“ (zhruba v polovině je streamer přerušen temnou oblastí). V záporné koróně jsme kromě známých režimů pozorovali režimy „plápolavý“ (připomínající doutnavý výboj), „rozvětvené jiskry“ nebo „makovou panenku“ (tvar streamru připomíná makovou panenku). Dosažené výsledky představují přínos k aplikaci korónových výbojů v naší laboratoři.

Sekce: Fyzika a měřicí technika

Červené a modré zemiakové lupienky – meranie farebnosti a jej porovnanie s antioxidačnou kapacitou

Autor: Martina Živčáková
Ročník: B2
Ústav: fyziky a měřicí techniky
Školitel: Ing. Anna Korbářová, Ph.D.

Odrody zemiakov s červenou a modrou dužinou sa pestujú zatiaľ len ako delikatesa pre spestrenie trhu. V poslednej dobe im je zo zdravotných dôvodov venovaná väčšia pozornosť. Antioxidačná kapacita červeno alebo modro zafarbených zemiakov je 2-3× vyššia v porovnaní so zemiakmi s bielou alebo žltou dužinou. Zemiaky by mohli teda zvýšiť príjem antioxidantov v ľudskej strave. V tejto práci sme sa sústredili predovšetkým na meranie farebnosti zemiakových lupienkov vyrobených z vybraných odrôd zemiakov. Zastúpené boli tradične ako žlté fenotypy tak i dva druhy červených odrôd a štyri druhy odrôd modrých. Farebnosť lupienkov bola vyhodnotená obrazovou analýzou s využitím digitálnej kamery a softwaru NIS-Elements. Výsledky boli spracované tak ako pre klasický farebný model RGB, tak i model Lab, preferovaný medzi odborníkmi z potravinárskych oborov. V závere práce bola farebnosť porovnávaná s antioxidačnou kapacitou lupienkov resp. s obsahom fenolických látok a bola skúmaná vzájomná korelácia týchto parametrov.

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:	Čechová Judita Hájek Michal Hasal Ludvík Polák Ondřej Bc. Rejta Michal Schatz Martin Ťupa Ondřej Vacek Miroslav

Sekce: Inženýrská informatika, zpracování obrazů a řízení procesů

Návrh multimediálního programu na podporu výuky databázových systémů

Autor: Judita Čechová
Ročník: B3
Ústav: počítačové a řídicí techniky
Školitel: Ing. Jaroslav Vovsík, Ph.D.

Cílem práce je vytvoření návrhu multimediálního programu na podporu výuky databázových systémů, který by studentům přístupnou formou osvětloval problematiku databázových systémů, zejména těch oblastí, které jsou z běžných statických přednášek obtížněji pochopitelné.

Při návrhu vhodného objemu učiva jsou brány jako výchozí body jednak osnova předmětu DBS, jednak soukromý průzkum provedený formou dotazníku mezi studenty, jehož cílem je zjistit, které pasáže jsou studenty nejčastěji vnímány jako obtížné a proč. Při výběru vzorových příkladů sloužících k výuce je pak třeba věnovat zvláštní pozornost zejména těmto pro studenty obtížným pasážím a pokusit se předložit názorné příklady, které jednak co nejsrozumitelněji popisují základní pravidla a navíc na danou problematiku nahlíží z více možných úhlů pohledu, včetně případných výjimek.

Výsledkem je sada příkladů na výuku a návrh konkrétního řešení aplikace.

Sekce: Inženýrská informatika, zpracování obrazů a řízení procesů

Sledování habituace a únavy modelováním kognitivních evokovaných potenciálů Pronyho filtrem

Autor: Michal Hájek
Ročník: B3
Ústav: počítačové a řídicí techniky
Školitel: Mudr. Oldřich Vyšata, Ph.D.

