

Seznam sekcí a složení komisí

Sekce: **Analytická chemie (přednášková)**
posluchárna A21, 8.30 hod

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Oto Mestek, CSc.

Členové: Ing. Kamil Záruba, Ph.D.

Mgr. Tatiana Šiškanová, CSc.

Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.

Ing. Martin Člupek, Ph.D.

Soutěžící: Eichler Štěpán
Bc. Jakubek Milan
Kaňa Antonín
Kessler Jiří
Plátová Marie
Štulcová Tereza

Sekce: **Molekulová spektroskopie (přednášková)**
posluchárna A105, 8.30 hod

Komise:

Předseda: Prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka

Členové: Doc. Ing. Vladimír Setnička, Ph.D.

Mgr. Alla Synytsya, Ph.D.

Mgr. Tereza Uhlíková, Ph.D.

RNDr. Ján Pásztor (zástupce firmy Nicolet CZ)

Soutěžící: Cieslarová Zuzana
Dejlová Barbora
Bc. Gráfová Michaela
Kokaislová Alžběta
Konopka Ladislav
Kroupa Martin
Staš Martin
Štovíček Jan

Sekce: **Aplikovaná fyzikální chemie (přednášková)**
místnost A402, 8.00 hod.

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Pavel Chuchvalec, CSc.

Členové: Doc. Ing. Lidmila Bartovská, CSc.
Ing. Dana Fenclová, CSc.

Soutěžící: Baránková Eva
Haidl Jan
Matuška Petr
Daniel Radotínský
Rotrekl Jan
Šimurka Lukáš
Štejfa Vojtěch
Vlk Ondřej

Sekce: **Teoretická fyzikální chemie (přednášková)**
místnost A125, 8.30 hod.

Komise:

Předseda: Prof. RNDr. Petr Voňka, CSc.

Členové: Prof. Ing. Anatol Malijevský, CSc.
Ing. Milan Ovčák

Soutěžící: Bouček Michal
Červinka Ctirad
Daniel Hollas
Chmela Jiří
Kubelová Lucie
Trnka Tomáš

Sekce: **Matematické modelování v chemickém inženýrství
(přednášková)
posluchárna BIII, 8.30 hod**

Komise:

Předseda: Prof. Ing. Igor Schreiber, CSc.

Členové: Ing. Martin Kohout, PhD.

Ing. Jan Štěpánek

Ing. Alexandr Zubov - zástupce sponzora

Soutěžící:

Dudák Michal

Ferkl Pavel

Bc. Hloužek Jakub

Klejch Martin

Kolda Jan

Labík Libor

Mráček David

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

Komise:

Předseda: Doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha

Členové: Ing. Zdeněk Grof, PhD.

zástupce sponzora

Ing. Otto Hadač

Ing. Josef Chmelař

Soutěžící:

Jakubec Martin

Bc. Kotala Tomáš

Kremláčková Zuzana

Nistor Andra

Opletal Michal

Šíma Jan

Ullrich Martin

Váchová Tereza

Zuček Karel

Sekce: **Procesní a chemické inženýrství 2 (přednášková)**
posluchárna B141b, 8.30 hod

Komise:

Předseda: Doc. Ing. František Štěpánek, PhD.

Členové: Ing. František Jonáš Rejl, PhD.

zástupce sponzora

Ing. Walter Schrott

Ing. Šárka Bártová

Soutěžící:

Beránek Pavel

Brož Michal

Bc. Gubiš Jan

Kuchař Jan

Sarvašová Nina

Solich Jaroslav

Štěrbák Martin

Vachková Eliška

Sekce: **Řízení materiálových toků (přednášková)**
posluchárna C11, 8.00 hod

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Božena Kadeřábková, CSc.

Členové: Ing. Dana Strachotová, Ph.D.

Ing. Jakub Dyntar, Ph.D.

Ing. Petra Vegnerová, Ph.D.

Soutěžící:

Bc. Danyluková Tereza

Gros Ivan

Bc. Hyršl Ondřej

Bc. Káninský Matěj

Klička Jan

Bc. Kolčavová Alexandra

Bc. Karel Mikota

Pospíchalová Eva

Przeczek Libor

Sekce: **Podnikový management a marketing (přednášková)**
posluchárna C13, 8.00 hod

Komise:

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

Členové: Doc. Ing. Jana Frková, Ph.D.

Mgr. Ing. Marek Boteck, Ph.D.

Soutěžící: Bc. Branišová Jana
Hoserová Lenka
Ing. Hucková Martina
Klímová Kateřina
Knápková Monika
Podskočová Gabriela
Bc. Pudilová Michaela
Stružková Veronika

Sekce: **Fyzika a měřicí technika (přednášková)**
posluchárna B220, 9.00 hod

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Jaroslav Hofmann, CSc.

Členové: Dr. Mgr. Jana Jirešová

Ing. Filip Vysloužil, Ph.D.

Soutěžící: Bc. Kommová Lucie
Kotúčová Soňa
Kvasničková Eva
Ondrčková Sandra
Bc. Štěpánková Barbora
Urbánková Eliška

Sekce: **Analytická chemie (přednášková)**
posluchárna A21, 8.30 hod

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Oto Mestek, CSc.

Členové: Ing. Kamil Záruba, Ph.D.

Mgr. Tatiana Šiškanová, CSc.

Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.

Ing. Martin Člupek, Ph.D.

Soutěžící:

Eichler Štěpán

Bc. Jakubek Milan

Kaňa Antonín

Kessler Jiří

Plátová Marie

Štulcová Tereza

Sponzoři sekce Analytická chemie:

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



Sekce : Analytická chemie

Speciační analýza selenu s využitím HPLC a ICP/MS pro výzkum distribuce selenu v bariérách jaderného úložiště

Autor: Štěpán Eichler
Ročník: M2
Ústav: analytické chemie
Školitel: doc. Ing. Oto Mestek, CSc.

Ukládání radioaktivního odpadu je problematika, která je zejména v poslední době značně diskutována. V případě modelování retence různých chemických forem radionuklidů v úložištích je třeba znát složení a rozpustnost limitujících složek, což znamená zabývat se specií příslušných prvků za daných podmínek. Jedním ze sledovaných prvků je radioaktivní izotop selenu ^{79}Se (poločas rozpadu 65 000 let), který může přecházet do různých speciačních forem jako je seleničitan, selenan a hydrogenselenid, které je nutno pomocí vhodných technik analyzovat. Modelové pokusy probíhají s neradioaktivním selenem. Pro speciační analýzu bylo použito on-line spojení ICP/MS a kapalinové chromatografie na obrácených fázích nebo iontově výměnné chromatografie. Měření probíhala na linii izotopu ^{80}Se v režimu dynamické reakční cely, jejíž parametry byly před měřením optimalizovány. Pro kvantitativní analýzu specií byla stanovena mez detekce a ověřena linearita kalibrace.

Sekce: Analytická chemie

Studium komplexace bis-Trögerovýchází pomocí spektroskopie NMR

Autor: Bc. Milan Jakubek
Ročník: M1
Ústav: analytické chemie
Školitel: Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.

Jednou oblastí analytické chemie je senzorová analýza využívající jako receptory organické látky. Molekulární pinzety na základě bis-Trögerovýchází jsou potenciálními receptory důležitých elektron-deficitních sloučenin např. nitroaromátů (detekce výbušnin). Tato práce se zabývá studiem komplexace čtyř bisTB derivátů s 1,3,5-trinitrobenzenem, 1,4-dikyanobenzenem a 1,2,4,5-tetrakyanobenzenem pomocí titračních experimentů monitorovaných ^1H NMR spektry. Ze získaných dat byly vypočteny asociační konstanty dosahující hodnoty až $10^2 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$. Pozornost byla věnována též komplikacím s volbou referencování NMR spekter, možnou dimerizací bisTB a samotným provedením titrace. Nalezené výsledky dokládají aplikační potenciál bisTB derivátů.

Sekce : Analytická chemie

Využití dynamické reakční cely pro stanovení železa metodou ICP-MS

Autor: Antonín Kaňa
Ročník: M2
Ústav: analytické chemie
Školitel: doc. Ing. Oto Mestek, CSc.

Stanovení železa metodou hmotnostní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem je komplikováno přítomností spektrálních interferencí polyatomických iontů, zejména ArO^+ a CaO^+ . Cílem práce bylo testovat možnost redukce interferencí použitím dynamické reakční cely, která byla plněna buď kolizním plynem heliem, nebo reakčním plynem methanem. Aby bylo dosaženo maximální účinnosti eliminace interferujících iontů, byly parametry nastavení dynamické reakční cely optimalizovány. Stanovení železa bylo testováno na liniích izotopů ^{56}Fe a ^{57}Fe . U optimalizované metodiky analýzy byla stanovena mez detekce a linearita kalibrační závislosti. Správnost stanovení byla ověřena analýzou certifikovaného referenčního materiálu.

Sekce : Analytická chemie

Vazebné vlastnosti tris-Trögerových bazí

Autor: Jiří Kessler
Ročník: M1
Ústav: analytické chemie
Školitel: Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.

Trögerovy báze jsou kondenzační sloučeniny aromatických aminů s formaldehydem. Dle počtu diazocínových systémů rozlišujeme několik typů oligo-Trögerových bazí. Jedním z nich jsou tris-Trögerovy báze, které mohou tvořit tři diastereoizomery (anti,anti; syn,anti; syn,syn). Z těchto izomerů je strukturně nejzajímavější izomer syn,syn, který má strukturu molekulárních kleští. V rámci této práce byl vyvinut syntetický postup přípravy tris-Trögerových bazí, pomocí NMR technik rozlišeny jednotlivé diastereoizomery, prozkoumány diastereoizomerizační rovnováhy s cílem optimalizovat výtěžek diastereoizomeru syn,syn. Následně byly všechny diastereoizomery podrobeny komplexačním studiím s modelovým analytem 1,2,4,5-tetrakyanobenzenem a podrobeny studiím na chirální chromatografické koloně za účelem nalezení podmínek chirální separace jednotlivým enantiomerů připravených diastereoizomerů.

Sekce: Analytická chemie

Studium chromatografických vlastností nového typu sorbentu založeného na silikagelu modifikovaném porfyrin-cyklodextriny

Autor: Marie Plátová
Ročník: M2
Ústav: analytické chemie
Školitel: Ing. Magda Vosmanská, CSc.

Vysokoúčinná kapalinová chromatografie (HPLC) patří mezi základní separační techniky. Využívá se k analýze celé řady látek jak achirální, tak i chirální povahy. Důležitou roli při stanovení určitého analytu hraje vhodně zvolená stacionární fáze. Jednu ze zajímavých skupin stacionárních fází představují porfyrin-cyklodextrinové konjugáty.

Předkládaná práce představuje začátek systematické studie popisující charakteristické chromatografické vlastnosti stacionárních fází založených na silikagelu modifikovaném porfyrin-cyklodextriny. Tyto stacionární fáze byly připraveny nekovalentním navázáním porfyrin-cyklodextrinu na silikagel, na Ústavu analytické chemie VŠCHT Praha. Při testovacích experimentech byly srovnávány dvě nové fáze s nemodifikovaným silikagelem a s komerčně dostupnou kolonou ChiraDex®.

Sekce: Analytická chemie

Chelátory biologicky významných kovů

Autor: Tereza Štulcová
Ročník: B2
Ústav: analytické chemie
Školitel: prof. RNDr. Vladimír Král, DSc.

Chelátory jsou ligandy obsahující kyslíkové a/nebo dusíkové donorní skupiny, díky nimž jsou schopny pevně vázat ionty přechodných kovů, zejména železa. Uplatnění nalézají nejen v analytické chemii; chelátory na bázi hydrazonů jsou využívány jako terapeutika při léčbě nemocí souvisejících s přebytkem železa v organismu (thalasemie, mrtvice, nemoci srdce či jater), mnohdy vykazují také antimikrobiální, fungicidní nebo protimalarické účinky. V mnoha případech vykazují výraznou protirakovinnou aktivitu. V této práci byla připravena série 24 strukturně příbuzných tridentátních chelátorů na bázi heteroaryl- a aroylhydrazonů. Jako vazebné místo pro chelataci kovů slouží dusík heteroaromatického systému nebo karbonylový kyslík, dále pak enaminový dusík a fenolická hydroxyskupina z aldehydické části molekuly chelátoru (NNO a ONO chelátory). Byla studována vazba iontů biologicky významných kovů za účelem nalezení vztahů mezi strukturními motivy chelátoru (vliv přítomnosti heteroatomů, elektrondonorních a akceptorních skupin na specifických pozicích) a silou komplexace. Byly vytipovány nadějně chelátory pro biologické studie, které byly poskytnuty spolupracující skupině na ÚMG AV ČR (in vitro testy protirakovinné aktivity).

