

Seznam sekcí a složení komisí

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

Komise:
Předseda: Doc. Ing. Oto Mestek, CSc.
Členové: Ing. Vladimír Setnička, Ph.D.
Ing. Martin Člupek, Ph.D.
Ing. Patrik Kania, Ph.D.
Mgr. Alla Synytsya, Ph.D.

počet účastníků 6

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

Komise:
Předseda: Prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka
Členové: RNDr. Dr. David Sýkora
Mgr. Tatiana Šiškanová, CSc.
RNDr. Ing. Pavel Řezanka

počet účastníků 7

Sekce: **Fyzikální chemie (přednášková)**
místnost A402, 8.30 hod

Komise:
Předseda: Prof. Ing. Stanislav Labík, CSc.
Členové: Ing. Štěpán Hovorka, Ph.D.
Ing. Michal Fulem, Ph.D.

počet účastníků 9

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

Komise:
Předseda: Doc. Ing. František Štěpánek, PhD.
Členové: Ing. Martin Kohout, PhD.
Ing. Otto Hadač
Ing. Jitka Čejková
Ing. Hronza (zástupce firmy Ricardo)

počet účastníků 8

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

Komise:

Předseda: Doc. Dr. Ing. Michal Příbyl

Členové: Doc. RNDr. Tomáš Vaněk, CSc.
Ing. Zdeněk Slouka, PhD.
zástupce sponzora Hexion

počet účastníků 9

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

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Dalimil Šnita, CSc.

Členové: Ing. František Jonáš Rejl, PhD.
Ing. Lukáš Valenz, PhD.
zástupce sponzora Mondi

počet účastníků 9

Sekce: **Podniková ekonomika a management (přednášková)**
místnost: C11, 8.00 hod

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Sláva Balatka, CSc.

Členové: Mgr. Ing. Marek Botek, Ph.D.
Ing. Jakub Dyntar, Ph.D.
Ing. Petra Vegnerová

počet účastníků 9

Sekce: **Marketing (přednášková)**
místnost C13, 8.00 hod

Komise:

Předseda: Prof. Ing. Ivan Gros, CSc.

Členové: Ing. Dana Strachotová, Ph.D.
Ing. Miroslav Vágner, MBA, Ph.D.
Ing. Olga Kutnohorská

počet účastníků 8

Sekce: **Inženýrská informatika, měření a řízení procesů (přednášková)**
místnost B220, 9.00 hod

Komise:

Předseda: Prof. Ing. Jan Náhlík, CSc.

Členové: Ing. Vladimír Scholtz, Ph.D.
Ing. Filip Vysloužil, Ph.D.
Ing. Jana Finkeová, CSc.

počet účastníků 6

Sponzoři sekcí Analytická chemie a Molekulová spektroskopie:

Nicolet CZ
Merck
Sigma-Aldrich
Chromservis
Chromspec
Maneko
Chemstar Czech Republic

Sponzor sekcí Podniková ekonomika a management a Marketing:

PROLiGNIS Energie Consulting GmbH & Co. KG

Sponzoři sekcí Matematické modelování v chemickém inženýrství a Procesní a chemické inženýrství:

Mondi
Hexion
Ricardo

Sekce : Molekulová spektroskopie

Simulace účinků Starkova jevu na rotační hladiny

Autor: Pavel Beran
Ročník: B2
Ústav: analytické chemie
Školitel: Prof. RNDr. Štěpán Urban, CSc.

Výraz pro rotační energie je závislý na rozdílu efektivních hodnot rotačních konstant. Starkův jev tyto rozdíly může ovlivnit. Cílem práce je simulovat tento jev a tak ověřit, zda se rozdíl efektivních hodnot rotačních konstant mění natolik, že může negativně ovlivnit přesnost výpočtu nejen dipólového momentu ze Starkova efektu. Tato studie má tedy význam pro přesnou kvantitativní analýzu plynů s důsledky pro atmosférické a astrofyzikální studie.

Sekce : Molekulová spektroskopie

Analýza listoví vybraných druhů dřevin metodou FT-Ramanovy spektroskopie

Autor: Zuzana Cieslarová
Ročník: B3
Ústav: analytické chemie
Školitel: Prof. Pavel Matějka

FT-Ramanova spektroskopie je vhodnou metodou pro analýzu rostlinných pletiv a tkání především pro svou nedestruktivnost. Vzorky listoví lze měřit bez jakékoli jejich úpravy a při volbě vhodných podmínek měření se vyhnout poškození živých tkání, a tím například zabránit uměle vyvolané degradaci rostlinných pigmentů.

Předkládaná práce se zabývá měřením Ramanových spekter listoví bříz, dubů a platanů v období vegetace a senescence. Naměřená spektra byla chemometricky vyhodnocována shlukovou analýzou, analýzou hlavních komponent a diskriminační analýzou. Byla porovnána spektra jak obou dvou studovaných období odběru listů, tak i jednotlivých druhů stromů navzájem. Sledována byla především oblast karotenoidů, jakožto rostlinných pigmentů, které v období senescence degradují. Pozorován byl rovněž vliv druhu stromu na variabilitu spekter.

Dále byla ve spolupráci s Botanickým ústavem Akademie věd měřena Ramanova spektra série vzorků listoví vrb a topolů. Vzorky byly pěstovány na substrátech inokulovaných různými druhy hub a byl sledován vliv těchto hub na celkové zdraví rostlin. Naměřená spektra byla rovněž chemometricky vyhodnocena a bylo zjišťováno, zda se projeví vliv hub na variabilitu spekter.

Sekce : Molekulová spektroskopie

Studium SERS- a SEIRA-aktivity měděných substrátů připravených elektrochemickými metodami

Autor: Alžběta Kokaislová
Ročník: M1
Ústav: analytické chemie
Školitel: Ing. Martin Člupek Ph.D.

Spektroskopie povrchem zesíleného Ramanova rozptylu (SERS) a spektroskopie povrchem zesílené infračervené absorpce (SEIRAS) jsou analytické metody využívané při studiu filmů a monovrstev organických látek adsorbovaných na površích vybraných kovů vhodné morfologie.

V předložené práci byly porovnány dvě elektrochemické metody pro přípravu SERS-aktivních měděných substrátů: katodická redukce a kombinace katodické redukce s metodou oxidačně-redukčních cyklů. Hlavní důraz byl kladen na vhodnost připravených substrátů pro analýzu plošné distribuce analytu, která byla posuzována na základě výsledků analýzy hlavních komponent (PCA). Na površích vybraných substrátů byla naměřena difuzně-reflexní infračervená spektra pro ověření SEIRA-aktivity těchto substrátů.

Morfologie povrchů připravených substrátů byla studována pomocí skenovací elektronové mikroskopie (SEM).

Sekce : Molekulová spektroskopie

Mikrovlnná spektroskopie izotopologů radikálu $\text{FSO}_3^\cdot$

Autor: Jan Koucký
Ročník: M2
Ústav: analytické chemie
Školitel: Prof. RNDr. Štěpán Urban, CSc.

Mikrovlnná spektroskopie je nenahraditelným zdrojem informací při výzkumu mezihvězdného prostoru a zemské atmosféry. Velkou roli v chemických procesech v horních vrstvách atmosféry mají radikály, které se v nich díky působení UV záření vyskytují v mnohem větší míře než při povrchu Země. Radikály jsou vysoce reaktivní látky s jedním nebo více nepárovými elektrony, tzv. molekuly s otevřenou slupkou.

Předmětem studie je fluorosulfátový radikál ($\text{FSO}_3^\cdot$), který může působit v atmosféře jako oxidační a fluorační činidlo. Vůbec první vysoce rozlišená spektra tohoto radikálu byla měřena na VŠCHT Praha. Součástí této práce bylo měření rotačních spekter symetrického izotopologu $\text{FSO}_3^\cdot$ s využitím Zeemanovy modulace a výpočet molekulárních parametrů.

Sekce : Molekulová spektroskopie

Indukce změn konformace polypeptidů: studie metodou vibračního cirkulárního dichroismu

Autor: Pavlína Novotná
Ročník: M1
Ústav: analytické chemie
Školitel: Prof. RNDr. Marie Urbanová, CSc.

Polypeptid poly- γ -benzyl-L-glutamát (PBLG) je vhodným modelovým systémem pro studium strukturních forem polypeptidů v závislosti na typu rozpouštědla a na dalších fyzikálních podmínkách. Pro toto studium byla s výhodou použita spektroskopie vibračního cirkulárního dichroismu (VCD), která je ze své podstaty velmi citlivá na sekundární strukturu chirálních látek. Pomocí spektroskopie VCD bylo prokázáno, že obsah trifluoroctové kyseliny v rozpouštědlech výrazně ovlivňuje konformaci PBLG. Naměřená teplotní závislost VCD spekter PBLG pro různý obsah kyseliny ve směsném rozpouštědle trifluoroctová kyselina/chloroform ukázala, že struktura, která je označovaná jako „random coil“ a je považována za neuspořádanou, je vždy stabilizována při nižší teplotě než α -helikální konformace PBLG, která se běžně považuje za uspořádanou. Tento zajímavý experimentální fakt byl vysvětlen pomocí provedené spektrální studie teplotní závislosti rovnováhy monomer-dimer pro trifluoroctovou kyselinu ve směsném rozpouštědle a v systému se studovaným polypeptidem.

Vliv agregace polypeptidu a nižší polarity rozpouštědla na interakci PBLG s trifluoroctovou kyselinou byl demonstrován ve směsném rozpouštědle benzen- d_6 /trifluoroctová kyselina.

Sekce : Molekulová spektroskopie

Monitorování změn struktury chirálních farmaceuticky významných látek metodou vibračního cirkulárního dichroismu

Autor: Karel Zuček
Ročník: B2
Ústav: analytické chemie
Školitel: Prof. RNDr. Marie Urbanová, CSc.

Měďnaté komplexy Schiffových bazí odvozené od salicylaldehydu a vybraných aminokyselin se díky jejich antioxidantním účinkům studují jako potenciální farmaka působící např. proti zánětlivým a alergickým onemocněním. Změna struktury za různých fyzikálně-chemických podmínek může ovlivnit terapeutické účinky a toxicitu léčiv, a proto je důležité tyto změny sledovat. V předkládané práci byla k monitorování jemných změn struktury vyvolaných interakcemi s rozpouštědlem nebo změnou pH použita spektroskopie vibračního cirkulárního dichroismu, která je velmi citlivá na strukturu chirálních látek.

Amonium bromidy s dlouhým alkylovým řetězcem jsou látky vyvinuté pro urychlení průniku chirálních léčiv přes kůži. Cílem této části práce bylo zjistit, zda je metoda vibračního cirkulárního dichroismu schopná zachytit změnu struktury těchto látek v závislosti na délce alkylového řetězce sledováním charakteristických vibrací spojených s chirálním jádrem a s alkylovým řetězcem.

Sekce : Analytická chemie

Speciační analýza selenu v moči spojením HPLC a ICP/MS

Autor: Štěpán Eichler
Ročník: M1
Ústav: analytické chemie
Školitel: Doc. Ing. Oto Mestek, CSc.