Problém signálu pořízeného na elektroencefalografu (EEG) je okolní rušení a vznik fragmentů během nahrávání. Pomocí číslicové filtrace je možné rušivou složku signálu částečně potlačit, přesto není možné studovat jednotlivé události. Často je přitom k vyhodnocení potřeba velkého množství dat. Běžně užívanou metodou vyhodnocení evokovaných potenciálů je zprůměrnění, které předpokládá, že se v průběhu stimulace parametry evokovaných potenciálů nemění. To však neodpovídá realitě, protože při delší stimulaci dochází ke snižování amplitudy habituací a prodloužením latence pro únavu. Zprůměrnění tedy deformuje tvar potenciálu a nezohledňuje individuální sklony k habituaci a únavě. Pokud je nutné sledovat i tyto parametry, je třeba hodnotit individuální odpovědi, které jsou u reálných dat silně kontaminované šumem. Cílem vlastní práce je vytvoření a popis vhodného modelu Pronyho metodou a jeho využití pro hledání parametrů latence a amplitudy. Vlastní práce zahrnuje popis pořizování reálných dat a jejich vyhodnocení.

Sekce: Inženýrská informatika, zpracování obrazů a řízení procesů

Příprava laboratorní úlohy číslicového řízení pece

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

Cílem této práce je připravit řídicí systém pro fyzikální model malé pícky. Pec bude řízena pomocí nového programovatelného automatu S7-1200 od firmy Siemens. Automat může být ovládán přes připojený počítač, nebo přes dotykový displej KTP600. Jde o programovatelný dotykový displej, který slouží k řízení procesů a zároveň jako indikátor chybových hlášení, či pro zobrazování řízené veličiny.

Samotný model pícky se skládá z topného tělesa, dvou termočlánků na měření teploty na různých místech a ventilátoru pro simulaci poruchy ofukováním tělesa pícky. Pomocí termočlánků snímáme teplotu v pícce, analogové signály z těchto dvou čidel tvoří vstupy pro automat, který pak bude následně regulovat teplotu v pícce příkonem topného tělesa.

V referátu je popsán vlastní model pícky a vlastnosti automatu S7-1200 a dotykového displeje KTP600, které budou tvořit řídicí systém. Dále budou uvedeny základní funkce vývojového prostředí STEP 7, v němž bude řídicí systém pícky vytvořen, jako např. jazyky, obrazovky, konfigurace.

Sekce: Inženýrská informatika, zpracování obrazů a řízení procesů

Zobrazování dat uložených v XML

Autor: Ondřej Polák
Ročník: B2
Ústav: počítačové a řídicí techniky
Školitel: Ing. Jaroslav Vovsík, Ph.D.

Stručný popis vzniku jazyka XML. Srovnání jazyků XML a HTML. Pravidla a struktura XML dokumentů včetně jednoduchých příkladů. Příklady aplikací XML v různých odvětvích. Význam DTD v jazyce XML.

Sekce: Inženýrská informatika, zpracování obrazů a řízení procesů

GUI pro zpracování mikroskopických snímků nanomateriálů

Autor: Michal Rejta
Ročník: M2
Ústav: počítačové a řídicí techniky
Školitel: Ing. Martina Mudrová, Ph.D.

Projekt je zaměřen na rozbor tvorby grafického uživatelského rozhraní (GUI) jako podpůrného prostředku pro nastavení parametrů jednotlivých metod aplikovaných při zpracování mikroskopických snímků nanomateriálů. Výstupy z této analýzy poslouží jako podklad pro nastavení vybraných koeficientů při hromadném zpracování těchto snímků pomocí metod distribuovaného počítání.

GUI je zaměřeno na zpracování a zaznamenání vstupních a výstupních dat tak, aby byla zajištěna reprodukovatelnost jednotlivých pokusů a dostupnost všech výsledků pro jejich vzájemné porovnání.

Při práci tvoříme programovou realizaci GUI ve formě funkce s vnořenými funkcemi volanými jednotlivými grafickými řídicími objekty. Je zde také řešena komunikace s dalšími výpočetními funkcemi vytvořenými pro vlastní zpracování mikrosnímků. Pro předávání dat mezi programovými jednotkami je použita možnost struktury Application Data. Při programové realizaci je kladen důraz na separaci řídicího a výkonného kódu. Algoritmus je vyvíjen v programovém prostředí Matlab.

Sekce: Inženýrská informatika, zpracování obrazů a řízení procesů

Grafické uživatelské rozhraní pro presentaci výsledků neuropsychologických experimentů

Autor: Martin Schätz
Ročník: B2
Ústav: počítačové a řídicí techniky
Školitel: Mudr. Oldřich Vyšata, Ph.D.