Sekce: **Molekulová spektroskopie (přednášková)
posluchárna A105, 8.30 hod**

Komise:

Předseda: Prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka

Členové: Doc. Ing. Vladimír Setnička, Ph.D.

Mgr. Alla Synytsya, Ph.D.

Mgr. Tereza Uhlíková, Ph.D.

RNDr. Ján Pásztor (zástupce firmy Nicolet CZ)

Soutěžící:

Cieslarová Zuzana

Dejlová Barbora

Bc. Gráfová Michaela

Kokaislová Alžběta

Konopka Ladislav

Kroupa Martin

Staš Martin

Štovíček Jan

Sponzoři sekce Molekulová spektroskopie:

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



Sekce : Molekulová spektroskopie

Povrchem zesílená vibrační spektrometrie extraktů listoví ibišku (Hibiscus L.)

Autor: Zuzana Cieslarová
Ročník: M1
Ústav: analytické chemie
Školitel: prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka

Povrchem zesílená infračervená absorpce (SEIRA) a povrchem zesílená Ramanova spektrometrie (SERS) jsou metody umožňující studium analytů obsažených ve vzorku ve velmi malých množstvích. Ramanovou spektrometrií byly již dříve studovány karotenoidy obsažené v listoví různých druhů dřevin. Využitím extrakce jako separačního kroku lze získat vzorky obsahující různé zastoupení pigmentů dle použitého extrakčního činidla. Vzhledem k nízké koncentraci pigmentů v extraktu, nebylo možno po odpaření rozpouštědla získat Ramanova spektra odparku. Sorpcí odparku na zlatých površích by mělo být možné využít efekt povrchového zesílení spekter, a získat tak požadovaná spektra extrahovaných látek.

Cílem této práce bylo vyzkoušet možnost analyzovat extrakty listoví povrchem zesílenými spektroskopickými technikami. Listy ibišku byly extrahovány třemi různými extrakčními činidly (methanol, cyklohexan a aceton). Vzniklý extrakt byl deponován na zlatem pokovené terčičky tak, aby se vytvořil tenký film extraktu na povrchu terčičky. Byla měřena Ramanova a infračervená spektra tenké vrstvy na terčičkách. Naměřená spektra byla porovnána a bylo sledováno, zda dochází k povrchovému zesílení.

Sekce : Molekulová spektroskopie

Studium komplexace derivátů kobalt bis(dikarbollidu) s vybranými excipienty

Autor: Barbora Dejlová
Ročník: B2
Ústav: analytické chemie
Školitel: prof. RNDr. Vladimír Král, DSc.

Tato práce navazuje na dlouholetý výzkum skupin prof. Krále a doc. Konvalinky (AV ČR), který se zabývá deriváty kobalt bis(dikarbollidu) jako inhibitorů HIV proteázy, enzymu důležitého pro replikaci viru. Komplikací pro využití těchto látek je jejich hydrofobicita, která způsobuje nízkou rozpustnost a agregaci ve vodném prostředí. V předešlých pracích bylo nalezeno několik excipientů zvyšujících rozpustnost a potlačujících agregaci, avšak příliš silná vazba s některými excipienty paradoxně snižuje biologickou aktivitu. Tato práce se zabývá hlubší studií vazby skupiny derivátů kobalt bis(dikarbollidu) s vybranými excipienty za zvolených podmínek. Nejprve byla detailně studována interakce modelového derivátu s excipienty a následně nalezeny podmínky, při kterých lze tento derivát využít ke screeningu rozsáhlé skupiny ostatních derivátů pomocí vytěšňovacích komplexací. Byl studován také vliv DMSO (rozpouštědla běžně používaného při studiích inhibiční aktivity) na interakci modelového derivátu s excipienty. Dále byla zjištěna rozpustnost všech studovaných derivátů ve vodě, fyziologickém roztoku a fyziologickém roztoku s lidským sérovým albuminem. Získaná data slouží jako základ pro volbu vhodných excipientů pro in vitro (AV ČR, Univ. Heidelberg) a in vivo testy (LF UP a FN Olomouc).

Sekce: Molekulová spektroskopie

Charakterizace modifikovaných chitosanových filmů pro jejich potenciální využití

Autor: Bc. Michaela Gráfová
Ročník: M1
Ústav: analytické chemie
Školitel: Mgr. Alla Synytsya, Ph.D.

V posledních letech je výzkum léčby melanomových onemocnění zaměřen na hledání nových léčivých biodegradabilních materiálů, jejichž aplikace by byla účinná a snadná. Jedním způsobem léčby může být použití hydrokoloidních polysacharidových filmů modifikovaných léčivou látkou. V léčbě nádorových a dalších onemocnění kůže se osvědčily porfyrinové deriváty, zejména meso-tetrakis(4-sulfonátofenyl)porfyrin (TPPS₄). Fotoaktivní barvivo bylo navázáno na chitosanový film upravený přídáním methylcelulosy. Methylcelulosa zde plní funkci plastifikátoru a zároveň je netečná vůči TPPS₄. Kompozitní film byl připraven v poměru chitosan:methylcelulosa 1:3, 1:1, 3:1 a zkoumán z hlediska: obsahu vázané vody, časové rozpustnosti filmu ve vodě, časové adsorpce TPPS₄ na povrchu filmu. Byly použity metody: gravimetrie, UV-Vis, IČ spektroskopie, skenovací elektronové mikroskopie (SEM). Byly navrženy další oblasti zkoumání: modifikace filmů jiným změkčovadlem a jejich aplikace *in vitro*.

Sekce : Molekulová spektroskopie

Studium adsorpce thiolových derivátů na povrchu mědi s využitím povrchem zesílených spektroskopických technik

Autor: Alžběta Kokaislová
Ročník: M2
Ústav: analytické chemie
Školitel: prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka

Spektroskopie povrchem zesíleného Ramanova rozptylu (Surface-Enhanced Raman Scattering - SERS) a povrchem zesílené infračervené absorpce (Surface-Enhanced InfraRed Absorption - SEIRA) jsou analytické metody využívané při detekci a identifikaci molekul organických látek adsorbovaných na površích vybraných kovových substrátů. Hlavní předností těchto metod je možnost sledování adsorbovaných látek v monomolekulárním a sub-monomolekulárním pokrytí povrchu.

Na základě posouzení aktivity normálních vibračních módů studovaných molekul v infračerveném i Ramanově spektru a rozboru jak nezesílených, tak povrchem zesílených infračervených a Ramanových spekter je možné určit způsob sorpce molekul na povrch kovového substrátu a jejich výslednou geometrickou orientaci. Architektura povrchových vrstev je důležitým faktorem při návrhu a konstrukci senzorů založených na molekulárně rozpoznávacích prvcích zakotvených na površích kovových substrátů.

V práci jsou popsány výsledky modelových studií adsorpce vybraných thiolových aromatických a heterocyklických derivátů (benzendithiolů, kyseliny 4-merkaptobenzoové, 2-merkaptopyrimidinu a kyseliny 2-thiobarbiturové) na povrchu elektrochemicky připravených měděných substrátů.

Sekce : Molekulová spektroskopie

Chiroprické studium anti-mutagenních vlastností žlučových pigmentů

Autor: Ladislav Konopka
Ročník: B3
Ústav: analytické chemie
Školitel: prof. RNDr. Marie Urbanová, CSc.

Biliverdin je zelené žlučové barvivo. Vzniká metabolickým rozkladem hemu, který je součástí např. hemoglobinu nebo cytochromů. U mnoha živočichů se redukcí biliverdinu vytváří další žlučové barvivo – bilirubin. Tato barviva bývala dříve spojována pouze s pojmy jako "odpadový produkt metabolismu" nebo "toxin". Velmi dobře je známa klinická komplikace novorozenecké žloutenky, tzv. bilirubinová encefalopatie. V současnosti se ukazuje, že žlučová barviva mají také velmi silné antioxidační a protizánětlivé účinky. To je vhodný předpoklad pro jejich využití při kardiovaskulárních, nádorových či revmatologických onemocněních. Ačkoli pozitivní účinky žlučových barviv jsou známy, strukturní změny, doprovázející jejich antipatogenní aktivity nebyly dosud charakterizované.

Předmětem předkládané práce je strukturní studium spojené s další významnou vlastností těchto barviv - antimutagenitou. V práci byla pro sledování asociátů žlučových pigmentů se strukturními analogy mutagenů využita spektroskopie elektronového cirkulárního dichroismu, metoda inherentně citlivá ke struktuře chirálních látek. Sledováním signálů spojených s chromofory bylo ukázáno, že za určitých podmínek a za přítomnosti různých matric vytvářejí studovaná barviva s modelovými mutageny spektrálně charakterizované asociáty.

Sekce : Molekulová spektroskopie

Studium komplexů kyseliny listové s biogenními kovy chiroptickými metodami

Autor: Martin Kroupa
Ročník: B3
Ústav: analytické chemie
Školitel: Mgr. Iryna Goncharova, Ph.D.

Kyselina listová je významnou biogenní látkou podílející se na syntéze nukleových kyselin a krvetvorbě v lidském organismu. Její nedostatek zvyšuje riziko nemocí cév, srdce, osteoporózy, Alzheimerovy choroby a rakoviny. Komplexace kyseliny listové s biogenními kovy zprostředkuje jejich vstřebávání. Výjimkou je ale zinek. Vznikající komplex znesnadňuje transport jak zinku, tak i kyseliny listové v lidském organismu. Ačkoli byla provedena řada analytických studií, souvislost tohoto jevu s molekulovou strukturou nebyla dosud jednoznačně stanovena. Cílem této práce je s využitím metod vibračního a elektronového cirkulárního dichroismu, které vykazují vysokou citlivost ke struktuře chirálních molekulových systémů, charakterizovat odlišné strukturní vlastnosti komplexů zinku a ostatních kovů s kyselinou listovou v roztoku.

V práci je na základě spektrálních pozorování charakterizována odlišnost komplexů manganu, mědi, a železa s kyselinou listovou od komplexů kyseliny listové se zinkem. Určení stechiometrie komplexu se zinkem bylo prováděno Jobovou metodou a ECD titrací. Byl prokázán vliv pH na strukturu komplexu. Ze změřené koncentrační a časové závislosti se dá usuzovat na samoskladbu komplexu.

Sekce: Molekulová spektroskopie

Spektroskopické studium interkalace hydrofobních porfyrinových derivátů do polysacharidové matrice

Autor: Martin Staš
Ročník: M2
Ústav: analytické chemie
Školitel: Mgr. Alla Synytsya, Ph.D.

Spektroskopické metody analýzy jsou efektivním prostředkem pro studium modelových i reálných složitých systémů. Zejména UV–VIS a Ramanova spektrometrie byla použita při studiu interkalací hydrofobních porfyrinových derivátů do polysacharidové matrice. Sledování časové stability ve vodě rozpustných pektin–tetrafenylporfinového a pektin–tetrafenylporfin–chitosanového komplexů poukázalo na efektivní vložení hydrofobního tetrafenylporfinu (TPP) do helikální šroubovice polysacharidů a vytvoření stabilního komplexu. Kvantitativní vyhodnocení těchto komplexů dovolují odhadnout množství navázaného porfyrinového derivátu. Výsledky získané Ramanovou spektroskopií odhalují typy interakcí, které se účastní při včlenění porfyrinů do polysacharidového řetězce.

Spektroskopické studium takových komplexů výrazně napomáhá odhalení možného mechanismu jejich vzniku, což může značně přispět k usnadnění aplikace porfyrinových derivátů jako fotosenzitivních látek ve fotodynamické terapii.

Sekce: Molekulová spektroskopie

Studium tlakové závislosti molekulové geometrie oxidu uhelnatého

Autor: Jan Šťovíček
Ročník: B3
Ústav: analytické chemie
Školitel: prof. RNDr. Štěpán Urban, CSc.