Selen je prvek nezbytný pro lidský organismus, je součástí složitého metabolického řetězce, v němž se váže do mnoha různých forem. Hladina selenu v lidské moči se jeví jako vhodný ukazatel zastoupení tohoto prvku v organismu. Nejvíce zastoupený izotop ^{80}Se je při stanovení metodou ICP/MS rušen dimerem argonu a proto musela být použita a optimalizována reakční cela (DRC). Pro kvantitativní vyhodnocení celkového množství Se byla stanovena mez detekce a ověřena linearita a správnost. Pro speciační analýzu bylo použito on-line spojení ICP/MS a kapalinová chromatografie na obrácených fázích. Pro optimalizaci separace byly analyzovány vzorky modelové i reálné moči s přidavky specií Se (seleničitan, selenan, selenomethionin, selenocystin a selenomočovina). Dále byly analyzovány vzorky moči po aplikaci potravinového doplňku obsahující Se a vzorky kriticky nemocných pacientů po aplikaci dávek seleničitanu. V reálných vzorcích moči byla prokázána přítomnost některých dalších zatím neurčených forem selenu.

Sekce : Analytická chemie

Studium dusíkové vazby

Autor: Milan Jakubek
Ročník: B3
Ústav: analytické chemie
Školitel: Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.

Nekovalentní mezimolekulární interakce, přestože jsou slabé, rozhodují o vlastnostech materiálů, existenci života. Jednou z těchto interakcí je halogenová vazba tvořená mezi atomem halogenu (Cl, Br, I...) a atomem s volným elektronovým párem (N, O, S...). Halogen vázaný na uhlíku v tomto případě vystupuje jako elektron akceptor (Lewisova kyselina) a atom s volným elektronovým párem jako elektron donor (Lewisovova báze). V případě, že elektronovým donorem je atom dusíku, jedná se o doposud málo probádanou dusíkovou vazbu.

Práce se zabývá vznikem dusíkové vazby mezi atomem jódu 1,2,3,4,5-pentafluor-6-jódbenzenu a atomem dusíku 1,4-dikyanobenzenu. Tento systém lze studovat pomocí ^1H a ^{19}F NMR, IČ a Ramanovy spektroskopie. Abychom získali další charakteristiky dusíkové vazby tohoto systému, připravili jsme isotopově značený 1,4-dikyanobenzen ($^{15}\text{N}\equiv^{13}\text{C}-\text{C}_6\text{H}_4-^{13}\text{C}\equiv^{15}\text{N}$). Tato látka umožní sledovat dusíkovou vazbu i pomocí ^{13}C a ^{15}N NMR, a interpretovat detaily IR a Ramanových spekter.

Sekce : Analytická chemie

Stanovení fosforu metodou hmotnostní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem

Autor: Antonín Kaňa
Ročník: M1
Ústav: analytické chemie
Školitel: Doc. Ing. Oto Mestek, CSc.

Stanovení fosforu metodou hmotnostní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem je zatíženo spektrálními interferencemi polyatomických iontů. V této práci byla testována možnost stanovení fosforu v biologických vzorcích jak v podobě iontu P^+ , tak ve formě PO^+ . Tvorba iontu PO^+ byla podpořena reakcí s kyslíkem v dynamické reakční cele, u níž byly optimalizovány parametry nastavení. Měření ukázala, že velikost interferencí je u iontu P^+ nižší než u iontu PO^+ . Dále bylo zjištěno, že použití reakční cely nevede ke zlepšení parametrů měření. Pro danou metodu byla stanovena mez detekce a linearita kalibrační závislosti. Správnost byla ověřena analýzou referenčního materiálu sušeného mléka a vzorku fazolí analyzovaných fotometricky.

Sekce : Analytická chemie

Studium tris Trögerových bazí vhodných pro analytické aplikace

Autor: Jiří Kessler
Ročník: B3
Ústav: analytické chemie
Školitel: Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.

Kavitandy jsou látky schopné navázat do své kavity externí sloučeninu. Do této skupiny látek se řadí např. molekulární kleště a pinzety. Díky jejich vazebným vlastnostem nacházejí uplatnění jako specifické receptory a jsou například funkční součástí chemických senzorů či stacionárních fází chromatografických technik. Jednou ze skupin látek mající výše uvedené vlastnosti jsou nedávno objevené *tris*-Trögerovy báze. Tyto látky se mohou tvořit 3 diastereoizomery. Izomer „*anti,anti*“ nemá strukturu tweezeru ani clipsu, zatímco izomer „*syn,anti*“ strukturně spadá do molekulárních pinzet a izomer „*syn,syn*“ do kleští. Práce se zabývá přípravou, izolací, identifikací (1D a 2D NMR) diastereoisomerů *tris*-Trögerových bazí, jejich vzájemnou přeměnou pomocí izomerizace v různém prostředí. Na jednotlivých izomerech budou provedeny komplexační studie s vybranými analyty.

Sekce : Analytická chemie

Využití kvantově chemických výpočtů vibračních spekter při strukturní analýze

Autor: Václav Parchaňský
Ročník: B3
Ústav: analytické chemie
Školitel: Ing. Bohumil Dolenský, Ph.D.

V případě dostatečného rozlišení lze kovalentní strukturu nesymetrických molekul stanovit použitím NMR experimentů. Naproti tomu u diastereoisomerů symetrických molekul často nastává případ, kdy je sice možné diastereoisomery rozlišit, ale není možné jednoznačně určit jejich strukturu. Tyto diastereoisomery se však liší symetrií a proto můžeme s výhodou využít vibrační spektroskopie, která odráží symetrii molekuly. Interpretace spekter a nalezení takovýchto vibrací je obtížné. K jejich nalezení můžeme s výhodou použít kvantově chemických výpočtů intenzit a vibračních frekvencí infračervených a ramanových spekter. V této práci byl tento přístup použit na vybrané deriváty *bis*-Trögerových bazí.

Sekce : Analytická chemie

Solubilizace metallakarboranů pomocí biokompatibilních excipientů

Autor: Jakub Rak
Ročník: M2
Ústav: analytické chemie
Školitel: Prof. RNDr. Vladimír Král, DSc.

V oblasti chemie farmaceuticky významných látek jsou deriváty metallakarboranu a další boronové klastry studovány jako slibné prostředky pro léčbu (BNCT, modulátory enzymové aktivity) a využití v zobrazovací technice. Potenciální farmaceutické využití komplikuje především jejich nízká rozpustnost a spontánní agregace ve vodě, což má za následek špatnou prostupnost buněčnými stěnami. Toto lze vyřešit nalezením vhodného biokompatibilního činidla, které umožní udržet látku ve vodném roztoku v neagregované formě. Cílem této práce je komplexní screening skupiny deseti metallakarboranů s vybranými deriváty cyklodextrinů, klasickými surfaktanty, amfifilními kopolymery a lidským sérovým albuminem za účelem nalezení nejvhodnějších strukturních motivů. Dalším cílem je porovnání síly interakcí ostatních excipientů vůči interakci se sérovým albuminem, který metallakarborany ochotně komplexuje a tím představuje další komplikaci pro jejich transport do buněk.

Sekce : Analytická chemie

Měření tuku v mléce pomocí impedanční spektroskopie

Autor: Michal Tatarkovič
Ročník: M2
Ústav: analytické chemie
Školitel: Ing. Martin Krondák, Ph.D.

Stanovení tuku v mléce představuje jedno z nejčastěji prováděných stanovení v mlékárenském průmyslu a hraje významnou roli v odběratelsko-dodavatelských vztazích. Emulgovaný tuk interaguje s povrchem lipofilně modifikované elektrody pokryté filmem vodivého polymeru. V práci byly použity filmy polypyrrolu a polyneutrální červeně připravené cyklickou voltammetrií z vodného roztoku chloristanu lithného respektive roztoku chloristanu tetrabutylammoného v acetonitrilu. Změna polymerního filmu způsobená interakcí s mlékem byla monitorována pomocí galvanostatické elektroimpedanční spektroskopie s nulovou stejnosměrnou složkou vkládaného proudu v rozmezí frekvencí 94,6 kHz až 210 Hz. Výsledky měření umožňují rozlišení vzorků mléka/smetany s obsahem 0,5 až 30 % tuku.

Sponzoři sekcí Analytická chemie a Molekulová spektroskopie:



SIGMA-ALDRICH®

CHROMSERVIS

CHROMSPEC

SPOL. S R.O.

MANEKO

Sekce : Fyzikální chemie

Vplyv neprchavých aditiv na rozdeľovací koeficient ethylbutyrátu medzi vodu a vzduch

Autor: Eva Baránková
Ročník: B3
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Doc. Ing. Vladimír Dohnal, Csc.

Prchavost' vonných a aromatizujúcich látok z rôznych potravinárskych alebo kozmetických produktov či medziproduktov je ovplyvňovaná prímiesami rôznych neprchavých látok, ktoré sa vyskytujú v týchto matriciach prirodzene alebo sú pridávané cielene. Pre racionálne vedenie výrobného procesu a formuláciu výsledného produktu je preto dôležitá znalosť vplyvu takýchto aditiv na rozdeľovací koeficient prchavých organických látok medzi vodu a vzduch (K_{aw}). Ku kvantitatívnemu stanoveniu tohto vplyvu bola v predloženej práci vypracovaná experimentálna metodika využívajúca headspace plynovú chromatografiu. Metódou bol sledovaný efekt solí (NaCl, NaHCO₃), sacharidov (glukóza, sacharóza), polysacharidov (α -cyklodextrín, β -cyklodextrín), polyalkoholov (glykol, glycerín) a denaturantov proteínov (močovina, guanidín hydrochlorid) na K_{aw} ethylbutyrátu ako typického reprezentanta vonných substancií. V zhode s očakávaním bol najsilnejší efekt zistený u anorganických solí (vysoľovanie) a cyklodextrínov (retencia inkluznou komplexáciou), u ostatných látok bol pozorovaný slabší vsoľovací (polyalkoholy, denaturanty) či vsoľovací (sacharidy) efekt. Koncentračná závislosť pozorovaných efektov bola veľmi dobre kolerovaná Sečenovovou rovnicou resp. pre cyklodextríny modelom inkluznej komplexácie (1:1).

Sekce : Fyzikální chemie

Nastavení silového pole pro popis rovnováhy krystal NaCl -- solanka

Autor: Michal Bouček
Ročník: B3
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Doc. RNDr. Jiří Kolafa, CSc.

Práce se zabývá molekulárně-dynamickou simulací fázové rovnováhy mezi krystalem NaCl a jeho nasyceným vodným roztokem za pokojové teploty a atm. tlaku při použití SPC/E modelu vody. Byl studován vliv polarizovatelnosti iontů a tvaru krystalu na kinetiku jeho rozpouštění ve vodě. Bylo zjištěno, že použité silové pole nedokáže dobře popisovat rovnovážné chování iontů v kapalně fázi, což má za následek přílišné rozpouštění krystalu, nebo naopak krystalizaci iontů z nasyceného roztoku. Optimalizací interakčních potenciálů mezi ionty a vodou se podařilo dosáhnout takových parametrů Lennard-Jonesova potenciálu, které zajišťují rozpustnost soli odpovídající fyzikální realitě.