Tato práce prezentuje možnosti zpracování EEG signálu ve výpočetním prostředí MATLABu pomocí grafického uživatelského rozhraní, jehož tvorbu program umožňuje. Cílem příspěvku je navrhnout uživatelské rozhraní, které umožní zpracování výstupu neuropsychologických experimentů, a přehledně zobrazí jeho výsledky.

Při experimentu je pacient napojen na EEG, které zaznamenává signál ze tří elektrod a časy, ve kterých pacient reaguje na podněty stisknutím tlačítka. Pacientovi se na obrazovce objevují čtyři písmena, přičemž při zobrazení dvou určených písmen stiskne levé tlačítko a u druhých dvou určených pravé tlačítko. Pokud se písmeno zbarví do červena, nemá pacient reagovat, a pokud se písmeno zbarví do modra, tak si vybírá, zda reagovat nebo ne.

Výstupem experimentu je záznam signálu se čtyřmi kanály a tabulka se záznamy reakcí pacienta na podněty. Navržené uživatelské rozhraní umožňuje zobrazení a procházení původního i odfiltrovaného signálu EEG pro jednotlivé kanály, zobrazení kanálu s časovými údaji reakce pacienta, reakční časy při různých podnětech, zprůměrnění evokovaných potenciálů v závislosti na stisku tlačítka a zprůměrnování všech evokovaných potenciálů bez ohledu na stisk tlačítka.

Sekce: Inženýrská informatika, zpracování obrazů a řízení procesů

MULTISCALE PEAK DETECTION IN EMG SIGNAL ANALYSIS

Autor: Ondřej Ťupa
Ročník: B3
Ústav: počítačové a řídicí techniky
Školitel: Prof. Aleš Procházka, CSc

Elektromyografie (EMG) je jediná vyšetřovací technika umožňující objektivní vyšetření neuro-muskulárního stavu pacienta. Záznam takového vyšetření je časová závislost složené aktivity jednotlivých svalových vláken v dané oblasti projevujících se svými typickými pozitivně-negativními záchvěvy. Z takových signálů můžeme pomocí matematických metod číslicového zpracování signálu extrahovat řadu cenných informací o vztahu mezi chováním svalů a neuronů. Hlavními potřebnými parametry jsou velikosti amplitud, doba trvání a frekvence pálení motorických jednotek jednotlivých svalových vláken. Na základě těchto charakteristik je pak možno na určité statistické hladině významnosti detekovat poruchy svalů (Myopatie) a nervů (Neuropatie). V předložené práci je navržena vlastní metoda detekce extrémních hodnot pozorovaných dat pomocí prahování dekompozičních koeficientů diskrétní wavelet („vlnkové“) transformace v první a druhé úrovni rozkladu daných signálů. Analýza je prováděna na různých prahových úrovních odvozených od absolutního maxima zkoumaného signálu. Vlastní práce je věnována studii vybraných reálných EMG záznamů, jejich analýze a následnému rozlišení mezi zdravými jedinci a pacienty s neuropatií. Součástí práce je návrh grafického uživatelského rozhraní (GUI) pro zpracování datových záznamů v prostředí výpočetního systému MATLAB.

Sekce: Inženýrská informatika, zpracování obrazů a řízení procesů

Regulace průtoku s využitím rotametru a digitální kamery

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

Rotametr je jednoduchý senzor průtoku tekutin, který ovšem nemá žádný digitální ani analogový výstup. S využitím digitální kamery, která rotametr snímá, se získávají jeho obrazy a kamera tak nahrazuje obsluhu (která za normálních okolností musí sledovat polohu plováčku a provádět případný zásah ručně).

Obrazová data jsou zpracována v programu Matlab a výstupem je pozice plováčku, která určuje aktuální průtok. Díky zaznamenání této informace je možné automaticky regulovat průtok na zvolenou žádanou hodnotu. Další výhodou použití digitální kamery a Matlabu je možnost sledování průběhu průtoku v čase a jeho případná archivace.

Součástí projektu je grafické uživatelské rozhraní, které umožňuje například sledovat průtok, nastavit žádanou hodnotu atd.