Frekvence rotačních přechodů (2-1 a 3-2) oxidu uhelnatého byla změřena včetně své tlakové závislosti s důrazem na vysokou pravdivost odečtu frekvencí. Frekvence přechodů byly vyhodnoceny prostřednictvím tlakově závislých spektroskopických parametrů, ze kterých byla odvozena přesná mezijaderná vzdálenost atomů uhlíku a kyslíku, která má měřitelnou závislost na tlaku. Vlastní měření a jeho vyhodnocení bude předmětem sdělení v mezinárodním recenzovaném časopise.

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

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Pavel Chuchvalec, CSc.

Členové: Doc. Ing. Lidmila Bartovská, CSc.
Ing. Dana Fenclová, CSc.

Soutěžící: Baránková Eva
Haidl Jan
Matuška Petr
Daniel Radotínský
Rotrekl Jan
Šimurka Lukáš
Štejfa Vojtěch
Vlk Ondřej

Sekce Aplikovaná fyzikální chemie je sponzorována z prostředků projektu **DoubleNanoMem: Nanokompozitní a nanostrukturní polymerní membrány pro separaci plynů a par** (č. NMP3-SL-2009-228631) – evropský výzkumný projekt 7. Rámcového Programu EK pro roky 2007–2013.



Sekce : Aplikovaná fyzikální chemie

Stanovenie rovnováhy kvapalina-para binárnych systémov metódou headspace plynovej chromatografie

Autor: Eva Baránková
Ročník: M1
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Doc. Ing. Vladimír Dohnal, CSc..

Bola vypracovaná nová rýchla technika stanovenia rovnováhy kvapalina-para metódou headspace plynovej chromatografie využívajúca komerčný automatizovaný dávkovač a nevyžadujúca kalibráciu chromatografickej odozvy. Technika bola aplikovaná na priemyslovo významné binárne azeotropické systémy obsahujúce methanol. Získané výsledky vykazujú dobrú zhodu s literárnymi údajmi a verifikujú tak túto perspektívnu experimentálnu techniku.

Sekce : Aplikovaná fyzikální chemie

Měření limitního aktivního koeficientu vody v průmyslových rozpouštědlech metodou absorpce podsycené páry

Autor: Jan Haidl
Ročník: M2
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Doc. Ing. Vladimír Dohnal, CSc.

Limitní aktivní koeficient je veličina důležitá pro termodynamický popis kapalných roztoků o nízké koncentraci. V chemickém průmyslu je znalost limitního aktivního koeficientu vody v rozpouštědle využívána pro výrobu velmi suchých rozpouštědel. Aktivní koeficient je v této práci stanovován technikou absorpce podsycené páry. Proud dusíku o definované relativní vlhkosti je připravován zařízením Controlled Evaporator Mixer a probubláván měřeným rozpouštědlem do dosažení ustáleného stavu. Výsledná koncentrace vody v rozpouštědle je stanovena titrací dle Karla Fischera. Data jsou měřena v koncentrační a teplotní závislosti a porovnávána s publikovanými hodnotami.

Sekce : Aplikovaná fyzikální chemie

Fyzikálně chemické vlastnosti nových alternativních rozpouštědel

Autor: Petr Matuška
Ročník: B3
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Doc. Ing. Karel Řehák, CSc.

V nedávné době byla uvedena na trh dvě nová rozpouštědla (2-methyltetrahydrofuran a cyklopentyl methyl ether), která mohou být z ekologického a bezpečnostního hlediska výhodnější alternativou mnoha doposud používaných látek. Práce se zabývá studiem fyzikálně chemických vlastností uvedených látek a experimentálním stanovením teplotních závislostí jejich hustot a tlaků nasycených par. Práce též studuje teoretické aspekty stavové rovnice PC-SAFT, které jsou nezbytné pro výpočet parametrů těchto rozpouštědel.

Sekce : Aplikovaná fyzikální chemie

Sorpce plynů a par organických látek v polymerech

Autor: Daniel Radotínský
Ročník: M1
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Doc. Ing. Milan Šípek, CSc.

V této práci byly studovány transportní vlastnosti oxidu uhličitého a par hexanu (při různých relativních tlacích) v nízkohustotním polyethylen (LDPE) při teplotě 298,15 K. Ke stanovení sorpce plynu a par hexanu v LDPE byla použita sorpční aparatura vybavená McBainovými spirálními vážkami. Na základě těchto měření byly vypočteny příslušné koeficienty sorpce S a difuze D oxidu uhličitého a par hexanu. Ke stanovení koeficientů propustnosti P plynu a par v LDPE byl použit diferenciální permeametr s nosným plynem (H_2). Podle rozpustnostně-difuzního modelu transportu par neporézními polymerními membránami je koeficient propustnosti dán součinem koeficientu sorpce a difuze, tedy $P = DS$. Platnost tohoto vztahu byla ověřena na systémech polymer-plyn (páry), kde jednotlivé transportní parametry nebyly koncentračně závislé. Cílem práce bylo pro systémy LDPE-hexan a LDPE- CO_2 zjistit a porovnat hodnoty koeficientů propustnosti stanovené z permeačních měření s koeficienty propustnosti dopočtenými podle rozpustnostně-difuzního modelu ze sorpčních měření.

Sekce : Aplikovaná fyzikální chemie

Rovnováha kapalina – pevná látka v binárních systémech iontových kapalin

Autor: Jan Rotrekl
Ročník: M1
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Dr. Ing. Pavel Vrbka

V předchozí práci byla metodou termické analýzy měřena rovnováha kapalina – pevná látka pro systém diethylamin s iontovou kapalinou 1-ethyl-3-methyl-imidazolium bis-(trifluoromethylsulfonil)imid. Na základě získaných dat byly pro iontovou kapalinu spočteny aktivitní koeficienty. Pro druhou složku, tj. diethylamin, nebylo možné aktivitní koeficienty spočítat, neboť pro tuto látku se v literatuře nepovedlo nalézt její entalpii tání, která je pro výpočet nezbytná.

V této práci byla metodou DSC stanovena entalpie tání diethylaminu. Tato hodnota byla využita pro výpočet aktivitních koeficientů z dat o rovnováze kapalina – pevná látka a rovněž z dat o rovnováze kapalina – kapalina studovaného systému, která do rovnováhy kapalina – pevná látka zasahuje.

Sekce : Aplikovaná fyzikální chemie

Experimentálne štúdium parciálnych molárnych objemov vybraných hydroxyderivátov alifatických uhľovodíkov v zriedených vodných roztokoch

Autor: Lukáš Šimurka
Ročník: M2
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Ing. Lubomír Hnědkovský, CSc.

Práce uvádza výsledky meraní hustoty vodných roztokov hydroxyderivátov alifatických uhľovodíkov. Dáta boli namerané na prístroji DSA 5000. Výsledky boli spracované do závislosti parciálneho molárneho objemu pri nekonečnom zriedení v závislosti na teplote. Na základe získaných hodnôt bola vytvorená príspevková metóda odhadujúca parciálny molárny objem.

Sekce : Aplikovaná fyzikální chemie

Tlak nasycených par vybraných terpenů

Autor: Vojtěch Štejfa
Ročník: B3
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Ing. Michal Fulem, Ph.D.

Terpeny jsou významné biogenní látky. Jediné záznamy o tlacích nasycených par, které lze nalézt v literatuře, jsou měření sloužící ke kontrole čistoty syntetizovaných látek. Tato měření však byla provedena jen pro jednu teplotu, často poměrně vysokou. Nelze jim tedy přisoudit vysokou spolehlivost a dají se použít spíše jako odhady pro výběr vhodné metody přesnějšího měření. V této práci jsme k němu použili statickou aparaturu STAT 6, která byla zkonstruována na našem pracovišti a která umožňuje stanovení tlaku nasycených par v teplotním rozsahu od 233 do 313 K a v tlakovém intervalu od 0,5 do 1333 Pa.

Sekce : Aplikovaná fyzikální chemie

Přesná měření termochemických vlastností pomocí kalorimetru TA Q1000

Autor: Ondřej Vlk
Ročník: B3
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Ing. Michal Fulem, Ph.D.

Kalorimetr TA Q1000 je diferenční skenovací kalorimetr, u kterého kvalita výsledků měření závisí především na pečlivé kalibraci přístroje a zvolené metodě měření. Cílem práce je nalezení a ustanovení vhodné metodiky měření termochemických vlastností (teplota a entalpie fázových přechodů a tepelné kapacity), jež by poskytovala data s nejistotou, která je srovnatelná s adiabatickými kalorimetry či kalorimetry typu Tian-Calvet. První část práce byla věnována správné přípravě přístroje před měřením, důkladné kalibraci teploty a entalpie a její validaci. Značná pozornost byla věnována volbě standardů.

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

Komise:

Předseda: Prof. RNDR. Petr Voňka, CSc.

Členové: Prof. Ing. Anatol Malijevský, CSc.
Ing. Milan Ončák

Soutěžící: Bouček Michal
Červinka Ctirad
Daniel Hollas
Chmela Jiří
Kubelová Lucie
Trnka Tomáš

Sekce Teoretická fyzikální chemie je sponzorována z prostředků projektu **DoubleNanoMem: Nanokompozitní a nanostrukturní polymerní membrány pro separaci plynů a par** (č. NMP3-SL-2009-228631) – evropský výzkumný projekt 7. Rámcového Programu EK pro roky 2007–2013.



Sekce : Teoretická fyzikální chemie

Simulace fázové rovnováhy systému NaCl(s) -- NaCl(aq)

Autor: Michal Bouček
Ročník: M1
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Doc. RNDr. Jiří Kolafa, CSc.

Práce se zabývá klasickou molekulárně-dynamickou simulací fázové rovnováhy mezi krystalem NaCl a jeho nasyceným vodným roztokem za pokojové teploty a atmosférického tlaku. Byl studován vliv polarizovatelnosti iontů a tvaru krystalu na kinetiku jeho rozpouštění ve vodě. Jelikož silové pole použité z literatury pro roztok soli nedokázalo dobře popsat rovnovážné chování iontů v kapalně fázi, byla provedena korekce zvýšením interakčních potenciálů mezi ionty a vodou pro polarizovatelné i nepolarizovatelné ionty. Studium chování systémů se zředěnými a přesycenými roztoky v takto optimalizovaných polích bylo zjištěno, že nepolarizovatelné ionty popisují hůře nerovnovážný proces rozpouštění a krystalizace. Dosažené výsledky jsou dále konfrontovány se silovým polem publikovaným autory Joungem a Cheathamem (J. Phys. Chem. B, 2009, 113, 13279). Závěrem je zmíněna snaha o aplikaci získaného silového pole na popis rovnovážného tvaru krystalu NaCl v solance a v systému NaCl(aq)--močovina(aq).

Sekce : Teoretická fyzikální chemie

Přesný výpočet termodynamických veličin ideálního plynu

Autor: Ctirad Červinka
Ročník: M1
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Ing. Michal Fulem, Ph.D.

Práce se zabývá výpočtem izobarických tepelných kapacit látek ve stavu ideálního plynu C_p^0 . Ty jsou nezbytným vstupem pro řadu termodynamických výpočtů a korelací. Výpočet tepelných kapacit je propojením kvantové chemie a statistické termodynamiky. *Ab initio* výpočtem se získají hodnoty vibračních frekvencí molekul a rotačních potenciálů vnitřních rotací, které slouží jako vstupy následných výpočtů C_p^0 .

Cílem je dosáhnout nejistoty ve vypočtených hodnotách menší než 1 %. Odchytky vypočtených C_p^0 jsou způsobeny použitím aproximací v *ab initio* výpočtu, uvažováním harmonicity vibrací a pro flexibilní molekuly především přítomností vnitřních rotací. V práci je diskutován vliv těchto faktorů, korekce výsledků pomocí multiplikativních škálovacích faktorů pro vibrační frekvence a použití modelu jednorozměrného bráněného rotoru pro vnitřní rotace.

Sekce : Teoretická fyzikální chemie

Fotochemie těžkých analogů cyklopropenu

Autor: Daniel Hollas
Ročník: B3
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Doc. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.