Sekce : Fyzikální chemie

Popis rosné křivky systému voda – metan

Autor: Monika Hubková
Ročník: M1
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Prof. RNDr. Petr Voňka, CSc.

V práci jsou navrženy a testovány dvě metody výpočtu rosného molárního zlomku vody v plynné fázi (angl. water content) systému voda (1) – metan (2) v oblastech kapalina-pára a led-pára. Obě metody jsou založeny na předpokladu, že rozpustnost metanu ve vodě je velmi malá, tj. $x_1 \approx 1$, $x_2 \approx 0$.

Sekce : Fyzikální chemie

Ionizace složek nukleových kyselin v roztoku a v plynné fázi

Autor: Eva Pluhařová
Ročník: M2
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: RNDr. Petr Slaviček, Ph.D.

Působením vysokoenergetického záření na buňku dochází k ionizaci DNA za vzniku zoxidovaného centra, tj. kladně nabitě „díry“. Tato díra migruje podél dvojšroubovice a obvykle se lokalizuje na guaninu, bázi s nejnižším ionizačním potenciálem (IP). Ionizaci dostatečně rozpustných složek nukleových kyselin (NK) v roztoku lze zkoumat experimentálně teprve několik let pomocí fotoelektronové spektroskopie za použití techniky mikrotřisek.

Cílem práce je studovat ionizaci složek NK metodami teoretické chemie. Zabývali jsme se purinovými bázemi, především guaninem, a různě protonovanými fosforečnanovými ionty. Roztok jsme modelovali několika způsoby: explicitním zahrnutím molekul rozpouštědla (první solvatační slupka pro báze, až 64 molekul vody v případě fosfátů), modelem polarizovatelného kontinuálního dielektrika (PCM) a kombinací předchozích (tzv. hybridní model).

Na základě výsledků výpočtů jsme diskutovali vliv tautomerie guaninu a konformační izomerie jeho nukleosidů a nukleotidů na IP, odlišnosti v plynné fázi a v roztoku, kde se výrazně projevuje stínící efekt rozpouštědla. Na různě protonovaných fosforečnanových iontech lze demonstrovat vhodnost modelů solvatace. Konvergence IP s počtem molekul vody v hybridním modelu je velmi rychlá pro H_2PO_4^- , ale k řádnému popisu trojnásobně nabitého iontu jsou třeba zhruba dvě solvatační vrstvy navíc umístěné v PCM.

Sekce : Fyzikální chemie

Aplikace saturační metody ke stanovení Henryho konstanty isofluranu ve vodě

Autor: Zdeněk Jonát
Ročník: M2
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Dr. Ing. Pavel Vrbka

Na základě předchozích výsledků byla modifikována aparatura ke stanovení limitních aktivitních koeficientů ve směsích se zvýšenými hodnotami Henryho konstanty. Měřeními s novou verzí aparatury byly revidovány dřívější experimenty prováděné na testovacím systému isofluranu ve vodě. Srovnání dat dosažených s původní a modifikovanou verzí aparatury ukázalo protichůdný vliv provedených konstrukčních změn na výslednou hodnotu limitního aktivitního koeficientu.

Sekce : Fyzikální chemie

Stanovení difuzních koeficientů plynů v polyimidových membránách

Autor: Kryštof Pilnáček
Ročník: M1
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Ing. Ondřej Vopička

Cílem této práce je stanovení difuzních koeficientů plynů v hybridních polyimidových membránách plněných oxidem křemičitým, potenciálně využitelných pro separaci plynů. Vlastní experimenty byly prováděny pomocí integrální manometrické metody za laboratorní teploty a atmosférického tlaku.

V práci je uvedeno odvození vztahů pro výpočet difuzního koeficientu ze závislosti tlaku na čase, dále práce obsahuje vypočtená data popisující transportní vlastnosti měřených membrán. Rovněž byl vytvořen algoritmus pro software Maple 13 pro vyhodnocení naměřených dat.

Z výsledků práce vyplývá, že změnou složení membrán lze ovlivnit jejich difuzní koeficient.

Sekce : Fyzikální chemie

Radiační chemie vody – ab initio studium fotoionizačních procesů

Autor: Ondřej Svoboda
Ročník: M2
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.

Voda je jednou z nejdůležitějších látek na Zemi. Interakce záření s vodou hraje mimo jiné zásadní roli při radiačním poškození biomolekul. Teoretický popis světlem vyvolaných reakcí ve vodě je proto mimořádně důležitý, přitom však značně nesnadný.

V první části práce se zabývám výpočtem fotoionizačních spekter pro molekulu vody a malé klastry. Cílem je testovat novou metodiku jejich výpočtů pomocí metody dráhových integrálů. Tímto přístupem jsem schopen věrohodně modelovat fotoionizační spektra se zahrnutím kvantových i termálních efektů.

V další části práce se zabývám dynamikou vodných klastrů po fotoionizaci s použitím metod neadiabatické dynamiky (Full Multiple Spawning).

Sekce : Fyzikální chemie

Experimentálne štúdium parciálnych molárných objemov vybraných cyklických ketónov v zriedených vodných roztokoch

Autor: Lukáš Šimurka
Ročník: M1
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Doc. Ing. Ivan Cibulka, CSc.

Práce uvádí výsledky měření hustoty vodných roztoků ketónů. Data byla naměřena na přístroji DSA 5000. Výsledky byly zpracovány do závislosti parciálního molárního objemu při nekonečném zředění v závislosti na teplotě. Na základě získaných hodnot byla vytvořena příspěvková metoda odhadující parciální molární objem v homologické skupině cyklických ketónů.

Sekce : Fyzikální chemie

Potvrzení aditivního charakteru Sečenovovy konstanty v systému MTBE - voda

Autor: Kateřina Zemánková
Ročník: M2
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Dr. Ing. Pavel Vrbka

Tato práce představuje rozšíření a zpřesnění výsledků prezentovaných na Studentské vědecké konferenci 2008.

Byly provedeny nové experimenty pro získání limitního aktivního koeficientu methyl *t*-butyl etheru (MTBE) ve vodných roztocích dalších anorganických solí při jejich různých koncentracích. Z koncentrační závislosti limitního aktivního koeficientu MTBE byly vyhodnoceny konstanty Sečenovovy rovnice.

Nově získané Sečenovovy konstanty byly, za předpokladu platnosti aditivního charakteru Sečenovovy konstanty (prezentovaném na SVK 2008), použity k rozšíření, popř. opravě souboru příspěvků jednotlivých iontů k celkové hodnotě Sečenovovy konstanty.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Studium tvaru přisedlé kapky metodou ADSA

Autor: Zuzana Brabcová
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Pavlína Basařová

Práce se zabývá teoretickým studiem kontaktního úhlu třífázového rozhraní pevná fáze – kapalina – plyn, který má velký význam pro stanovení mezifázových napětí jako jedna z mála přímo měřitelných veličin. Hlavní úkol spočíval v navržení postupu selekce vybraných experimentálních bodů ze snímaného obrazu přisedlé kapky a řešení smáčecího úhlu metodou ADSA (axisymmetric drop shape analysis). Nejprve bylo navrženo makro v softwaru NIS-Elements pro získání souřadnic bodů povrchu kapky; tyto body slouží pro porovnání teoretických a experimentálních dat. Tvar kapky byl potom navržen metodou ADSA na základě průměru a výšky kapky, zpracování bylo prováděno programem MatLab. Funkčnost postupu byla ověřena na několika kapkách, u kterých byla známá hodnota smáčecího úhlu.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Studium pohybu izolované bubliny před kolizí s pevnou částicí

Autor: Lucie Dolejší
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Pavlína Basařová

Chování bubliny ve vodě a vodných roztocích je významně ovlivněno charakterem povrchu bubliny. Bublina v čisté vodě má povrch, který se snadno obnovuje a není ničím bržděn, tj. je tzv. mobilní. Pokud jsou ve vodě přítomny příměsy nebo povrchově aktivní látky, dochází k zachycení těchto molekul na povrchu bubliny (tj. na rozhraní kapalina-plyn). Zachycené molekuly způsobují zbrždění pohybu povrchu bubliny, který se stává imobilní. Důsledkem je např. snížená stoupavá rychlost bubliny. Náplní této práce bylo experimentální pozorování a popis rozdílu v chování bubliny před kolizí s nakloněnou rovinou, představující kulovou částicí o nekonečném průměru, v čisté demineralizované vodě a vodě s příměsí povrchově aktivních látek. Interakce byly sledovány rychloběžnou kamerou.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Modelování mechanického namáhání houževnatého polystyrenu

Autor: Martin Klejch
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Juraj Kosek, Zdeněk Grof

Houževnatý polystyren (HIPS) je heterofázový kopolymer vykazující dobrou odolnost při nárazu a statickém namáhání. Cílem práce je nalezení závislosti mezi mikrostrukturou materiálu HIPS a jeho aplikačními mechanickými vlastnostmi. Fázovými separacemi při výrobě HIPS vzniká dvojúrovňová (tzv. salámová) morfologie materiálu: (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. Pro modelování odolnosti houževnatého polystyrenu byla využita metoda diskretních elementů (DEM). Soustředujeme se na statické namáhání HIPS, především pak na jeho protahování za mezí kluzu a na tvar křivky napětí vs. protažení získané při namáhání v tahu. Kaučukovité částice v HIPS zabraňují propagaci puklin a jsou tak příčinou houževnatosti. Vyvinutý program umožňuje předpovídat houževnatost materiálu na základě jeho heterofázové mikrostruktury a je také uplatnitelný v dalších průmyslově významných systémech, například ve studiu mletí. Výsledky simulací jsou srovnány s experimenty.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Modelování požáru metodou počítačové dynamiky tekutin

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

Matematické modelování požárů si klade za cíl predikci a vyhodnocování následků požáru. Práce je především zaměřena na vyhodnocování změn sítě a modelů radiace na výsledek konkrétního zadání, které odpovídá velkorysné požární zkoušce. Dále jsou porovnávány výsledky simulace s naměřenými daty. Poslední část se věnuje predikci požární zkoušky, která se uskuteční 19.11.2009 v Bohumíně. Pro všechny výpočty byl užít program FDS 5 s grafickou nástavbou PyroSim 2008

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Vývoj matematických modelů pro popis vakuového kontaktního sušení

Autor: František Polák
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Martin Kohout, Ph.D.

Vakuové kontaktní sušení je jedna z častých jednotkových operací využívaných v chemickém průmyslu. Své využití nachází v potravinářských, farmaceutických a biochemických výrobcích. Vzhledem k provozovanému tlaku, který se blíží vakuu, se pevný materiál suší při nižších teplotách a nedochází tak k poškození látek na vyšší teplotu citlivých. Byl navržen matematický model vakuového sušení pro válcovou sušárnu s vyhřívanými stěnami a podstavou. Matematický model, který vychází z principů sdílení tepla a hmoty, je popsán pomocí lokálních enthalpických bilancí a bilancí kapalně a parní fáze. Výsledný systém parciálních diferenciálních rovnic byl implementován do zdrojového kódu programovacího jazyka COMSOL Multiphysics. Systém spolu s počátečními a okrajovými podmínkami byl integrován v čase s využitím metody konečných objemů. Výsledky simulace vakuového sušení byly porovnány s experimentálními daty pro systém izopropanol-uhličitan sodný. Vhodnou změnou hodnot některých parametrů modelu byla nalezena shoda mezi výsledky simulace a průběhem experimentu.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Studium kinetiky suché neutralizace s ohledem na granulaci detergentů

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

Cílem studie je prozkoumání a kvantitativní popsání dějů probíhajících během reakce uhličitanu sodného (Na_2CO_3) s kyselinou dodecylbenzensulfonovou (HLAS). Tato reakce patří do skupiny tzv. suchých neutralizací, protože zásada (v našem případě uhličitan sodný) je v pevném stavu. Sodná sůl kyseliny dodecylbenzensulfonové (NaLAS) je významný surfaktant, který je hojně využíván ve výrobě pracích a čistících prostředků. Jeho hlavní výhodou je vysoká účinnost a šetrnost vůči životnímu prostředí. Budou prezentovány výsledky měření dynamiky smáčení substrátu (tableta uhličitanu sodného) za současného vývinu oxidu uhličitého a tvorby pasivační vrstvy. Výsledky budou prezentovány jednak formou grafické závislosti smáčecího úhlu, poloměru a výšky kapky na čase, a následně bude vyhodnocena závislost zdánlivé reakční rychlosti na ploše pasivační vrstvy. Bude diskutován význam získaných závislostí pro kinetiku reaktivní granulace a zrání (stárnutí) granulovaných detergentů. Takto zjištěná reakční kinetika má zásadní význam pro správné popsání procesu reaktivní granulace detergentů, kde reakční smáčení substrátu kapkami kyseliny je krokem určujícím velikost a mikrostrukturu výsledných granulí a jejich mechanické i jiné vlastnosti.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Simulační studie účinnosti automobilového de-NO_x katalyzátoru během různých jízdních cyklů

Autor: Filip Suk
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jan Štěpánek

V Evropě je pro posouzení spotřeby paliva a množství emisí vozů se spalovacím motorem užíván tzv. Evropský jízdní cyklus (NEDC). Obdobou evropského jízdního cyklu ve Spojených státech amerických je cyklus FTP-75, jenž se skládá ze studeného startu, fáze průběžné a fáze teplého startu. Tyto zkoušky bývají doplněny dodatečnými zkouškami pro simulaci rychlé jízdy (US06) a užití klimatizace (SC03). Během simulace jsou měřeny koncentrace škodlivých látek ve výfukových plynech, z nichž se vypočte množství vyprodukovaných složek na ujetou vzdálenost. Dále pak je na základě naměřených hodnot vypočtena spotřeba paliva, jež se posléze uvádí v technické dokumentaci motorového vozidla. Tato práce s využitím programu pro simulaci monolitických reaktorů srovnává účinnost katalyzátoru s ukládáním a redukcí NO_x během jízd za podmínek daných evropským a americkým jízdním cyklem.

Sekce : Matematické modelování v chemickém inženýrství

Studium dynamiky a přenosu excitací v srdeční tkáni

Autor: Petr Vápenka
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: prof. Ing. Igor Schreiber, CSc.

V této práci je studován přenos vzruchů mezi srdečními buňkami. Srdeční buňky (myocyty) jsou excitabilní. Podstata excitability spočívá v autokatalytickém uvolňování vápenatých iontů ze sarkoplasmatického retikula. Tyto ionty následně způsobí svalovou kontrakci. Buňky jsou navzájem propojeny vodnými póry (volnými spoji), kterými mohou prostupovat malé molekuly (a také Ca²⁺ ionty). Funkčnost těchto spojů je v poslední době považována za důležitý prvek ovlivňující stárnutí srdce. Model myocytu byl převzat z odborné literatury a studován metodami analýzy nelineárních dynamických systémů. Dále bylo studováno šíření excitací mezi buňkami v závislosti na počtu volných spojů v sítích s různou topologií. Výsledky jsou diskutovány s ohledem na dostupná experimentální data.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Vývoj mikrofluidního systému využívajícího segmentovaný tok pro hydrolýzu rostlinných olejů

Autor: Bc. Jiří Čech
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Michal Příbyl, Ph.D.

Enzym lipáza, který je využíván pro hydrolýzu nebo glycerolýzu rostlinných olejů, pracuje na fázovém rozhraní olej voda. Pro zpracování určitého množství oleje je tedy výhodné vytvořit velký mezifázový povrch. Klasické vsádkové uspořádání, kdy je emulze vytvářena intenzivním mechanickým promícháváním reakční směsi má řadu nevýhod: velké střížné síly mohou vést k denaturaci enzymu, v nádobě mohou vznikat mrtvé prostory, lze obtížně maximalizovat výtěžek požadovaného produktu atd. Alternativou k vsádkovému uspořádání je uspořádání kontinuální využívající segmentovaný tok, které některé nevýhody vsádkového uspořádání eliminuje. V kanále je vytvářena emulze tak, že jsou za sebou řazeny díly oleje a vody (segmenty) tak, aby plocha mezifázového rozhraní byla velká vzhledem k objemu zpracovávaných tekutin. Emulze se pohybuje uvnitř kanálku a na mezifázovém rozhraní jednotlivých segmentů probíhá enzymová reakce. Délkou kanálu nebo nastavením průtoku lze regulovat dobu prodloužení reakční směsi. V této experimentální práci je prezentována úvodní studie zaměřená na vývoj mikrofluidního směšovače pro vytváření emulze olej-voda a separátoru, který umožňuje opětovné rozdělení kapalných fází a popřípadě regeneraci enzymu.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Využití TD-NMR pro studium polymerů

Autor: Josef Chmelař
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Juraj Kosek, Tomáš Gregor

Nukleární magnetická rezonance v časové doméně (time-domain NMR) je alternativou ke klasické NMR strukturní spektroskopii. Výhodami TD-NMR jsou nízké pořizovací i provozní náklady a možnost měřit kapalně i pevné vzorky nedestruktivně a bez nutnosti úprav. Namísto spekter chemických posunů se sleduje časový vývoj signálu, který lze popsat časovými relaxačními konstantami T_1 a T_2 . Provádějí se jednoduché i složité experimenty skládající se z různých sekvencí magnetických pulsů, z nichž lze získat kromě relaxačních konstant též další informace jako například difuzní koeficienty nebo údaje o morfologii a složení heterofázových polymerních vzorků. Též samotné T_1 a T_2 konstanty lze empiricky korelovat s fyzikálními vlastnostmi vzorku, jako například s viskozitou, molární hmotností nebo stupněm zesíťování polymerních řetězců. V této práci prezentujeme základní teorii TD-NMR, popis měřících procedur a vyhodnocování dat spolu s ukázkou výsledků jak pro jednoduché vzorky, sloužící pro ověřování měřících procedur, tak pro vzorky polymerních systémů. V současné době se zaměřujeme na studium sorpce v polymerech a studium různých parametrů houževnatého polystyrenu.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 1

Dřímající síla česneku

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

Česnek, známý pod botanickým názvem *Allium sativum*, je široce rozšířená plodina mající původ ve střední Asii. Dodnes se hojně používá v lidovém léčitelství. Česneková buňka obsahuje volně v cytosolu látku alliin, jež nevykazuje žádný antibakteriální účinek, a enzym alliinázu, fyzicky odděleně ve vakuolách. Při mechanickém porušení konzistence buňky dojde k rychlé reakci, jejímž produktem je antibakteriální nestabilní látka – allicin (poločas rozpadu při 37°C je 1 den). Cílem předložené práce bylo nejdříve ověřit, zda je možné z česneku odděleně extrahovat alliin a alliinázu a pomocí enkapsulace následně vytvořit kompozitní mikročástice inspirované strukturou buňky. Druhou strategií, která je v současnosti ověřována, je nechat proběhnout reakci až na allicin tento následně izolovat a stabilizovat přidáním vhodné látky. Jako kandidátní látky jsou testovány bio-kompatibilní polymery (PEG, MCC, HPC, HPMC, CMC, alginát) s následnou lyofilizací. Po kryogenickém mletí podrobíme takto stabilizovaný allicin kapkovým pokusům na vhodné bakteriální kultuře (*E. Coli*) v různých časech. Tím bude měřen pokles aktivity allicinu v čase a vybrán vhodný kandidát pro stabilizaci allicinu.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 1

Elektrodová pole v mikrostrukturovaných systémech

Autor: Tomáš Kotala
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Miloš Svoboda

Mikrofluidní zařízení nacházejí řadu aplikací i v komerčním nasazení. U řady z nich je využíváno elektrického subsystému (např. pro vyvolání elektroosmotického toku či měření vybraných vlastností protékající tekutiny). To obvykle znamená značné komplikace při návrhu a výrobě samotného mikrozařízení, jelikož je nutné do funkčního celku integrovat prvky s velmi odlišnými vlastnostmi; typicky se jedná o kombinaci polymerního substrátu s vlastními mikrostrukturami a kovových funkčních vrstev (např. elektrodového pole). Cílem této práce je zvládnutí technologií mikrostrukturování polymerních substrátů, používaných v Laboratoři mikrochemického inženýrství, a výroba funkčního vzorku mikrozařízení s integrovaným elektrodovým polem, případně i s dalším funkčním prvkem z jiného materiálu (např. membránou). V teoretické části budou zmíněny principy použitých postupů. V experimentální části jsou diskutovány zkušenosti s návrhem a výrobou konkrétního mikrozařízení a uvedeny výsledky měření.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Testování různých mikrofluidních čipů a imobilizačních technik pro imunoanalýzu

Autor: Bc. Marek Nebyla
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Michal Příbyl, Ph.D.