Deriváty cyklopropenu hrají důležitou roli v organické syntéze jako velmi reaktivní intermediáty. Jejich těžké analogy (sloučeniny, které místo uhlíku obsahují křemík, germanium nebo cín) by mohly plnit stejnou úlohu v chemii organokovů. Zvýšenou reaktivitu můžeme vysvětlit tzv. Bayerovým pnutím, které je u cyklopropenu ještě větší než u cyklopropanu. Není proto překvapivé, že ačkoli těžké analogy cyklopropanu jsou známy delší dobu, první těžký analog cyklopropenu byl syntetizován až v roce 1995.

Tato práce se zabývá teoretickým popisem mechanismu fotochemické izomerizační reakce 1-disilagermirenu na 2-disilagermiren, kterou se podařilo poprvé připravit stabilní sloučeninu s dvojnou vazbou Si=Ge. Při teoretickém popisu byly použity multireferenční metody (CASSCF, CASPT2) k nalezení stacionárních bodů na hyperploše potenciální energie základního a excitovaných stavů. Také byla využita *ab initio* nediabatická dynamika (Full Multiple Spawning). Na základě těchto výpočtů a publikovaných experimentálních údajů jsou diskutovány možné mechanismy této reakce.

Sekce : Teoretická fyzikální chemie

Studium solvatovaného elektronu metodami výpočetní chemie

Autor: Jiří Chmela
Ročník: B3
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Doc. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.

Práce se zabývá studiem solvatovaného elektronu pomocí metod výpočetní chemie. Solvatovaný elektron je zajímavý z hlediska chemie atmosféry, fyziky i biologie: v poslední době se spekuluje mimo jiné o jeho roli v procesech jako je rozklad ozonové vrstvy či radiční poškození biomolekul.

Předmětem práce je struktura solvatovaného elektronu. V literatuře se vyskytují dva názory: solvatovaný elektron buď vytváří ve vodném roztoku kavitu, nebo je delokalizován ve velkém objemu vody. Má práce vychází z kavitového modelu solvatovaného elektronu. Ve svém modelu uvažují solvatovaný elektron solvatovaný větším počtem molekul vody, přičemž celý systém je ještě uložen v dielektrickém kontinuu reprezentující vzdálenější molekuly. Elektronová struktura je řešena v rámci teorie funkcionálu hustoty. Cílem práce je vypočítat pro solvatovaný elektron experimentálně dosažitelné veličiny jako je vertikální a adiabatický ionizační potenciál či absorpční spektrum. Tyto charakteristiky srovnávám s odpovídajícími daty dostupnými v literatuře. Soulad či nesoulad může pomoci rozhodnout, zda model kavitové struktury solvatovaného elektronu je realistický.

Sekce : Teoretická fyzikální chemie

Fotodisociace dusičnanového aniontu

Autor: Lucie Kubelová
Ročník: M1
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Doc. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.

Práce je zaměřena na modelování absorpčních spekter dusičnanového aniontu využitím metod kvantové chemie. Cílem bylo prozkoumat vliv přítomnosti molekul vody na absorpci dusičnanu, a proto byla porovnávána spektra dusičnanu, dusičnanových klastrů s několika molekulami vody a dusičnanu ve vodném roztoku. K výpočtu spekter byla použita metoda založená na kombinaci teorie funkcionálu hustoty (pro popis elektronové struktury) a metody dráhových integrálů (pro popis atomových jader). Při vyhodnocování získaných spekter byla pozornost věnována hlavně troposféricky významné oblasti v okolí vlnové délky 300 nm, která zároveň odpovídá energii absorpce vedoucí k vybuzení elektronu do prvního excitovaného stavu. Zjistila jsem, že přítomnost molekul vody vyvolává změnu rozložení elektronů na jádrech dusičnanu, což vede ke zvýšení pravděpodobnosti původně symetricky zakázaného přechodu

Sekce : Teoretická fyzikální chemie

Model vody s deformovatelným dipólem

Autor: Tomáš Trnka
Ročník: M2
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Doc. RNDr. Jiří Kolafa, CSc.

Tato práce se zabývá vývojem jednoduchého polarizovatelného modelu vody pro klasickou molekulární dynamiku, určeného zejména pro simulace chování iontových kapalin za běžných teplot a tlaků. Model používá rigidní tříbodovou geometrii TIP3P s isotropní polarizovatelností na kyslíkovém atomu metodou Drudeho částice. K dosažení realističtějšího popisu polarizace a omezení výskytu tzv. polarizační katastrofy je využita metoda repulzivní antipolarizace (známá také jako deformovatelný dipól či shell-core model) na základě exp-6 repulzně-disperzního potenciálu v Busingově tvaru.

Model je nastaven na správnou reprodukci základních vlastností kapaliny za normálních podmínek s důrazem na správné dynamické chování a dále na vlastnosti dimeru včetně frekvencí intermolekulárních vibračních módů. Interakce s ionty byla testována měřením rozpustnosti chloridu sodného.

Sekce:	Matematické modelování v chemickém inženýrství (přednášková) posluchárna BIII, 8.30 hod
Komise:	
Předseda:	Prof. Ing. Igor Schreiber, CSc.
Členové:	Ing. Martin Kohout, PhD. Ing. Jan Štěpánek Ing. Alexandr Zubov zástupce sponzora
Soutěžící:	Dudák Michal Ferkl Pavel Bc. Hloužek Jakub Klejch Martin Kolda Jan Labík Libor Mráček David

Sponzoři sekce Matematické modelování v chemickém inženýrství:

Mondi Packaging Paper Štětí, a.s.

Hexion Specialty Chemicals, a.s.

Lonza Biotec, sro.

Synthos Kralupy, a.s.

Lovochemie, a.s.



Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Srovnání simulačních metod v programu Aspen Plus

Autor: Michal Dudák
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: doc. RNDr. Tomáš Vaněk, CSc., Ing. Martin Kohout, Ph.D.

Při návrhu nových nebo úpravě a optimalizaci stávajících chemicko-technologických procesů se v praxi často využívá univerzální simulační program Aspen Plus. Ten umožňuje volit mezi sekvenčně modulární (SM) metodou a rovnicově orientovanou (RO) metodou simulačního výpočtu. Cílem této práce bylo srovnat tyto metody z hlediska použití při základním a návrhovém simulačním výpočtu a porovnat možnosti a omezení těchto dvou metod v prostředí programu Aspen Plus V7.1. Výsledky jsou ilustrovány na příkladu separačního uzlu, ve kterém se dělí neideální dvousložkový systém s použitím přídatku třetí látky. Uzel se skládá ze dvou rektifikačních kolon s recyklem. SM metoda je v programu primárně použitelná pro základní simulační výpočet. Nestandardní specifikace jsou sice v omezené míře přípustné, ale za cenu další iterační úrovně. Naproti tomu RO metodu je možné standardně použít i pro návrhové výpočty. Především pro druhou metodu jsou potřeba dobré počáteční odhady všech neznámých parametrů z důvodu omezeného oboru konvergence. Je ukázáno, že počáteční odhady je možno jednoduše přenést z výsledků SM výpočtu.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Sdílení tepla na mikro a nanoměřítku

Autor: Pavel Ferkl
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Juraj Kosek, Alexandr Zubov

Sdílení tepla na nano a mikroměřítku vykazuje řadu odlišností od makroměřítku. Tepelná vodivost je klesající funkcí tloušťky materiálu nebo velikosti póru v případech, kdy střední volná dráha fononů nebo molekul je srovnatelná s šířkou materiálu či póru. V průteplivých prostředích je potřeba uvažovat kombinované sdílení tepla vedením a zářením. Popis sdílení tepla na mezifázových rozhraních ve svých důsledcích také odlišuje transport tepla na nano a makro měřítku. S využitím těchto efektů lze připravit jak materiály s tepelnou vodivostí mnohem menší než vzduch (aerogely), tak i materiály s vynikající tepelnou vodivostí (kompozity s uhlíkovými nanotrubičkami). Cílem práce je modelování transportu tepla na nano a mikroměřítku v systémech, kde je teplo sdíleno molekulami, fonony a fotony. V práci jsou popsány fyzikální mechanismy sdílení tepla a jsou formulovány bilanční a transportní rovnice umožňující popis zvláštních efektů na nanoměřítku. Jsou diskutovány vybrané problémy a popsány numerické metody pro soustavy parciálních diferenciálních a integrálních rovnic. 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 proudění kapaliny pomocí injektování vzduchu

Autor: Bc. Jakub Hloužek
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Pavlína Basařová

Jedním ze způsobů čerpání kapaliny především v jaderném průmyslu, kde je nutné čerpat chladicí kapalinu při velmi vysokých teplotách, je čerpání kapaliny pomocí zavádění proudu vzduchu do paty zařízení, tzv. „gaslift reaktoru“. Počítačová dynamika tekutin (CFD) se jeví jako vhodný nástroj pro popis proudění tekutiny, což umožňuje zjištění teplotního profilu v zařízení. Práce je především zaměřena na výpočet rychlostního profilu uvnitř „gaslift reaktoru s vnitřním cyklem“ při použití různých metod simulace a několika geometrických modifikací. Při práci byl použit komerční program ANSYS FLUENT 12.0.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Modelování mechanického namáhání heterofázových polymerů

Autor: Martin Klejch
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Juraj Kosek, Michal Vonka

Polymerní materiály mají různou mikrostrukturu. V této práci se zabýváme hetero-fázovými polymery různých typů, například semi-krystalickými polyolefiny, pěnovými polymery a polymery s tzv. salámovou strukturou. Zástupcem posledně jmenované kategorie je houževnatý polystyren (HIPS) s dvojúrovňovou morfologií: (i) nepravidelné submikronové domény polystyrenu (PS) jsou dispergovány v částicích polybutadienu (PB), a (ii) oválné částice PB o charakteristické velikosti několika mikronů jsou dispergovány v kontinuální fázi PS. Cílem práce je nalezení závislosti mezi mikrostrukturou heterofázových polymerů a jejich aplikačními mechanickými vlastnostmi. V naší předchozí práci jsme se zabývali modelováním rázové houževnatosti. Výsledné charakteristiky rázové houževnatosti ale vykazovaly značný rozptyl vzhledem k absorpci energie nárazu v tzv. sekundárních prasklinách a puklinách. V této práci se proto zabýváme modelováním statického namáhání materiálů standardní zkouškou namáhání v tahu nebo ve střihu. Vyvinutý program založený na metodě diskrétních elementů (DEM) umožňuje semi-kvantitativně předpovídat charakteristiky statického namáhání. Výsledky simulací jsou srovnány s experimenty.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Modelování axiální disperze v rekonstruované koloně inverzní plynové chromatografie

Autor: Jan Kolda
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Juraj Kosek, Alexandr Zubov

Inverzní plynová chromatografie (iGC) je jednou z experimentálních technik charakterizace difúzního transportu v porézních částicích. iGC je prakticky využitelná především pro krátké charakteristické doby difúze v porézních částicích. Experimentální data z iGC jsou zpracovávána modelem podle van Deemtera nebo přímým srovnáním naměřených a simulovaných koncentračních pulsů. Experimenty iGC prováděnými za několika tlaků bylo zjištěno, že žádný model nedokáže interpretovat difúzi probíhající paralelně jak v pórech tak v polymerní fázi částic. Proto byly započaty práce na více-škálovém rekonstruovaném modelu 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. Z pohledu modelování se jedná o náročný úkol vzhledem k více-škálovosti a vzhledem k nutnosti kalibrovat numerické metody na přítomnost numerické disperze. Tato práce shrnuje naše dosavadní výsledky a zkušenosti. Numerické simulace umožňují rovněž testovat předpoklad tzv. lineární chromatografie, který je základem všech analytických modelů pro interpretaci dat z iGC.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Vyhodnocení objemového koeficientu přestupu hmoty v mechanicky míchané disperzi kapalina-plyn

Autor: Libor Labík
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Tomáš Moucha, Ph.D.