Práce vznikla v rámci dlouhodobého výzkumu a vývoje optických senzorů vhodných pro detekci a případně také kvantifikaci proteinů. Na modelových imunoanalytických a dalších bioafinitních systémech jsou testovány různé typy mikrofluidních čipů, metody imobilizace receptorů, sekvence kroků při stanovení proteinů ze vzorku a optická detekční aparatura. Vyvinuté mikrofluidní čipy jsou složeny ze dvou až tří vrstev z organo-křemíkového polymeru – polydimethylsiloxanu (PDMS). Tento materiál byl zvolen především kvůli relativně snadnému postupu výroby čipů, biokompatibilitě, vysoké optické propustnosti a chemické odolnosti. Ve vyrobených čipech byl uchycen proteinový receptor (obvykle protilátka) různými imobilizačními technikami – pasivní sorpcí, vytvořením slupky polyelektrolytu nebo silanizací povrchu s následnou kovalentní vazbou receptoru na povrch. Po přivedení roztoku ligandu značeného fluorescenční značkou a následném promytí, byla sledována intenzita fluorescenčního signálu v jednotlivých mikrofluidních kanálcích. Cílem bylo určit, který z testovaných mikrofluidních čipů a která imobilizační technika umožňuje získat vysokou intenzitu fluorescenční emise. Intenzita emise byla kvantifikována pomocí mikroskopu opatřeného dichroickým zrcadlem nebo pomocí laserové detekční aparatury.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Nelineární efekty v sorpci a difuzi penetrantů ve vzorcích polystyrenu a polyolefinů

Autor: Andra Nistor
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Juraj Kosek, Lucie Meisterová

Difuze pentanu v polystyrenu (PS) je jednak významná pro průmyslovou výrobu pěnového PS, jednak zajímavá teoreticky vzhledem k nelineární závislosti difuzivity na koncentraci pentanu v PS a na teplotě. Mechanismus difuze pentanu v PS je kombinací difuzní fronty a Fickovy difuze. Řadu zajímavostí nalezneme také při rozboru sorpce a difuze penetrantů v polyolefinech. Například přítomnost kompaktních zón v porézních částicích polyolefinů vysvětluje nejen složitý tvar desorpčních křivek získaných gravimetricky, ale také zvýšený obsah komonomeru ve velkých částicích lineárního nízkohustotního polyethylenu (LLDPE). V práci je popsána aparatura pro měření dynamiky sorpce a desorpce ve vzorcích polymerů, metodika zpracování experimentálních dat a vyhodnocení transportních charakteristik penetrantů v polymerech. Získané výsledky jsou využity pro testování řady hypotéz souvisejících s průmyslově či teoreticky zajímavými důsledky sorpce a difuze v polymerech.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Experimentální studium morfologie houževnatého polypropylenu

Autor: Klára Smolná
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Juraj Kosek, Hana Hajová

Houževnatý polypropylen (hiPP) je průmyslově významným materiálem využívaným především v automobilovém průmyslu. Znalost jeho struktury a složení je klíčová pro pochopení a možné řízení jeho fyzikálně-mechanických vlastností. Základem struktury hiPPu je matrice tvořená iso-taktickým polypropylenem (iPP). Samotný iPP je křehký, proto se do jeho porézní struktury zabudovává kaučuk (ethylen-propylenový kopolymer), který zlepšuje mechanické vlastnosti materiálu. U extrudovaného typu hiPPu se navíc vytváří ještě třetí fáze uvnitř kaučukových domén, která může být tvořena polyethylenem nebo krystalickým kopolymerem ethylen-propylen s dlouhými řetězci polyethylenu. Složení těchto inkluzí je však stále předmětem diskuzí. Morfologie hiPPu byla mapována pomocí techniky AFM, která umožňuje sledovat topologii i rozložení jednotlivých fází. Cílem práce je zmapování rozložení a určení velikosti kaučukových domén ve struktuře různých vzorků hiPPu a vysvětlení mechanismu, jak rozložení kaučukových domén určuje aplikační vlastnosti houževnatého polypropylenu.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 1

Studium smáčivosti silanizovaného skla v roztocích simulujících flotační činidla

Autor: Tereza Váchová
Ročník: M1
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Pavlína Basařová

Práce je součástí projektu zabývajícího se vzájemnými interakcemi bublin a pevných částic. Pravděpodobnost zachycení bubliny na povrch částice ovlivňuje charakter povrchu - především jeho smáčivost. Jako experimentální částice se používají skleněné kuličky pokryté vrstvou silanu, který způsobuje zvýšení hydrofobicity povrchu, a tedy zvýšení pravděpodobnosti adheze bubliny. Pro měření smáčivosti byla použita mikroskopická skla upravená různými typy silanů. Měření smáčecích úhlů a povrchového napětí vody a roztoků propanolu ve vodě (simulují flotační činidla) vedlo k určení mezifázového napětí silanizovaného skla. Pro měření smáčecích úhlů byla použita metoda přisedlé kapky, povrchové napětí kapalin bylo měřeno metodou odtrhávání prstence. Mezifázové napětí bylo určeno ze stavové rovnice, Zismanovou hypotézou a Zismanovou aproximací.

Syntéza a měření stability termosenzitivních liposomů

Autor: Honza Zíka
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: doc. František Štěpánek, Ph.D.

Liposomy jsou syntetické objekty o velikostech desítek nanometrů až jednotek mikrometrů, které se spontánně tvoří ve vodných roztocích fosfolipidů. Jejich využití je v poslední době hlavně v řízeném vylučování léčiv. Na jejich přípravu bylo vyvinuto mnoho metod, jedna z prvních, přesto stále používaných, je například Banghamova metoda, spočívající v jemné hydrataci fosfolipidového filmu. Vznikající liposomy však mají poměrně širokou distribuci velikosti, proto se pro zefektivnění jejich přípravy často používají metody jako sonikace, mikrofluidizace nebo homogenizace. Při použití těchto technik vznikají malé jednovrstvé liposomy o průměru řádově desítek nanometrů. Cílem této práce bylo prostudování různých metod přípravy lipozomů, jejich porovnání a volba vhodné metody pro přípravu lipozomů v laboratorních podmínkách. Pro použití lipozomů při řízeném vylučování aktivních látek či jejich prekurzorů je žádoucí řízená destabilizace lipozomů, např. lokální změnou teploty. Tu je možno uskutečnit přidáním magnetických nanočástic do struktury lipozomu a jejich excitací „na dálku“ vnějším elektromagnetickým polem. Budou předneseny dosavadní výsledky měření a testování stability liposomů v závislosti na změně teploty a strategie jejich dalšího vývoje.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 2

Měření veličin v mikrofluidních systémech v poli střídavého napětí

Autor: Pavel Beránek
Ročník: B3
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Dalimil Šnita, CSc.

V mikrofluidních zařízeních řada jevů probíhá odlišně ve srovnání s analogickým procesem v běžném měřítku; například je velmi obtížné dosáhnout turbulentního toku v kanálku malých rozměrů. Pro zkoumání jevů v mikroprostoru je nutné vzít v úvahu řadu efektů souvisejících se zmenšováním měřítku; například je-li použito pro měření pole mikroelektrod, s jejich zmenšujícím se rozměrem nabývá na významu efekt polarizace. Pro vybrané aplikace je proto vhodné využít měření v poli střídavého napětí; to ovšem přináší řádově složitější požadavky na návrh a konstrukci mikrozařízení, jakož i na sběr a interpretaci naměřených údajů oproti metodikám založeným na měření v poli stejnosměrného napětí. V práci je diskutována problematika návrhu a výroby mikrozařízení umožňujícího měření v poli střídavého napětí a uvedeny jsou výsledky předběžných experimentů.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 2

Studium dynamiky reakce glukosa - katalasa - glukosaoxidas - peroxid vodíku

Autor: Martin Číp
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Schreiberová Lenka, CSc.; prof. Ing. Schreiber Igor, CSc.

Práce se zabývá experimentálním studiem dynamiky reakce glukosa - katalasa - glukosaoxidas - peroxid vodíku. Tento systém patří mezi oscilační reakce katalyzované enzymy, které jsou běžné v živých systémech, a proto je jim v současnosti věnována velká pozornost. Princip reakce je takový, že H_2O_2 prochází přes dializační membránu do druhé (oddělené) části reaktoru, kde jsou přítomny oba enzymy. Katalasa katalyzuje přeměnu H_2O_2 na H_2O a O_2 . Kyslík je následně za přítomnosti glukosy a katalyzátoru glukosaoxidas přeměněn zpět na H_2O_2 . Měřenou veličinou je koncentrace O_2 , která se periodicky mění. Cílem první části práce bylo ověření oscilačního chování ve vsádkovém uspořádání. Byl studován vliv koncentrace peroxidu vodíku, glukosy, katalasy, glukosaoxidas, míchání a teploty na dynamiku reakce. Druhá část práce se soustředila na návrh a výrobu vhodného průtočného promíchávaného reaktoru, neboť v průtočném uspořádání nebyl tento systém dosud studován.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 2

Konduktometrie v mikroměřítku

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

Vodivostní senzory patří k nejčastěji používaným kvantitativním analytickým sensorům. Mezi hlavní klady patří takřka univerzální použití pro většinu elektrolytů, snadná kalibrace a značná robustnost senzoru samého. Zmenšování rozměru elektrod pomáhá snížit množství analyzovaného vzorku a hodí se tak pro výstupní detekci mnoha analytických metod pracujících s malými objemy, nebo pro detekci v integrovaných *lab-on-chip* systémech. Cílem této práce je návrh a vytvoření čtyř-elektrodového průtočného AC vodivostního senzoru s rozměry elektrod v řádu jednotek mm a naměření jeho vodivostní charakteristiky v závislosti na proudu, frekvenci a koncentraci. Součástí práce bude nástin problematiky měření vodivosti a obtíží při zmenšování rozměrů elektrod.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 2

Využití elektrodepozice pro výrobu mikrozařízení

Autor: Jaroslav Kotowski
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Dalimil Šnita, CSc.

Většina mikrozařízení obsahuje prvky, které se skládají z vodivých (převážně kovových) vrstev. Například soustava miniaturních pracovních a měřicích elektrod může sloužit ke sledování (měření) prostorového rozložení vybraných veličin či k ovlivňování jevů (např. toku kapaliny pomocí elektroosmózy) v mikrofluidních zařízeních. Existují dvě základní možnosti výroby vodivých vrstev. První spočívá v odstranění přebytečného materiálu. Nejprve se na substrát nanese vrstva kovu, která se pak selektivně odstraní (např. pomocí litografie) za vzniku požadované kovové struktury. Tento způsob je mimo jiné nevýhodný i z ekonomického hlediska, protože ve finálním zařízení je využita obvykle jen malá část plochy nanesené kovové vrstvy. Druhá varianta je založena na metodě elektrodepozice, kdy kov je selektivně nanesen přímo na místa, kde vznikne požadovaná struktura. Touto variantou se zabývá tato práce. Popsána je konstrukce galvanizačního zařízení a je diskutována problematika přípravy a složení galvanických lázní a vliv dalších parametrů na vytvořené kovové mikrostruktury. Například je nutné proces elektrodepozice navrhnout tak, aby složení galvanické lázně při pokovování nezpůsobovalo narušování vrstvy fotorezistu, která je součástí námi používané technologie výroby mikrozařízení.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 2

Syntéza a charakterizace dutých SiO₂ mikročastic

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

Cílem práce je příprava pevných porézních mikročastic na bázi SiO₂, jež by tvořily těla takzvaných chemických robotů. Inspiraci k porézním křemičitým schránkám lze nalézt v přírodě – například u mořských mikroorganismů (rozsivek). Příprava částic probíhá pomocí dvou odlišných metod. První metoda představuje upravenou Stöberovu metodu. Duté jádro je získáno pomocí sol-gel procesu srážením tetraethylorthosilikátu (TEOS) v dvojité emulzi o/w/o. Druhou cestou k přípravě dutých SiO₂ mikročastic je využití kapalných šablon jako prekurzoru pro srážení siliky. Pro dosažení přesné kontroly nad vlastnostmi mikročastic byly zkoumány experimentální podmínky obou metod ovlivňující velikost částic a tloušťku stěny. Výsledky parametrické studie ukazují jakým způsobem řídit proces přípravy k dosažení žádané velikosti mikročastic, a to v rozmezí desítek mikrometrů. Rozložení velikosti částic bylo měřeno pomocí statického rozptylu světla na laserovém analyzátoru částic a struktura porézních mikročastic byla pozorována pomocí elektronové mikroskopie a rentgenové mikrotomografie. Propustnost silikových schránek byla charakterizována nepřímo pomocí měření kinetiky vylučování modelové látky (methylenová modř) na UV/VIS spektrofotometru.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství 2

Posouzení výplní Sulzer Mellapak z hlediska hodnot objemového koeficientu přestupu hmoty v kapalně fázi

Autor: Jakub Netušil
Ročník: M2
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. František Rejl, PhD

V nabídce výrobců výplní převládají v poslední době strukturované výplně. Tyto výplně se vyznačují výbornými hydraulickými a transportními vlastnostmi. V této práci jsou porovnány výplně stejné řady, které se liší geometrickou hustotou povrchu výplně. Výplně nachází využití například při čistění kontaminovaných plynů z chemických továren nebo v potravinářství při desorbci kyslíku z nápojů. Rychlost absorpce je určována velikostí objemového koeficientu přestupu hmoty v kapalně fázi, $k_L a$. Dosud získaná vlastní i literární data naznačují, že vztah geometrické plochy výplně a koeficientu $k_L a$ není přímo úměrný. Vyjasnění této otázky je významné z hlediska návrhářského, jelikož s rostoucí hustotou povrchu výplně klesá její kapacita a roste tlaková ztráta. V rámci experimentální práce byly změřeny objemové koeficienty přestupu hmoty na straně kapaliny, $k_L a$, pro výplně Mellapak 250Y, Mellapak 350Y, Mellapak 452Y a Mellapak 500Y za různých průtoků kapalně fáze. Zvolenou metodikou je sledování desorpce kyslíku z vody do proudu dusíku. Koncentrace kyslíku v kapalně fázi byla měřena pomocí optických kyslíkových sond. Cílem práce je porovnat tato nově změřená data s daty nalezenými v literatuře, a provést posouzení vlivu zvyšování geometrické plochy výplně na objemový koeficient přestupu hmoty v kapalně fázi.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Syntéza silikových makroporózných mikrosfér

Autor: Nina Sarvašová
Ročník: B3
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Doc. František Štěpánek, Ph.D

Cílem mojej dosávadnej práce je vytvoriť makroporózne (veľkosť pórov cca 40 nm) silikové častice použiteľné ako porózne nosiče termosenzitívneho polyméru. V kombinácii s ním by vznikla taktiež termosenzitívna schránka, pričom difúzia jej obsahu z a do tejto schránky by bola regulovateľná manipuláciou s teplotou. Ako matricu pre vytvorenie týchto častíc som použila PVP-modifikované polystyrénové guľičky pripravené disperznou voľno radikálovou polymerizáciou. Polymerizácia polyvinilpyrolidinu bola iniciovaná kyselinou azobis(4-cyanovalérovou) v ethanolovo-vodnom prostredí za stáleho magnetického miešania. Naviazanie silikových častíc na polystyrénovú matricu bolo prevedené bázičky katalyzovanou polykondenzáciou v kombinácii s hydrolýzou v ethanolovo-vodnom prostredí. Odhad veľkosti vzniknutých častíc bol uskutočnený pomocou merania na laserovom granulometri Horiba a pozorovania snímkov vytvorených technikou TEM. Snímkami bol takisto potvrdený guľový tvar častíc.

Sekce : Procesní a chemické inženýrství 2

Syntéza a charakterizace kompozitních Ag-Fe₃O₄ nanočástic

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

Cílem práce je vytvořit nanočástice s antibakteriálním účinkem. Je známo mnoho baktericidních látek jako TiO₂, ZnO, MgO, měď nebo stříbro. Z uvedených látek má nanokrystalické stříbro a jeho sloučeniny značný inhibiční účinek na činnost bakterií, virů a eukaryotických mikroorganismů. Stříbrný kation brzdí bakteriální vývoj tím, že znemožňuje základní enzymatickou funkci buněk. Interaguje s thiolovou (-SH) skupinou v aminokyselině L-cystein, což způsobuje rozrušení respiračního řetězce bakterie. V této práci je použita metoda přípravy monodisperzních nanočástic stříbra redukcí dusičnanu stříbrného na nanočástice Fe₃O₄, a tím vzniká bimetalická Fe₃O₄-Ag částice. Tyto bifunkční částice mají antibakteriální a současně superparamagnetickou vlastnost. Fe₃O₄-Ag nanočástice jsou syntetizovány dvoukrokovou metodou. Nejdříve jsou syntetizovány nanočástice Fe₃O₄ spojením roztoků FeCl₃ a FeCl₂ a následnou titrací hydroxidem amonným. Fe₃O₄-Ag jsou pak připraveny reversní micelární metodou a následně suspendovány ve vodě pro další použití.

Příprava obřích liposomů metodou elektroformace a studium jejich stability

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

Liposomy jsou částice většinou kulovitého tvaru, které mívají v průměru od desítek nanometrů až po stovky mikrometrů. Jejich stěna je tvořena fosfolipidy, které jsou uspořádány do jedné či více dvojvrstev. Tato permeabilní membrána tvoří odpor proti přestupu hmoty, největší pro polární látky (kromě vody). Proto mohou liposomy uzavírat různé sloučeniny, které se do okolí uvolňují pomalu. Předmětem této práce bylo nalézt vhodnou metodu přípravy liposomů, které v průměru dosahují alespoň 5 μm (tzv. obří liposomy), a to hlavně z důvodu snadné pozorovatelnosti (optická mikroskopie). Porovnávány byly dvě nejobvyklejší metody jejich přípravy – volná hydratace a elektroformace, přičemž druhá jmenovaná byla podrobena dalšímu zkoumání. Základem elektroformace je nabobtnání tenké vysušené vrstvy fosfolipidů pomocí zvoleného roztoku a následné oddělení narostlých částic od této vrstvy. Tento proces je urychlován elektrickým proudem. Studována byla rychlost růstu liposomů v závislosti na čase a také vliv parametrů elektrického pole (napětí, frekvence) na výsledné částice. Do nitra liposomů byl následně uzavírán roztok sacharózy a pomocí změn okolní koncentrace byla otestována jejich stabilita vůči osmotickým výkyvům.

Sekce : Podniková ekonomika a management

Analýza materiálového toku ve výrobě karosérií

Autor: Pavel Bartoš

Ročník: M2

Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu

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

Cílem práce bylo analyzovat tok materiálu ve svařovně karosérií. Konkrétně se jednalo o karosérie pro model Fabia v podniku Škoda auto a.s., kde jsem působil během mé letní praxe a měl jsem zde možnost vidět a poznat systém výroby na té nejvyšší úrovni. Úvodní část projektu je věnována především teorii logistiky (např. systémy řízení výroby, skladovací systémy, vnitropodniková doprava, aj.) a základům průmyslového inženýrství. V praktické části bylo mým úkolem ve spolupráci s oddělením logistiky nejprve projít celý materiálový tok haly svařovny, a to jak výrobní proces (od lisování dílů, přes mezioperační skladování, až po finální kontrolu hotové karoserie), tak proces skladování, a ten následně analyzovat. Cílem analýzy bylo najít úzká či jinak problémová místa v hale, jako např. místa s největší koncentrací dopravy či místa vzniku nadměrných mezioperačních zásob, definovat příčinu vzniku a případně navrhnout řešení problému.

Sekce : Podniková ekonomika a management

Kalkulace výrobních nákladů v chemických podnicích

Autor: Jiří Dušek

Ročník: M2

Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu

Školitel: Ing. Dana Strachotová, Ph.D.

Kalkulace výrobních nákladů tvoří nedílnou součást efektivního řízení výrobních podniků. Kalkulace jsou všeobecně využívány z několika hledisek. Využíváme je pro alokování nákladů k jednotlivým výrobkům, či výrobním skupinám. Celkové náklady pak mohou být využity jako nástroj pro tvorbu cen. Kalkulace můžeme také využít jako nástroj, který nám pomáhá odpovědět na otázku, zda produkce plánovaná do budoucna přinese podniku požadované zisky.

Chemické podniky se vyznačují různorodostí a specifičností chemických procesů v nich probíhajících. Proto je nutné přizpůsobit řízení nákladů daným podmínkám v jednotlivých podnicích.

Cílem této práce je shrnout kalkulační metody využívané chemických podnicích a zaměřit se na možnosti jejich využití. Na teoretickou část práce bude navazovat aplikace a praktické využití kalkulací ve společnosti Lach:ner,s.r.o. se sídlem v Neratovicích.

Sekce : Podniková ekonomika a management

Zavádění finančních benefitů pro zaměstnance

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

Cílem projektu bylo popsat proces zavádění finančních benefitů pro zaměstnance v menších firmách. V českém podnikatelském prostředí se objevila v důsledku úprav v legislativě velmi zajímavá možnost finančně ocenit výkony zaměstnanců. Tato výplata je až do určité částky osvobozena od odvodů na sociálním, zdravotním pojištění a je v celé míře daňově uznatelným nákladem. Výsledkem příspěvků má být tvorba soukromého účtu, kde se zhodnocené finanční rezervy čerpají v době důchodu. Veškerý servis pak zajišťují penzijní fondy nebo pojišťovny. Projekt je tedy zaměřen rovněž na přehled poskytovaných služeb a srovnání jednotlivých společností z hlediska bezpečnosti a zhodnocení.

Informace byly čerpány především ze zázemí společnosti Fincentrum, a.s., která patří v současné době mezi lídry v poskytování služeb v oblasti finančních benefitů. Vyhlašuje každoročně soutěž Zaměstnavatel roku. Mnoho podrobností bylo sesbíráno ze školení a pracovních dokumentů divize zaměstnaneckých výhod, případné dotazy zodpovězeny jejími servisními pracovníky.

Sekce : Podniková ekonomika a management

Navážení GLT k montážní lince pomocí Trailerových souprav

Autor: Zuzana Kubíková
Ročník: M2
Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Miroslav Vágner, MBA. , Ph.D.

Na svém semestrálním projektu jsem pracovala ve Škoda Auto Mladá Boleslav v útvaru závodové logistiky. První dny jsem se seznamovala se svým pracovištěm, s chodem oddělení a pracovníci ze závodové logistiky mě obeznámili s chodem montážní linky modelového vozu Fabia. Procházeli jsme jednotlivé ulice po montážní lince a názorně mi ukázali zavážení a označení jednotlivých dílů.

Cílem práce bylo několikrát projít montážní linku a zkontrolovat díl po dílu, zda je v jejich systému vše zadáno správně. Typ palety, rozměr palet, počet jednotlivých dílů v paletě a umístění na montážní lince. Z celého seznamu jsem vybrala ty díly, které se již pomocí Trailerových souprav zaváží. Všechny ostatní jsem musela znovu přezkoumat a zjistit, zda i tyto díly by nebylo možné navážet pomocí Traileru.

Sekce : Podniková ekonomika a management

Analýza efektivnosti dopravy

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

Doprava patří mezi logistické služby, které významně přispívají k zákaznické spokojenosti. Pokud je produkt k zákazníkovi dovezen v požadovaném čase, množství a kvalitě, dochází k uspokojení požadavku a doprava se stává jedním z článku hodnotového řetězce. Náklady na dopravu mohou tvořit až 30% konečné ceny produktu. Proto je nutné se dopravě v podniku věnovat, neboť kvalitní, spolehlivá a méně nákladná doprava se může stát velkou konkurenční výhodou.