Cílem práce bylo pokračovat ve verifikaci nového programu pro vyhodnocování objemového koeficientu přestupu hmoty $k_L a$ v mechanicky míchané disperzi kapalina-plyn. Na základě posouzení vlivu dynamiky kyslíkové sondy na získané hodnoty $k_L a$ byla pozměněna metodika výpočtu konvolučního integrálu a porovnána s původní. Dále byla posouzena citlivost matematického modelu na změnu vnitřních parametrů. Bylo zjištěno, že na vyhodnocení $k_L a$ má významný vliv časová konstanta kyslíkové sondy. Dále byly analyzovány vnitřní parametry funkce ode15s.m programu MatlabR2010a. Touto funkcí je řešena soustava diferencí algebraických rovnic. Byl zjišťován vliv nastavení relativní a absolutní přesnosti na vyhodnocení objemového koeficientu přestupu hmoty a nalezeny takové jejich hodnoty, aby byl zajištěn únosný výpočetní čas a dostatečná přesnost.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Měření a modelování vzniku N₂O na automobilovém katalyzátoru

Autor: David Mráček
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Motory spalující chudou palivovou směs v přebytku vzduchu (Diesel) dosahují lepší účinnosti a nižší spotřeby paliva než motory spalující stechiometrickou směs. Přbytek vzduchu však vede k silně oxidačním podmínkám ve výfukových plynech, což znesnadňuje redukci emisí oxidů dusíku (NO_x).

Tato práce se zabývá měřením produkce N₂O při neúplné redukci oxidů dusíku (NO a NO₂) na automobilovém katalyzátoru. Vznik N₂O je zkoumán v laboratorním reaktoru při různých teplotách v rozmezí 100-400°C, pro různé poměry NO₂/NO_x a s různým obsahem redukčních činidel (CO, C₃H₆) ve vstupní směsi. Naměřené konverze NO_x a selektivity N₂O jsou použity při vývoji matematického modelu katalytického konvertoru výfukových plynů.

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

Komise:

Předseda:

Členové:

Doc. Dr. Ing. Tomáš Moucha

Ing. Zdeněk Grof, PhD.

zástupce sponzora

Ing. Otto Hadač

Ing. Josef Chmelař

Soutěžící:

Jakubec Martin

Bc. Kotala Tomáš

Kremláčková Zuzana

Nistor Andra

Opletal Michal

Šíma Jan

Ullrich Martin

Váchová Tereza

Zuček Karel

Sponzoři sekce Procesní a chemické inženýrství 1:

Mondi Packaging Paper Štětí, a.s.

Hexion Specialty Chemicals, a.s.

Lonza Biotec, sro.

Synthos Kralupy, a.s.

Lovochemie, a.s.



Sekce: Procesní a chemické inženýrství 1

Rozprašovací sušení jako progresivní způsob mikroenkapsulace

Autor: Martin Jakubec
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. František Štěpánek, PhD

Mikroenkapsulace je procesem, který umožňuje převést kapalně roztoky, emulze či suspenze do částic se strukturou „jádro-slupka“ (angl. core-shell), jejichž velikost se řádově pohybuje v mikrometrech. Technika rozprašovacího sušení (angl. „spray drying“) je perspektivní alternativou ke klasickým způsobům mikroenkapsulace. Umožňuje totiž zapouzdřit či uzavřít i méně stabilní látky nebo látky neslučitelné s okolním prostředím do miniaturních částic, dále použitelných v mnoha průmyslových odvětvích, především pak v potravinářském, farmaceutickém či materiálovém. V této práci je pomocí laboratorního přístroje Buchi Mini Spray-Dryer zkoumán vliv počátečních parametrů (průtok a teplota sušícího plynu, koncentrace roztoku) na vlastnosti (morfologie, velikost) vytvořených mikročástic z biopolymerů dextranu a alginátu sodného. Konečným cílem práce je mikroenkapsulace látek do částic z těchto biopolymerů a studium kinetiky jejich vylučování při rozpouštění.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Vývoj a optimalizace technologie výroby úzkých mikrokanálů v polymerních substrátech

Autor: Bc. Tomáš Kotala
Ročník: M1
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 již mají 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 100 μm lze snadno vyrobit mikrofrézováním. Pro některé aplikace je však potřeba vyrobit kanály užší (šířka $\sim 10^1 \mu\text{m}$). V rámci této práce byly studovány možnosti výroby úzkých mikrokanálů a jsou popsány a diskutovány jeho jednotlivé kroky. Zde navržený postup využívá UV litografie, galvanické pokovování, vtačování za tepla a tepelné slinování. Dále jsou diskutovány možné aplikace mikrofluidních zařízení s úzkými mikrokanály a charakteristiky toku tekutiny v úzkých mikrokanálech jak v případě toku vyvolaného působením vnějšího rozdílu tlaků, tak toku vyvolaného vloženým elektrickým polem (elektroosmóza).

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Syntéza kompozitních Fe_3O_4 - SiO_2 dutých mikročástic a studium jejich ohřevu elektromagnetickou indukcí

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

K důležitým vlastnostem dutých částic s porézní stěnou, používaných k cílenému vylučování látek, patří jejich schopnost uvolnění neseného obsahu ve správný časový okamžik, popř. na správném místě. Možností, jak nepřímo řídit tento děj, je několik. Lze například využít citlivosti na pH, na přítomnost určité látky, tlak, teplotu či magnetické pole. Cílem předložené práce je příprava dutých kompozitních mikročástic na bázi oxidu křemičitého schopných ohřevu v magnetickém poli. Toho je dosaženo pomocí zabudování magnetických nanočástic Fe_3O_4 . Hmotnostní poměr Fe_3O_4 vůči SiO_2 ovlivňuje vlastnosti připravených kompozitních mikročástic. Byly připraveny částice s různým hmotnostním zastoupením Fe_3O_4 a studovány jejich vlastnosti. Rozložení velikosti částic bylo měřeno pomocí statického rozptylu světla na laserovém analyzátoru částic a struktura byla pozorována pomocí elektronové a konfokální mikroskopie a rentgenové mikrotomografie. Propustnost kompozitních schránek byla charakterizována nepřímo pomocí měření kinetiky vylučování modelové látky na spektrofotometru. Přítomnost Fe_3O_4 v křemičitých mikročásticích byla potvrzena pomocí FTIR spekter získaných pomocí infračervené spektroskopie.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Charakterizace morfologie polymerů sorpčními a difúzními měřeními

Autor: Andra Nistor
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Juraj Kosek, Josef Chmelař

Hlavním cílem práce je charakterizace morfologie semi-krystalického polyethylenu (PE) na základě sorpčních a difúzních měření. Obecnějším cílem je demonstrace, že transportní charakteristiky kompaktních polymerních membrán, tj. permeability a difuzivity, nejsou jen čistě empirickými veličinami, ale že závisí na mikrostruktuře polymeru. V semi-krystalických polymerech probíhá jak sorpce, tak difúze pouze v elasticky stísněné amorfní fázi. Předchozí experimenty ukázaly, že difuzivita penetrantu ve stejném jakostním typu PE (daném krystalinitou) se může lišit až pětikrát v závislosti na morfologii vzorku, která je ovlivněna jeho přípravou. Nová systematická difúzní měření provedená v tavenině i v semi-krystalickém polymeru umožňují odhadnout tortuositu amorfní fáze a srovnání s teoretickými modely PE morfologie typu sferulitu nebo krystalických micel. Byly tak získány zásadní nové poznatky, které jsou konfrontovány s morfologickými charakteristikami získanými pomocí AFM. Nicméně výsledky měření ukazují také na několik stále otevřených problémů: (i) teplotní závislost difuzivity, (ii) závislost krystalinity na teplotě, a (iii) transportní hystereze. V rámci práce byla také vyvinuta metodika měření na aparatuře dynamické tlakové odezvy.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Using oxidation of sulphite for monitoring characteristics of mass transfer in bio-reactors.

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

Mass transfer coefficients are one of most important factors for effective design and scaling up bio-reactors. Frequently used method for measuring mass transfer characteristic is absorption of air or oxygen to sulphite solution. Modified technique for measuring mass transfer coefficients was used. In this work is shown that using UV-spectroscopy at a wavelength 255 nm is more comfortable than classical technique based on the iodometric back-titration. UV-spectroscopy allows continual monitoring of changes concentrations of sulphite, decrease amount of titrations and make the sulphite method less time-consuming while preserving precision of the method. Effect of pH on the accuracy of the method is discussed and it was found that for correct using UV- spectroscopy is necessary to keep pH above 8.0 due to pH dependence of calibration curve below pH 8.0. Mass transfer coefficients were measured for two model cases: cultivation flask and fermentation in the cylindrical vessel. Measured values of coefficients for cylindrical vessel were compared with values measured by classical technique at the same conditions.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Použití rotačních biologických reaktorů s imobilizovanou houbou *Irpex lacteus* pro degradaci textilních barviv

Autor: Jan Šíma
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Prof. Ing. Pavel Hasal, CSc.

Cílem projektu je navrhnout rotační biologický reaktor s imobilizovanou houbou *Irpex lacteus* pro degradaci textilních barviv a u tohoto reaktoru následně zjistit nejvhodnější provozní parametry, jako je rychlost rotace disků, rychlost průtoku kapaliny, koncentrace barviva na vstupu do reaktoru při kontinuálních experimentech či počáteční koncentrace barviva u vsádkových experimentů. Účinnost reaktoru při degradaci barviv může ovlivnit také typ nosiče pro imobilizaci houby.

Při vývoji vznikly dva obdobné reaktory. Oba se skládaly z 12 rotačních disků na centrální ose, přičemž jeden měl dno tvořené lamelami svírajícími úhel 120° a druhý měl půlkruhové dno. Reaktory mohou být provozovány jak ve vsádkovém, tak v kontinuálním režimu. V obou bylo provedeno několik odbarvovacích experimentů s barvivem Remazol Brilliant Blue R za různých podmínek. Abychom charakterizovali dané reaktory, byla změřena odezвовá křivka na výstupu z reaktorů v závislosti na skokové změně na vstupu při různých průtocích a různých rychlostech rotace disků. Na tato data byly u reaktoru s půlkruhovým dnem aplikovány dva jednoduché matematické modely: gama distribuce a série ideálně promíchávaných reaktorů se zpětným tokem.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Vliv podmínek přípravy na velikost a stabilitu liposomů

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

Liposomy jsou malé duté částice, jejichž stěnu tvoří polopropustná fosfolipidová dvojvrstva. Velikostně liposomy mívají od 30 nm až po desítky μm v průměru. Kvůli své stěně, která je uspořádáním podobná buněčné membráně, jsou již od 60. let minulého století intenzivně zkoumány a pomáhají nám objasnit některé jevy odehrávající se na povrchu buněk. Látky, uzavřené dovnitř liposomů, se uvolňují do okolí pomalu. Této vlastnosti využívají například některá léčiva či kosmetické přípravky s prodlouženým účinkem dostupné od počátku 90. let. Tato práce se zabývá metodikou přípravy menších liposomů v průměru maximálně 500 nm. Střední průměr a šířka distribuce velikostí liposomů totiž dosti závisí na způsobu přípravy. Pro tuto práci byla zvolena metoda sonikace, tj. příprava liposomů aplikací ultrazvuku. Byl systematicky studován vliv délky a intenzity sonikace na velikost výsledných liposomů a studována jejich stabilita v čase při 4 a 25 °C. Cílem následných experimentů je charakterizovat rychlost vylučování uzavřených látek, a nalézt způsoby, kterými může být tato rychlost ovlivněna. To zahrnuje především zvýšení stability liposomů a následnou řízenou destabilizaci. Jako modelová látka pro tuto studii byl zvolen karboxyfluorescein, který umožňuje sledovat kinetiku vylučování pomocí fluorescenční spektroskopie.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Adheze bubliny na pevnou částici

Autor: Tereza Váchová
Ročník: M2
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Pavlína Basařová

Práce je součástí projektu, který se zabývá vzájemnými interakcemi bublin a pevných částic. Interakce mezi bublinou a pevnou částicí charakterizují tři následné děje – kolize bubliny a částice, adheze neboli zachycení bubliny na částici a odtržení bubliny od částice. Proces adheze zahrnuje děje jako ztenčování kapalného filmu mezi bublinou a částicí, přetržení kapalného filmu a vytvoření a rozšiřování třífázového rozhraní. Náplní práce bylo experimentální měření skluzových kontaktních časů a vyhodnocování trajektorií bublin přichycujících se na částici. Jako experimentální částice byly použity nakloněné rovině představující kulovou částici o nekonečném poloměru. Experimentálním materiálem bylo silanizované sklo. Experimenty byly prováděny v prostředí roztoku povrchově aktivní látky. Adheze bubliny byla snímána vysokorychlostní kamerou a data byla zpracována pomocí softwaru NIS-Elements.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Příprava nanočástic elektrorozprašováním

Autor: Karel Zuček
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Juraj Kosek, Jiří Maršálek

Při elektrorozprašování je kapalina protékající tenkou kapilárou vystavena vysokému DC napětí. Na konci tenké kapiláry vznikají v důsledku interakce elektrostatických sil a povrchového napětí malé kapičky, které se dále samovolně štěpí na menší a menší kapičky v důsledku povrchové hustoty náboje a odpařování rozpouštědla. Konečným produktem jsou tak nanočástice. Touto metodou lze také připravovat vrstvy nanočástic. Cílem práce byl návrh a konstrukce aparatury pro elektrorozprašování umožňující základní testování. Po úspěšném zprovoznění byly připraveny nanočástice menší než 100 nm pro několik anorganických i organických látek. Průběh procesu byl pozorován jednak vizuálně, jednak byla měřena distribuce velikosti částic na přístrojích Zeta-sizer a AFM. Byl studován vliv různých parametrů procesu na kvalitu vznikajících nanočástic. Zvýšení objemu produkce nanočástic metodou elektrorozprašování lze provést jednoduchou paralelizací, tj. využitím velkého množství paralelně uspořádaných kapilár. Našími dalšími cíli jsou kromě paralelizace také řízení celého procesu pomocí elektrických pulsů a příprava nanočástic vhodných pro ukládání elektrické energie.

Sekce: **Procesní a chemické inženýrství 2 (přednášková)**
posluchárna B141b, 8.30 hod

Komise:

Předseda: Doc. Ing. František Štěpánek, PhD.

Členové: Ing. František Jonáš Rejl, PhD.

zástupce sponzora

Ing. Walter Schrott

Ing. Šárka Bártová

Soutěžící:

Beránek Pavel

Brož Michal

Bc. Gubiš Jan

Kuchař Jan

Sarvašová Nina

Solich Jaroslav

Štěrbák Martin

Vachková Eliška

Sponzoři sekce Procesní a chemické inženýrství 2:

Mondi Packaging Paper Štětí, a.s.
Hexion Specialty Chemicals, a.s.
Lonza Biotec, sro.
Synthos Kralupy, a.s.
Lovochemie, a.s.



Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Měření rozložení elektrické vodivosti v mikrofluidních systémech

Autor: Pavel Beránek
Ročník: M1
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. Měření prostorového rozložení vodivosti umožňuje získat informace o průběhu některých dějů (například míchání, rozsah chemické reakce aj.) a tedy i o výskytu efektů spojených se zmenšováním měřítka. Měření vodivosti (konduktometrie) je poměrně jednoduchá analytická metoda, která je použitelná pro většinu elektrolytů. Měření jejího prostorového rozložení však klade velké nároky na konstrukci mikrozařízení, jakož i na sběr a interpretaci naměřených údajů. V práci je popsána výroba průtočného senzoru umožňujícího měření rozložení elektrické vodivosti a jsou uvedeny výsledky předběžných experimentů. Diskutovány jsou také možné aplikace sestaveného zařízení.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Segmentovaný tok jako způsob miniaturizace částic

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

Při toku nemísitelných tekutin v tenkých kanálcích o průměru řádově stovek mikrometrů může za určitých podmínek dojít ke vzniku tzv. segmentovaného toku, kdy po kontaktu obou tekutin v hydrofobním kanálku mikrosystému má vodná fáze tendenci zachovat co nejmenší povrch a vytvoří kulové kapénky, zatímco nepolární fáze zaujme zbytek objemu a smáčí stěny mikrokanálku. Tohoto procesu lze využít nejen ke tvorbě kapalných dispersí, ale též k přípravě mikročástic. V této práci bude studován vliv poměru průtoků vodné a organické fáze v mikrokanálcích na velikost vzniklých mikročástic. Princip tvorby mikročástic je založen na gelaci vodného roztoku alginátu sodného pomocí dvojmocných kationtů vápníku (zatímco alginát sodný je ve vodě rozpustný, alginát vápenatý tvoří gel). Při snižování průtoku roztoku alginátu sodného vzhledem k org. fázi bude docházet k vytvoření menšího průměru kuliček a k delším segmentům nepolární fáze. Při výtoku z mikrofluidního zařízení zreaguje kapička alginátu sodného s vápenatými ionty v kádince a k oddělení vrstvy org. fáze vlivem díky rozdílu v hustotách. Vzniklé částice byly separovány a analyzovány pomocí optického mikroskopu. Byla vyhodnocena distribuce velikosti částic. Výsledkem práce je mapa závislosti velikosti částic na průtoku a viskozitách obou kapalných složek v zařízení.

Sekce : Procesní a systémové inženýrství 2

Transportní charakteristiky strukturovaných výplní Mellapak

Autor: Bc. Jan Gubiš
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. František Jonáš Rejl, Ph.D.

V této práci byly naměřeny transportní charakteristiky strukturované kovové výplně Mellapak typologické řady Y o různých geometrických plochách - 250, 350 a 500 m²/m³. Byly stanoveny objemové koeficienty přestupu hmoty v kapalně (k_{La}) a plynně (k_{Ga}) fázi. Objemový koeficient k_{La} byl měřen desorpcí kyslíku z vody do proudu dusíku, při níž je hlavní odpor proti přenosu hmoty soustředěn v kapalně fázi. Objemový koeficient k_{Ga} byl měřen absorpcí SO₂ z proudu vzduchu do roztoku NaOH, při níž je hlavní odpor proti přenosu hmoty soustředěn v plynu. Měření byla provedena na poloprovozním absorpční koloně o vnitřním průměru 0,295m a s výškou výplně 0,84m. Získané hodnoty koeficientů na čtyřech typech výplní jsou porovnány vzájemně a s publikovanými daty. Cílem práce je posoudit vliv geometrické plochy na velikost objemových koeficientů přestupu hmoty.

Sekce : Procesní a systémové inženýrství 2

Syntéza a použití mikro-částic PNIPAM-Fe₃O₄ pro cílené vylučování látek

Autor: Jan Kuchař
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: doc. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Práce se zabývá využitím mikročástic z termo-senzitivního polymeru PNIPAM (poly-N-isopropylakrylamid) s pevně zabudovanými nanočásticemi magnetitu, pro cílené vylučování látek. Mikročástice jsou schopny při zahřátí vratně zmenšit svůj objem až o 65%, navíc díky nanočásticím magnetitu je možné využít ohřevu ve střídavém magnetickém poli. Naším cílem je do daných mikročástic vpravit nanočástice stříbra s antibakteriálními účinky a zajistit jejich stabilitu a cílené vylučování pomocí změny teploty.

Sekce : Procesní a systémové inženýrství 2

Syntéza kompozitných silikových mikročastic reagujúcich na vonkajšie stimuly

Autor: Nina Sarvašová
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství a Laboratoř chemické robotiky
Školitel: Doc. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Cieľom tejto práce je pripraviť a charakterizovať kompozitné častice založené na silike, ktoré by boli schopné reagovať na vonkajšie podnety. Boli použité dve modifikácie základných silikových mikročastic a to inkorporáciou magnetitových Fe_3O_4 magnetitových nanočastic na povrch a do interiéru východzích častic a naviazaním termoresponzívneho polyméru poly-N-izopropylakrylamidu na ich povrch. V prvom prípade bol použitý jednoduchý postup zmiešania roztokov a destabilizácie magnetitových nanočastic za účelom získania produktu, ktorý by bol schopný reagovať na prítomnosť vonkajšieho magnetického poľa a to zmenou teploty alebo pohybom riadeným týmto poľom. V druhom prípade boli použité dva rozdielne postupy modifikácie východzích častic založené na radikálovej kopolymerizácii poly-N-izopropylakrylamidu (termoresponzívneho polyméru) s dvojitou väzbou naviazanou na povrch už predmodifikovanej siliky pomocou metakryloxypropyltrimetoxysilánu za účelom získania produktu schopného reagovať na zmenu teplotu okolia v tomto prípade zmenou objemu povrchovej vrstvy a rozdielnou v porozitou.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 2

Sledování kinetiky oxidace siřičitanu prostřednictvím UV spektrometrie

Autor: Jaroslav Solich
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Michal Kordač, Ph.D.

Absorpce kyslíku do siřičitanu sodného je často využívána pro zjišťování fyzikálních veličin ($k_L a$, mezifázová plocha) v různých aparátech. Rychlost absorpce je určována z rozdílu koncentrací siřičitanu. Koncentrace siřičitanu sodného v systému je obvykle zjišťována jodometricky. Hlavní nevýhody této metody jsou: vysoká náročnost a nemožnost kontinuálního sledování koncentrace siřičitanu. V této práci je ověřováno využití UV spektrometrie pro sledování reakce siřičitanu s kyslíkem při různých koncentracích katalyzátoru. Tato instrumentální metoda je principiálně jednoduchá a umožňuje kontinuální měření koncentrace siřičitanu sodného v systému. Pro ověření spolehlivosti metody byla pro stanovení siřičitanu použita jak jodometrie, tak UV spektrometrie. Porovnáním rychlostí absorpce získané oběma metodami nebyly zjištěny významné odchylky.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Metody přípravy a charakterizace lipozomů v projektu CHOBOTIX

Autor: Martin Štěrbák
Ročník: B2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Mgr. Jaroslav Hanuš, Ph.D.

Lipozomy byly připraveny 4 rozdílnými metodami (Banghamova metoda, Mozafariho metoda, MEI, REV). Byla provedena měření trendů při změnách výchozích způsobů přípravy lipozomů. Získané lipozomy byly stabilní po dobu minimálně 14 dní. Byla stanovena střední velikost částic pomocí měření na Zetasizeru Nano ZS. Byla uskutečněna spektrometrická měření. Na základě zkušeností z těchto měření byla sestavena tabulka shrnující vhodnost různých způsobů charakterizace.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Srovnání transportních charakteristik výplní Mellapak 250Y a Mellapak 452Y při destilaci alkoholického a organického systému

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

V rámci této práce byly měřeny objemové koeficienty přestupu hmoty na straně kapaliny a plynu, k_L a k_G , na výplních Mellapak švýcarského výrobce Sulzer. Typová řada výplní Mellapak má analogickou konstrukci lišící se geometrickou plochou a byla nedávno modernizována technickými úpravami zlepšujícími hydraulické chování. K měření byla využita výplň Mellapak 250Y s geometrickou plochou $250\text{m}^2/\text{m}^3$ a modernizovaná výplň Mellapak 452Y s geometrickou plochou $350\text{m}^2/\text{m}^3$. Transportní charakteristiky byly měřeny profilovou metodou při destilaci alkoholického systému methanol-propanol a organického systému cyklohexan-heptan za atmosférického tlaku. Získané výsledky potvrzují výrazně lepší hydraulické parametry inovované výplně Mellapak 452Y. Poměr transportních charakteristik je úměrný poměru geometrických ploch výplní. Vliv použitého systému na hodnoty k_G odpovídá teoretickým předpokladům. Výrazně vyšší hodnoty k_L a organického systému zatím nejsou vysvětleny.

Sekce: **Řízení materiálových toků (přednášková)
posluchárna C11, 8.00 hod**

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Božena Kadeřábková, CSc.

Členové: Ing. Dana Strachotová, Ph.D.

Ing. Jakub Dyntar, Ph.D.

Ing. Petra Vegnerová, Ph.D.

Soutěžící:

Bc. Danyluková Tereza

Gros Ivan

Bc. Hyršl Ondřej

Bc. Káninský Matěj

Klička Jan

Bc. Kolčavová Alexandra

Bc. Karel Mikota

Pospíchalová Eva

Przeczek Libor

Sponzorem sekce Řízení materiálových toků je:

WINITY s.r.o.

Sekce: Řízení materiálových toků

Optimalizace toku kanbanových karet příjmovým skladem

Autor: Bc. Tereza Danyluková
Ročník: M2
Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Petra Vegnerová, Ph.D.