Mlékárna Kunín a.s. si stanovila za cíl, snížit náklady na externí dopravu ve výši 1 000 000 Kč měsíčně. Snížením nákladů na dopravu bylo dosaženo díky tvorbě nového ceníku pro přepravce. Došlo k redukci cen za jednotlivá pásma najetých kilometrů a zároveň byl aplikován systém bonusů za navracené palety.

Cílem mé práce je popsat proces tvorby nového ceníku, od prvotních návrhů, přes výpočty a vyčíslování úspor až po realizaci nového ceníku v praxi. Součástí projektu je vypracování jednoduché analýzy dopravy, zaměřené na efektivitu.

Sekce : Podniková ekonomika a management

Oceňování podniků pro potřeby fúzí a akvizic

Autor: Petr Podola
Ročník: M2
Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Jana Dostálová

Cílem práce bylo provést první zjednodušený odhad hodnoty konkrétního podniku. Na základě dostupných informací z výročních zpráv této společnosti posoudit jednotlivé složky výnosů a nákladů a odhadnout jejich budoucí vývoj, a to z hlediska objemu i ceny. Tento budoucí odhad provést v rámci 15ti let a pokusit se určit zisk či ztrátu v jednotlivých budoucích letech, ten upravit o nepeněžní operace a poté na základě časové hodnoty peněz určit peněžní toky v letech příštích a pomocí metody DCF zjistit hodnotu podniku.

Systém organizačních norem jakosti ve farmaceutickém průmyslu - analýza a restrukturalizace dokumentačního systému

Autor: Jan Škvor
Ročník: M2
Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Doc. Ing. Sláva Balatka, CSc.

Práce je věnována specifické oblasti farmaceutického průmyslu se zaměřením na jakost, jako nástroje pro efektivní plnění všech zákonných i interních standardů

První, rešeršní část práce se zabývá obecným náhledem na jakost ve všech odvětvích průmyslu, způsobem zavádění systému managementu jakosti a odlišnými přístupy, které jsou u takových systémů realizovány. Dále jsou zde popsány zákony a nařízení, vztahující se již konkrétně k farmaceutickému průmyslu.

V druhé části práce byla již využita interní dokumentace farmaceutických společností Zentiva a Sanofi-aventis, pro porovnání celkové struktury dokumentačních systémů těchto dvou společností v oblasti jakosti. Jsou zde rozebrány tři hierarchicky odlišné kategorie dokumentace s popisem jejich účelu a významu z hlediska zabezpečování jakosti. Zároveň jsou zmíněny i shodné a odlišné znaky v přístupech obou společností.

Náplní třetí, praktické části je popis elektronicky řízeného systému dokumentace využívaného pro správu dat ve společnosti Zentiva. Na úvod jsou definovány požadavky analýzy celého systému. Stěžejní část je věnována testu nového klíče pro třídění dokumentů, kdy zadaným úkolem bylo ověřit správnost nastavených parametrů před samotným zavedením do praxe.

Implementace nařízení č. 1272/2008/ES ve Spolku pro chemickou a hutní výrobu, a.s. - přípravná fáze

Autor: Patricie Tesnerová
Ročník: M2
Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Doc. Ing. Jaroslava Hyršlová, Ph.D.

Dne 16. prosince 2008 bylo v Evropské unii přijato Nařízení Evropského parlamentu a Rady (ES) č. 1272/2008 o klasifikaci, označování a balení látek a směsí. Nařízením se upravují a mění podmínky balení chemických látek a přípravků, obsah a rozsah informací uváděných na štítku obalu a zejména systém klasifikace chemických látek a přípravků podle jejich vlastností. Přijetí nařízení, které se zkráceně v Evropské unii nazývá CLP (Classification, Labelling and Packaging) je prvním krokem k zavedení Globálního harmonizovaného systému klasifikace a značení (GHS - Globally Harmonised System). Cílem tohoto systému je sjednotit klasifikaci a značení látek po celém světě a usnadnit tak globální obchod.

Cílem práce ve Spolchemii byla příprava na překlasifikaci látek a směsí. Příprava se týkala zejména návrhu změn SW aplikace, kterou firma využívá pro klasifikaci. Aplikaci bylo nutné přizpůsobit tak, aby po určitou dobu umožňovala klasifikaci jak podle původní, tak podle nové legislativy, a následně umožnila snadný přechod pouze na nový systém klasifikace. Navržené změny byly zpracovány jako instruktáž pro IT oddělení podniku.

Sekce : Podniková ekonomika a management

Model Supply Chain Management ve farmaceutickém průmyslu

Autor: Jan Vajc

Ročník: M2

Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu

Školitel: Ing. Petra Vegnerová

V současném světě, kde dochází ke značné globalizaci trhů a tím i přiosťřování konkurence za současného výrazného nárůstu požadavku zákazníků, je třeba brát řízení firem jako komplexní úlohu. Spotřebitelé neustále vyžadují zvyšující se kvalitu, širší výrobní řady a komplexní služby, a to za co nejnížší cenu. Díky těmto skutečnostem jsou společnosti nuceny ke změně v pojetí řízení podnikových procesů a k hledání nových cest a způsobů, jak se v tomto vysoce konkurenčním prostředí udržet.

Ve světle těchto skutečností vystupuje Supply Chain Management jako způsob procesního řízení dodavatelských řetězců, který přináší další přidanou hodnotu pro zákazníky a tvoří tak možnou další konkurenční výhodu na trhu.

Cílem této práce je na příkladu společnosti Zentiva popsat nejdůležitější činnosti Supply Chain Managementu ve farmaceutické výrobě včetně jejích specifik, propojit je do logického navazujícího řetězce a tím nastínit filosofii tohoto způsobu řízení ve firmě.

Sekce : Marketing

Zmapování a identifikace průmyslových odběratelů tepla z oblasti papírenského a mlékárenského průmyslu ČR

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

Svůj projekt jsem zpracovávala pro německou firmu PROLiGNIS Energie Consulting GmbH & Co, která se specializuje na kompletní servis ve výrobě a prodeji energie z kogeneračních elektráren na biomasu. Společnost se v blízké době chystá vstoupit na český trh. Pro uvedenou firmu jsem zpracovala tržní analýzu odbytového potenciálu zaměřenou na výrobní podniky z oblasti papírenského a mlékárenského průmyslu v ČR

Informace získané z veřejně přístupných zdrojů jsem zpracovala a vyhodnotila pomocí tabulkového procesoru MS Excel. Tyto data se stanou součástí informační databáze firmy PROLiGNIS. Pro zvýšení vypovídací schopnosti zpracovaných dat jsem v prostředí Google Earth vytvořila i grafické znázornění potenciálních odběratelů doplněné o nejzásadnější informace.

Na základě firemního systému hodnocení uvedeného v tabulce jsem za použití interního ratingu provedla analýzu atraktivity podniků. Cílem bylo vytipovat investičně nejzajímavější subjekty z hlediska spotřeby energií a geografické polohy.

Sekce : Marketing

Webové stránky jako jeden z nástrojů marketingové komunikace firmy

Autor: Petra Jandová
Ročník: M2
Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Eva Kemrová

Cílem teoretické části práce je popsat, z jakých pohledů lze analyzovat webové stránky a naznačit, které metody lze pro jejich prověřování použít. V praxi by byli cílovou skupinou tohoto textu spíše manažeři než techničtí pracovníci, práce totiž není ucelenou metodikou, po jejímž přečtení bude člověk sám schopný plnohodnotnou analýzu provést. Místo toho se snaží postihnout některé součásti kvalitního webu a pomoci stanovit priority při návrhu nového i již hotového webu. Práce je rozdělena do větších tematicky vymezených celků postihujících určitý druh kvality webových stránek (použitelnost, přístupnost, optimalizace pro vyhledávače a další. Na rozdíl od programování nebo vytváření informačních systémů pro analýzu webových stránek zatím až na velice specifické výjimky neexistují žádné obecně uznávané metodiky či postupy.

Praktická část práce je zaměřena na webové stránky firmy Smurfit Kappa Czech, kde jsem absolvovala letní odbornou praxi. Firma patří do skupiny Smurfit Kappa Group, která je největším světovým dodavatelem papírových a kartonových obalů v Evropě a Latinské Americe. Zadaný úkol se týkal: „Aktualizace webových stránek firmy Smurfit Kappa Czech“.

Sekce : Marketing

Průzkum energetického hospodářství průmyslových zón v České republice

Autor: Jan Kolářek

Ročník: M2

Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu

Školitel: Ing. Josef Dobrý

Můj projekt, který nese název „Průzkum energetického hospodářství průmyslových zón v České Republice“, byl vypracován na základě zadání společnosti PROLiGNIS Energie Consulting GMBH & CO.KG. Tato společnost se zabývá výstavbou elektráren na obnovitelné zdroje (především elektrárny na spalování biomasy) a následným prodejem elektrické a tepelné energie, kterou elektrárna vyprodukuje. Společnost uvažuje o investicích v České republice, a proto je pro ni důležité analyzovat český trh – především velké společnosti a průmyslové zóny, které by mohly být potenciálním odběratelem vyprodukované energie. Mým úkolem bylo se zaměřit na průzkum průmyslových zón.

Na úvod své práce jsem se snažil vysvětlit zásady marketingového výzkumu a zásady při tvorbě dotazníku a stručně představit společnost PROLiGNIS. V další části jsem se už zabýval analyzováním výsledků, které jsem z průzkumu mohl vyvodit.

Cílem práce bylo zjistit energetické požadavky průmyslových zón v České republice a způsob krytí těchto požadavků. Především jaké mají zdroje energie – zda mají vlastní zdroje nebo je jim energie dodávána externě. Dále jsem se zaměřil na to, zda mají průmyslové zóny v plánu výstavbu zdroje tepelné či elektrické energie. K účelu průzkumu jsem sestavil dotazník.

Sekce : Marketing

Analýza faktorů působících na spotřebu zmrzliny

Autor: Věra Krčková

Ročník: M1

Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu

Školitel: Doc. Ing. Stanislava Grosová, CSc.

Cílem semestrálního projektu bylo analyzovat faktory působící na spotřebu zmrzliny. Při nákupu zmrzliny se u spotřebitele jedná o jednoduchou opakující se činnost, která je individuální a podléhá emocím. Zákazníka ovlivňuje umístění mrazáku se zmrzlinou, uspořádání zmrzliny uvnitř, obal, kvalita a především cena, slevy a další. Také je ovlivněn počasím, zda se chce osvěžit a má na zmrzlinu chuť. Tyto uvedené vlivy tvoří soubor faktorů, na základě kterých se zákazník rozhodne a podle kterých se řídí samozřejmě i výrobci a distributoři. Stěžejním faktorem odbytu impulsní zmrzliny (zmrzliny na dřívku) pro výrobce je právě závislost prodeje zmrzliny na počasí. Toto téma bylo v projektu podrobněji rozpracováno, byly použity údaje od výrobců zmrzlin a jejich odběratelů. Dále v práci byla zjištěna struktura prodeje zmrzlin na českém trhu a podíly hlavních výrobců zmrzlin na trhu jak u rodinných balení zmrzlin, tak u impulsní zmrzliny.