Práce se zabývá kanbanovým systémem ve skladu materiálu společnosti KOSTAL CR. Hlavním cílem projektu je zjistit reálný čas, po který se kanbanová karta vyskytuje ve skladu od jejího přijetí až po odvoz materiálu do výroby. Pomocí simulačního programu Witness je řešena základní situace ve skladu a dále jsou nastíněny možnosti, které by vedly k urychlení zpracování kanbanových požadavků pro zlepšení dodání materiálu k výrobním linkám.

Práce se dále zabývá popisem pracovních pozic ve skladu příjmu zboží společnosti KOSTAL CR. Popis pozic byl uskutečněn pomocí časové studie pracovního dne jednotlivých zaměstnanců skladu. Výsledkem této části projektu je popis jednotlivých pracovních pozic spolu s doporučením ke změnám, které by vedly ke zvýšení efektivity práce ve skladu.

Sekce: Řízení materiálových toků

Analýza hmotných toků v expedici

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

Cílem odborné praxe v pivovaru Velkopopovický Kozel, který je součástí společnosti SAB Miller, byla analýza toků prázdných obalů v rámci pivovaru. Výchoziskem pro analýzu byla vstupní data získaná z informačního systému podniku (SAP). To bylo doplněno o vlastní pozorování hmotných toků na příjmu a expedici. Vzhledem k charakteru příjmu a výdeje zboží podléhajícího sezónním výkyvům v průběhu roku, měsíce, týdne i dne, byla data shromážděna za dobu jednoho týdne, který patřil vzhledem k objemu toku ke špičkám. Při zpracování dat byl nutné dbát na to, že data poskytovaná systémem byla v účetní formě, a ne vždy odpovídala reálnému pohybu materiálu. Výstupem práce je layout toků na příjmu a výdeji a průběh skladové zásoby.

Sekce: Řízení materiálových toků

Optimalizace činnosti vysokozdvížných vozíků

Autor: Bc. Ondřej Hyršl
Ročník: M2
Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Petra Vegnerová, Ph.D.

Projekt je zaměřen na pracovní činnost vysokozdvížných vozíků ve výrobním oddělení třídírny firmy Lasselsberger, s.r.o., konkrétně závodu Rako III. Hlavním úkolem práce je zmapovat pracovní vytížení obsluhy vysokozdvížných vozíků během jednotlivých směn. Pomocí modelu vytvořeného v simulačním program Witness je nastíněna stávající situace na třídírně. Na základě těchto poznatků jsou následně navrženy změny, které by měly vést k zefektivnění provozu vysokozdvížných vozíků na daném pracovišti.

Projekt se primárně zabývá popisem pracovní pozice řidiče vysokozdvížného vozíku pomocí časové studie pracovního dne. Výstupy z této části práce mají také sloužit jako základní pracovní normy pro obsluhu vozíků, jelikož v současné době nejsou hodnoty norem určeny.

Výsledkem optimalizace procesu obsluhy třídírny je stanovení odpovídajícího počtu řidičů vysokozdvížných vozíků.

Sekce: Řízení materiálových toků

Mapování procesu výroby integrovaných krytů

Autor: Bc. Matěj Káninský
Ročník: M2
Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Václav Kovařík, PhD.

Práce se zabývá mapováním činností na výrobní lince pro výrobu integrovaných krytů ve společnosti KOSTAL CR. Projekt popisuje současný layout výrobní linky a materiálové toky, poukazuje na možné nedostatky a navrhuje možné návrhy řešení, které by měly být předmětem diplomové práce. Dále se zabývá ergonomií jednotlivých pracovišť a popisem pracovních pozic včetně vertikální struktury řízení.

Během letní praxe v podniku byly rovněž, v rámci jedné směny na výrobní lince, naměřeny časy jednotlivých operací pomocí časové studie pracovního dne a jedním z výsledků projektu je jejich znormování a srovnání se současnými normami pro daná pracoviště. Výsledkem práce je tedy nejenom popis procesu, ale i doporučení pro zlepšení chodu výrobní linky.

Sekce: Řízení materiálových toků

Hodnocení skladové logistiky

Autor: Jan Klička
Ročník: M2
Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Jakub Dyntar, PhD.

Cílem mého semestrálního projektu bylo pro firmu Logio s.r.o. zhodnotit současný stav skladové logistiky jejich zákazníka a v případě nalezení nedostatků navrhnout možná řešení. Zákazník disponoval jednou velkou skladovací halou, v které uskladoval domácí elektrospotřebiče nejrůznějších velikostí. Zboží bylo později baleno a expedováno do prodejen a také přímo k zákazníkům po celé ČR. K dispozici jsem měl digitální náskres skladu, skladovou dokumentaci včetně fotografií z pracovní doby, popis průběhu pracovní doby a zákaznickova data z jeho informačního systému. Tyto data jsem zpracoval a vyhodnotil v MS Excel. Jednalo se o porovnání dvou měsíců (července a prosince) provozu skladu v kalendářním roce 2009. Po prostudování zbylých materiálů o skladu jsem s podporou výsledků z MS Excel našel určité nedostatky v prostorovém uspořádání skladu a navrhl jejich řešení.

Sekce: Řízení materiálových toků

Optimalizace linky předmontáže

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

Projekt se zabývá optimalizací linky předmontáže postranic ve firmě Linet, spol. s r.o.. Hlavním požadavkem firmy bylo snížení taktu linky z 10 na 5 minut. Pomocí přímých metod jako je miniaudit pořádku, čistoty a vizualizace, snímek pracovního dne a špagetový diagram je analyzováno pracoviště předmontáže. Využitím nepřímých metod, měření časové náročnosti úkonů MOST a rozboru cyklových časů, byly stanoveny časové normy úkonů pracovníka. Na základě analýzy pracoviště jsou v projektu dále vypracovány návrhy přestavby linky. Ty obsahují varianty nových layoutů, jiné rozvržení činností pracovníka, nový zásobovací systém a jiná drobná vylepšení přímo na pracovišti. Výsledkem je návrh takového řešení linky předmontáže, které zefektivní výrobu a sníží takt linky z 10 minut na požadovaných 5 minut.

Sekce: Řízení materiálových toků

Měřením a řízením výkonnosti ke zvyšování konkurenceschopnosti podniku

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

Práce je zaměřena na měření výkonnosti jednotlivých výrobních linek a současně na snímkování jednotlivých výrobních operací ve firmě Mocca, spol. s.r.o.. Snímkování se řadí mezi časové studie práce jejichž účelem je zjištění časů potřebných pro jednotlivé výrobní operace. Zjištěné údaje pak konkrétně využíváme při stanovení norem práce.

Cílem mé práce bylo sledování pracovníků, strojů a výrobních procesů v jednotlivých částech výroby. V daném úseku jsem se nejdříve musel seznámit s technologickým postupem a poté naměřit a shromáždit potřebná data, které jsem pak následně vyhodnotil.

Sekce: Řízení materiálových toků

Analýza materiálového toku na předmontážní lince

Autor: Eva Pospíchalová
Ročník: M2
Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Jakub Dyntar, Ph.D.

Řízení dodavatelských řetězců je rapidně se rozvíjející disciplína, která je nyní považována za klíčový prvek strategie výroby. Přidává hodnotu pro konečného zákazníka, který je hlavním iniciátorem logistického procesu, a její nedílnou součástí je řízení materiálového a informačního toku logistického řetězce.

Zmapování materiálového toku na předmontážní lince produkující páčky blinkrů a stěračů pro PSA ve společnosti Kostal CR je hlavní částí zkoumané problematiky v této práci. Je to kontinuální proces s jasnou strukturou řízený kanbanovým systémem. Metoda kanban představuje operativní řízení logistických toků na úrovni pracovišť, kdy každé pracoviště je zároveň odběratelem předcházejícího a dodavatelem následujícího stupně v procesu.

V práci jsou též řešeny problémy na předmontážní lince, které se vyskytují u jednotlivých operací, přes uspořádání pracovního místa, pracovní prostředí po personální problémy.

Sekce: Řízení materiálových toků

Analýza nákupu a spotřeby zásob

Autor: Libor Przeczek

Ročník: M2

Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu

Školitel: Ing. Miroslav Vágner, Ph.D., MBA

Práce se zabývá strategií řízení stavu zásob v podniku na keramické obklady RAKO III v Lubné u Rakovníka.

V první části je popis výchozího stavu řízení zásob v oblasti surovin, obalových materiálů, náhradních dílů a pomocných materiálů. Tento stav je popsán pomocí dat získaných z informačního systému podniku. Cílem této části je identifikovat chyby a nedostatky v řízení zásob.

V druhé části jsou navrženy metody teorie zásob pro úsporu prostředků vázaných v zásobách a snížení objemů práce spojené s objednáváním materiálů.

Sekce: **Podnikový management a marketing (přednášková)
posluchárna C13, 8.00 hod**

Komise:

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

Členové: Doc. Ing. Jana Frková, Ph.D.

Mgr. Ing. Marek Boteck, Ph.D.

Soutěžící:

Bc. Branišová Jana

Hoserová Lenka

Ing. Hucková Martina

Klímová Kateřina

Knápková Monika

Podskočová Gabriela

Bc. Pudilová Michaela

Stružková Veronika

Sponzorem sekce Podnikový management a marketing je:

WINITY s.r.o.

Sekce: Podnikový management a marketing

Telemarketing a jeho místo v rozhodování predajcu

Autor: Bc. Jana Branišová
Ročník: M1
Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: doc. Ing. Stanislava Grosová, CSc.

V společnosti Tech Data Distribution, s.r.o. zamerané na distribúciu produktov Autodesk som pracovala v oddelení marketingu, kde som využívala aktívny telemarketing pre kontaktovanie klientov za účelom predaja upgradového programu Subscription k softwaru AutoCAD LT.

Program AutoCAD LT slúži na projektové kreslenie a preto hlavnú cieľovú skupinu tvorili najmä architekti, projektanti a stavební inžinieri, ktorí tento software používajú priamo pri svojej práci v projekčných kanceláriách.

Zaujímal nás nielen úspešnosť predaja v danom období, ale aj sledovanie progresu v porovnaní s ostatnými rokmi, kedy sa na tomto projekte taktiež pracovalo. Získané informácie sme využili pri zhodnotení rozhodnutí, ktoré sa týkali predaja a propagácie poskytovaného produktu.

Sekce: Podnikový management a marketing

Podpora financování výzkumu a vývoje v ČR

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

Nedílnou součástí konkurenčního boje podniků je jejich výzkum a vývoj následně ovlivňující schopnost přizpůsobit se nebo vyvolávat změny (inovace). Organizace sami vyčleňují prostředky na vlastní projekty, často jde však o takovou finanční náročnost, že je snaha vyhledávat dostupné prostředky i mimo podnik.

Výzkum a vývoj je v České republice (ČR) podporován veřejnými prostředky, které jsou získávány ze zahraničí (především Evropská unie - EU) a částečně jsou dotovány ze státního rozpočtu. V ČR je vypracován tzv. systém veřejné podpory, který se opírá o Národní politiku výzkumu. Tento systém byl podstatně pozměněn reformou zákona č. 130/ 2002 Sb. (červenec 2009), který upravuje právě veřejnou podporu výzkumu a vývoje v ČR. Cílem reformy bylo především zjednodušit a více zpřístupnit veřejnou podporu, zajistit větší zpětnou kontrolu a propojení výsledků výzkumu s následným vývojem.

Nedílnou součástí hodnocení a získávání další podpory se stalo vykazování. Byl založen Registr informací o výsledcích výzkumu a vývoje (RIV), kam musí všichni příjemci podpor zasílat dosažené byť i dílčí výsledky. V rámci své praxe pro Milcom a.s. jsem vytvořila tabulky na vykazování mzdových nákladů.

Sekce: Podnikový management a marketing

Srovnávací analýza nákladů na služby

Autor: Ing. Martina Hucková
Ročník: M2
Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Prof. Ing. Ivan Gros, CSc.

Základní oblastí lázeňských služeb jsou služby zdravotní, tzv. lázeňské procedury. Protože jsou lázně nejen subjektem poskytujícím zdravotní péči, ale také subjektem ekonomickým, patří řízení nákladů mezi významné úkoly managementu. V oblasti služeb se tradičně setkáváme s vysokým podílem režijních nákladů. V oblasti lázeňství se jedná zejména o osobní náklady. Přímými náklady na lázeňské procedury jsou pak zejména přímý materiál a přímé energie.

Pro stanovení nákladů na léčebné procedury byla použita metoda Activity Based Costing, která je účinným nástrojem pro stanovení režijních nákladů.

V práci bylo provedeno stanovení nákladů na jednotlivé lázeňské procedury v lázeňském komplexu Lázně Aurora s.r.o. Výsledky pak byly srovnány s v minulosti získanými výsledky pro lázeňský komplex Bertiny Lázně Třeboň s.r.o., které se odlišují zejména svojí velikostí. Na závěr byly analyzovány příčiny rozdílných výsledků pro oba lázeňské komplexy.

Sekce: Podnikový management a marketing

Budoucnost farmaceutických firem

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

První část práce je zaměřena na současnou situaci inovativních farmaceutických firem. Skutečnost, že náklady na V&V se neustále zvyšují, vede farmaceutické firmy k fúzování ve větší celky. Tato velká obchodní seskupení se snaží zaměřovat především na léčiva, která se dají zařadit do kategorie „blokbástrů“. V současné době je většina stávajících „blokbástrů“ před vypršením patentové ochrany a počet nových „trháků“ se snižuje. Tento trend může způsobit změnu v chování a vedení farmaceutických firem.

Druhá část práce je zaměřena na návrh nového podnikatelského modelu a hodnotového řetězce pro velké farmaceutické firmy.

Sekce: Podnikový management a marketing

Výzkum vybraných prvků kupního chování na trhu barev a laků

Autor: Monika Knápková
Ročník: M2
Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: doc. Ing. Stanislava Grosová, CSc.

Komunikace prostřednictvím obalu výrobku a informací na něm uvedených je významnou složkou marketingového mixu. Cílem marketingového výzkumu bylo zjistit, které údaje uváděné na obalech barev a laků jsou pro zákazníky při rozhodování o výběru produktu sledovány, jak jsou pro zákazníky důležité a zda zákazníci při rozhodování o koupi ovlivňuje český původ výrobku. Druhý výzkum, realizovaný mezi prodejci produktů byl věnován zjišťování toho, zda prodejci znají kupní chování zákazníků a jejich požadavky kladené na tuto kategorii produktů a také to, jak oni sami hodnotí a využívají informace uváděné na obalech barev a laků. Práce byla realizována ve společnosti BARVY A LAKY TELURIA, s.r.o.

Sekce: Podnikový management a marketing

Zavádění systému HACCP pro novou výrobní linku

Autor: Gabriela Podskočová
Ročník: M2
Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: doc. Ing. Sláva Balatka, CSc.

Práce je zaměřená na systém kritických bodů jako nástroje pro řízení výrobních procesů, jehož kvalifikované použití vede k minimalizaci, popřípadě až k vyloučení možných onemocnění či zdravotních poškození konzumentů potravin. Systém HACCP je mezinárodní standard definující požadavky na systém řízení bezpečnosti potravin. Pomáhá organizacím soustředit se na rizika, která ovlivňují bezpečnost a hygienu potravin a systematickou identifikaci, nastavení a zavádění kritických kontrolních limitů u kritických kontrolních bodů během výrobního procesu. První část práce je zaměřená na obecný náhled na důležitost zavádění systému kritických bodů a následné kontroly v potravinářské výrobě, shrnutí legislativních požadavků a přípravu plánu systému kritických bodů.

Druhá část práce obsahuje aplikaci základních principů systému kritických bodů pro novou výrobní linku nečokoládových cukrovinek firmy Mocca, spol. s r.o. Liberec.

Sekce: Podnikový management a marketing

Obalový management a legislativa na trhu PET FOOD

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

Obal je významnou součástí každého moderního produktu. Balení a značení by mělo okamžitě upoutat pozornost spotřebitele. Obal samozřejmě má úlohu nejenom v získání pozornosti zákazníka, ale také musí poskytnout informace o složení, vlastnostech a použití daného přípravku. Ve společnosti Nestlé jsou tyto údaje nejprve přehledně zpracovány v Label Specification Sheet, dokumentu, který je sestavován podle předem daných pravidel.

Cílem této práce je uvést základní informace o významu obalu z marketingového hlediska, popsat jednotlivé části LSS a specifikovat typy výroků o přínosech a kladných vlastnostech produktu používaných v průmyslu péče o domácí zvířata. Součástí práce je znázornění procesního rozhodování o novém výrobku a úspěšnosti firmy v daném odvětví.

Sekce: Podnikový management a marketing

Vliv Traceability na pekárenský provoz

Autor: Veronika Stružková
Ročník: M2
Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Dana Strachotová, Ph.D.

Projekt jsem zpracovala ve firmě Benea s.r.o., která vyrábí široký sortiment pekařských a cukrářských výrobků. Práce se zabývá dosledováním surovin v pekárenském provozu. V první fázi praxe jsem se seznámila s jednotlivými výrobními úseky podniku, snažila se pochopit probíhající procesy a získat potřebné informace o funkčnosti výroby.

Cílem dosledovávání surovin výrobku bylo zjistit, zda se suroviny fyzicky nacházeli tam, kde se měly nacházet v porovnání s vedenou dokumentací. Dosledovatelnost jsem vyzkoušela na konkrétním výrobku, díky kterému jsem mohla poukázat na problémy v jednotlivých úsecích.

Sekce: **Fyzika a měřicí technika (přednášková)**
posluchárna B220, 9.00 hod

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Jaroslav Hofmann, CSc.

Členové: Dr. Mgr. Jana Jirešová
Ing. Filip Vysloužil, Ph.D.

Soutěžící: Bc. Kommová Lucie
Kotúčková Soňa
Kvasničková Eva
Ondrčková Sandra
Bc. Štěpánková Barbora
Urbánková Eliška

Sekce: Fyzika a měřicí technika

Porovnání vlivu parametrů korónového výboje pro dekontaminaci vodní suspenze mikroorganismů

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

Dekontaminace až sterilizace nízkoteplotním plazmatem se řadí mezi aktuální trendy ve výzkumu možností jeho aplikace. Hledání nových spolehlivých a šetrných metod dekontaminace až sterilizace je velice žádoucí a to i z důvodů narůstající rezistence bakteriálních kmenů na běžná dekontaminační činidla nebo antibiotika. Tato práce porovnává baktericidní vlastnosti kladného a záporného korónového výboje, při různém napětí, respektive proudu, za atmosférického tlaku ve vzduchu, při dekontaminaci vodní suspenze bakterií. Konkrétně se jedná o stabilizovaný korónový výboj typu hrot proti rovině za různých podmínek aplikovaný na vodní suspenzi bakterií *Escherichia coli*, *Staphylococcus epidermidis*, *Deinococcus radiodurans*, *Pseudomonas aeruginosa* a vodní suspenzi jediného zástupce eukaryotických buněk, kvasinky *Candida albicans*. Z výsledků vyplývá, že k úplné dekontaminaci dochází do jedné až několika minut, v závislosti na typu výboje a druhu mikroorganismu.

Sekce: Fyzika a měřicí technika

Baktericidní účinky vody po expozici korónovému výboji

Autor: Soňa Kotúčová
Ročník: B3
Ústav: fyziky a měřicí techniky
Školitel: Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.

Při výzkumu možnosti inaktivace prionových proteinů nízkoteplotním plazmatem generovaným korónovým výbojem bylo zjištěno, že exponovaná suspenze vody s myším mozkovým homogenátem obsahujícím prionové proteiny a posléze i destilovaná voda působí i po odstranění výboje jako cidní agens na použité detekční eukariontní kmenové buňky. Není nám zatím známo, že by byl tento efekt popisován v odborné literatuře. Tato práce popisuje přetrvávání baktericidních vlastností exponované destilované vody a fyziologického roztoku a mapuje jejich základní časové závislosti na dvou typových bakteriích *Escherichia coli* a *Staphylococcus epidermidis* a kvasince *Candida albicans*. Dále práce prezentuje některé pokusy o vysvětlení tohoto fenoménu a nastiňuje možné vysvětlující hypotézy.

Sekce: Fyzika a měřicí technika

Mikrobicidní vlastnosti "kometárního" výboje

Autor: Eva Kvasničková
Ročník: B3
Ústav: fyziky a měřicí techniky
Školitel: Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.

Dekontaminácia až sterilizácia nízkoteplotným plazmatom sa radí medzi aktuálne trendy vo výskume možností jeho aplikácie. Pri zapojení výboja do konfigurácie hrot proti hrotu sme získali niekoľko originálnych výsledkov. Bez stabilizácie výboj prechádza veľmi rýchlo do iskry a pre využitie na mikrobiálnu dekontamináciu je nevhodný. Pri zapojení sériového odporu sa výboj stabilizuje v móde podobnom tlejivému korónovému výboju. Vo výboji sa generuje iónový vietor smerujúci od kladnej elektródy smerom k elektróde zápornej a pokračuje ďalej do priestoru. Veľmi zaujímavý fenomén je však možné pozorovať pri vhodnom napätí a miernom posunutí kladnej elektródy smerom hore. Streamru podobný svietiaci plazmatický kanál smeruje od kladnej elektródy popod elektródu zápornú a pokračuje ďalej do priestoru. Záporný výboj sa k tomuto kanálu pripája zboku. Výboj svojím vzhľadom pripomína chvost kométy a bol pracovne pomenovaný ako „kométa“ alebo „kometárny výboj“. Táto práca popisuje základné mikrobicidné vlastnosti tohto výboja na niekoľkých mikroorganizmoch a porovnáva ho s inými typmi elektrických výbojov.

Sekce: Fyzika a měřicí technika

Ohřev kapaliny a povrchu agaru při expozici koronovému výboji a jeho modifikacím

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

Práce se zabývá mírou ohřevu kapaliny a povrchu agaru po expozici koronovému výboji a jeho modifikacím. Na základě provedených měření je posuzována šetrnost jednotlivých výbojů při jejich případném použití pro účely dekontaminace povrchu a kapaliny. Základem testovaných výbojů je tzv. koronový výboj, který náleží do skupiny nízkoteplotních nerovnovážných výbojů. Testované výboje jsou generovány mezi elektrodami v konfiguraci hrot–rovinná elektroda (realizovaná povrchem vodní hladiny), hrot–rovinná elektroda (realizovaná povrchem agaru) a hrot–hrot bezprostředně nad povrchem vodní hladiny a nad povrchem agaru. Modifikace použitých typů koronových výbojů je provedena předřadnou impedancí.

Sekce: Fyzika a měřicí technika

Baktericidní účinky korónového výboje typu hrot proti hrotu

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

Práce porovnává dekontaminační vlastnosti netermálního plazmatu generovaného korónovým výbojem typu hrot proti hrotu. Jako modelové organismy byly zvoleny dvě bakterie (Gram-pozitivní a Gram-negativní) a kvasinka. Vodní suspenze s mikroorganismy byla nanášena na nevodivý silikonový disk a exponována korónovému výboji. Následovala kultivace a počítání přeživších kolonií. Z výsledků experimentu vyplývá, že plazma generované ve výbojích dokáže účinně dekontaminovat povrch do několika minut. Je možné konstatovat, že použití zmíněného korónového výboje může být vhodné pro dekontaminaci až sterilizaci inertních povrchů kontaminovaných vodní suspenzí bakterií nebo i vyšších organismů v malých rozměrech, např. v laboratorní praxi.

Sekce: Fyzika a měřicí technika

Charakteristiky různých typů koronových výbojů a jejich modifikací

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

Práce se zabývá měřením volt-ampérových charakteristik koronových výbojů v uspořádání elektrod hrot proti rovinné elektrodě a hrot proti hrotu. Rovinná elektroda je v jednotlivých případech realizována povrchem agaru, povrchem vodní hladiny a nerezovou plochou. Obecně je známo, že koronový výboj patří mezi nízkoteplotní výboje a je limitován přechodem do jiskry již při velmi malých proudech a výkonech (pro kladnou koronu desítky mikroampér a pro zápornou stovky mikroampér v našem experimentálním uspořádání). Výboj je možno modifikovat různými způsoby a tím docílit kvalitativní změny výboje a podstatně vyšších proudů a výkonů. Ze získaných charakteristik jednotlivých výbojů je možné posoudit jejich vlastnosti a provozní oblast.