Sekce : Marketing

Identifikace potenciálních odběratelů tepla – pivovary a teplárny

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

Projekt byl zpracován v německé firmě Prolignis. Firma Prolignis se specializuje na komplexní servis, který se skládá z převzetí zakázky, plánování, inženýrství, dodávek dřeva a výroby kogeneračních elektráren. Na základě principu kombinované výroby tepla a elektřiny se snaží zajistit nákladově efektivní výrobu a dodávku energie po celý rok.

Cílem projektu je zmapovat pivovary a teplárny na území České republiky. Tento úkol má být realizován tak, aby co nejlépe pomohl firmě Prolignis při vstupu na český trh. Podkladem pro zpracování tohoto úkolu jsou webové stránky teplárenského sdružení (<http://www.tscr.cz/>) a českého svazu pivovarů a sladoven (<http://www.cspas.cz/>). Úkol je realizován v prostředí program Google Earth, kde je každému pivovaru přiřazena adresa podle jeho polohy a komentář získaných informací. Druhým úkolem je tvorba dotazníku pro podniky pivovarnického odvětví a následná analýza získaných informací.

Sekce : Marketing

Zdroje sekundárních dat v chemickém průmyslu

Autor: Zlata Poláková
Ročník: M2
Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Olga Kutnohorská

Letní praxi jsem vykonávala ve firmě Donauchem Urseta s.r.o., která je přední distribuční firmou s chemikáliemi na průmyslovém trhu. Jelikož mým úkolem bylo najít potenciální odběratele pro několik nově uvedených produktů na trh, většina mé práce spočívala v hledání informací. Shromažďování nejrozličnějších informací patří k jedné z nejdůležitějších fází při hledání nových zákazníků, a tak jsem zaměřila téma svého projektu na sekundární data a jejich zdroje.

Projekt jsem rozdělila do několika kapitol. Jedna část se zabývá teoretickou a druhá část praktickou stránkou věci. Zaměřila jsem se na sekundární zdroje v chemickém průmyslu, proto první kapitola pojednává o chemickém průmyslu jako celku a jeho charakterizaci vzhledem ke klasifikaci ekonomických činností CZ-NACE. Další kapitola pojednává přímo o sekundárních datech, jejich významu, zdrojích a nejčastějším využití. Poslední kapitola je zaměřena na letní praxi, jejíž cílem bylo nalézt nové odběratele pro technickou želatinu a aktivní uhlí.

Sekce : Marketing

Využití skupinových rozhovorů ve výzkumu spotřebního jednání na trhu bramborových výrobků

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

V poslední době neustále roste boj mezi konkurenčními společnostmi na trhu bramborových výrobků. Aby společnost v konkurenčním boji obstála, musí znát důvody, které vedou spotřebitele k nákupu a užívání výrobku, a identifikovat faktory, které toto chování ovlivňují. Cílem této práce je definovat chování konečných spotřebitelů na trhu bramborových výrobků prostřednictvím jedné z technik kvalitativního výzkumu - skupinového rozhovoru. Teoretická část se zabývá obecnou charakteristikou kvalitativního výzkumu a skupinového rozhovoru, v praktické části jsou zpracovány a shrnuty zjištěné primární údaje.

Sekce : Marketing

Marketingový průzkum používání hydrokoloidů na českém trhu

Autor: Julie Talpová
Ročník: M2
Ústav: ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Josef Dobrý

Povinná letní praxi probíhala ve firmě Donauchem Urseta s.r.o., která je významným distributorem chemikálií na průmyslovém trhu. S firmou jsem spolupracovala již během letního semestru v rámci projektu na předmět Marketingový výzkum. V obou případech se jednalo o telefonický marketingový průzkum, který měl firmě pomoci s rozšířením pole odběratelů. Cílem práce bylo zmapovat trh s hydrokoloidy, zjistit odvětví, ve kterých se používají a telefonickým dotazníkem toto ověřit. Konkrétně se jednalo o LBG (karubin), karagenan, pektiny, želatinu a agar. Jelikož jsou to potravinářská zahušťovadla a stabilizátory, byly předem známy oblasti jejich aplikace. Za pomoci internetových vyhledávačů www.seznam.cz a www.kompass.cz byl vypracován seznam kontaktů na potenciální zákazníky zabývající se výrobou polotovarů, směsí koření (pro masný průmysl), lahůdkářstvím a uzenářstvím, mlékárenskou, pekárenskou a cukrářskou výrobou, v menší míře i konzervárny a výroby potravinových doplňků. Následoval telefonický dotazník, který se skládal ze čtyř jednoduchých otázek a byl adresovaný ve většině případů manažerům kvality, případně laborantům či nákupčím. Výsledky byly zpracovány do přehledné tabulky i s jednotlivými odpověďmi a kontakty a dále byly všechny výstupy vyhodnoceny graficky.

Sekce : Inženýrská informatika, měření a řízení procesů

Aplikace různých typů korónových výbojů k dekontaminaci vodní suspenze bakterií

Autor: Lucie Kommová
Ročník: B3
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 několika typů korónových výbojů za atmosférického tlaku ve vzduchu při dekontaminaci vodní suspenze bakterií. Konkrétně se jedná o kladný a záporný stabilizovaný korónový výboj typu hrot proti rovině za různých podmínek, aplikovaný na vodní suspenzi bakterií *Escherichia coli* a *Staphylococcus epidermidis* a kvasinky *Candida albicans*.

Sekce : Inženýrská informatika, měření a řízení procesů

Perzistence baktericidních účinků ve vodě exponované korónovému výboji

Autor: Soňa Kotúčová
Ročník: B2
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 mozgovým 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 mapuje jejich základní časové závislosti na dvou typových bakteriích *Escherichia coli* a *Staphylococcus epidermidis*. Dále práce prezentuje některé pokusy o vysvětlení tohoto fenoménu a nastiňuje možné vysvětlující hypotézy.

Sekce : Inženýrská informatika, měření a řízení procesů

Vliv elektrického pole v okolí vedení velmi vysokého napětí na populaci bakterií

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

V některých odborných publikacích byla nastíněna hypotéza, že špičaté ukončení některých rostlinných částí, jako puky, jehličí nebo hroty listů, může mít částečnou příčinu v přirozeném boji rostlin se škodlivými bakteriemi. Při zvýšené úrovni elektrického náboje v atmosféře, např. před bouřkou, může na těchto špičkách vznikat vysoká intenzita elektrického pole a následně být zažehnut korónový výboj, který má baktericidní účinky. Tato práce si klade za cíl částečně ověřit toto tvrzení a to porovnáním počtu a typů bakterií nacházejících se na špičkách rostlin rostoucích pod vedením velmi vysokého napětí a mimo něj.

Sekce : Inženýrská informatika, měření a řízení procesů

Automatizované rozeznávání textur v biomedicínských obrazech

Autor: Lucie Navrátilová
Ročník: M2
Ústav: počítačové a řídicí techniky
Školitel: Ing. Eva Hošťálková

Glioblastomy jsou rychle rostoucí zhoubné nádory na mozku, které jsou bez včasné léčby smrtelné do několika měsíců. Při prvních příznacích (bolesti hlavy, únava) se pacient vyšetřuje pomocí výpočetní (počítačové) tomografie, která poskytne snímky průřezů vyšetřovanou oblastí. Další metodou, která se používá, je nukleární magnetická rezonance, která získává snímky lepší kvality a je tedy pro stanovení diagnózy praktičtější, ovšem kvůli vyšší ceně se používá obvykle až v případě většího podezření. Lékař musí však v obou případech sám pouhým okem rozeznat, zda je tkáň v pořádku nebo zda v ní může být již zárodek glioblastomu nebo jiného typu nádoru. To ovšem není v počátečních fázích, kdy je největší šance na úspěšnou léčbu, vůbec jednoduché. Při dalším vyšetření o několik týdnů později pak již může být na léčbu pozdě.

Práce se snaží nalézt metodu, která by lékařům vyšetřování ulehčila. Budu vyšetřovat obraz jak v časové oblasti, tak i koeficienty diskrétní wavelet transformace, k analýze použiji koeficient šikmosti jako statistickou charakteristiku obrazu. Ze snímku tedy extrahuji vlastností jednotlivých regionů a nasegmentuji jej pomocí umělé neuronové sítě.

Práce dále obsahuje matematický popis použitých metod, vč. diskrétní wavelet transformace.

Sekce : Inženýrská informatika, měření a řízení procesů

Detekce hran v medicínských obrazech s použitím wavelet transformace

Autor: Jana Petrová
Ročník: M2
Ústav: počítačové a řídicí techniky
Školitel: Ing. Eva Hošťálková

Zpracování biomedicínských obrazů je důležitou součástí identifikace řady nemocí a snahou moderní vědy je tuto identifikaci co nejvíce usnadnit a zpřesnit.

Cílem této práce je detekce hran v medicínských obrazech s použitím gradientních masek, Cannyho hranového detektoru a zejména wavelet transformace, včetně analýzy vlivu přítomnosti šumu a obrazových textur na tyto metody. Hrany analyzujeme pomocí diskrétní wavelet transformace tak, že obraz pomocí wavelet transformace zrekonstruujeme při zachování detailních informací z obrazu odpovídajících vyšším frekvencím, tj. hranám, a vynulování aproximačních koeficientů odpovídajících nízkým frekvencím.

Detekce hran slouží k vizuálnímu vylepšení obrazu nebo jako předzpracování pro segmentaci obrazu a automatické rozeznávání jejich obsahu.

Práce zahrnuje popis a aplikaci filtrů používaných pro vyhlazování průběhu intenzity obrazu, filtrů aproximující gradient intenzity obrazu a popis principu Cannyho hranového detektoru. Hlavní důraz je kladen na matematický popis wavelet transformace včetně popisu jejích vlastností a aplikací ve zpracování obrazů a použití výše popsanych metod pro detekci hran nejprve v testovacích a posléze i v medicínských obrazech.

Sekce : Inženýrská informatika, měření a řízení procesů

Alternatívne zdroje energie a ich využitie v domácnosti

Autor: Bc. Lukáš Rusyniak
Ročník: M2
Ústav: fyziky a měřicí techniky
Školitel: Doc. Ing. Dr. Martin Vršata

Táto práca pojednáva o vybraných zdrojoch alternatívnej energie a ich využití v domácnosti. Ako alternatívne zdroje som zvolil solárne panely, fotovoltaičné panely, veternú energiu, vodnú energiu a tepelné čerpadla. V teoretickej časti je popísaný princíp výroby vybraných druhov energie vrátane popisu zariadení, kde sa energia vyrába. Pri každom zariadení budú špecifické podmienky použitia, parametre a vlastnosti. V praktickej časti práca pojednáva o konkrétnom riešení jednotlivých zdrojov na modelovom príklade. Ako model som zvolil rodinu so štyrmi členmi, ktorá býva v rodinnom dome o výmere okolo 100 m². Ich spotreba vody a energií bude priemerná vzhľadom ku celkovej českej populácii. Budú tu vyhodnotené charakteristiky ako je výkon, účinnosť, náklady na nákup, dostupnosť energie, pomer cena/výkon a ekonomické ukazovatele ako je napríklad návratnosť investície. V závere práce bude kompletný návrh domu vrátane vybraných zdrojov alternatívnej energie.