

Seznam sekcí a složení komisí

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

Komise:

Předseda: Prof. RNDr. Petr Voňka, CSc.

Členové: Ing. Lubomír Hnědkovský, CSc.
Ing. Štěpán Hovorka, CSc.

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

Komise:

Předseda: Prof. Ing. Anatol Malijevský, CSc.

Členové: RNDr. Dana Nachtigallová, Ph.D.
Ing. Michal Bureš, CSc.

Sekce: **Analytická chemie (přednášková)**
posluchárna A105, 8.30 hod

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Oto Mestek, CSc

Členové: Ing. Gabriela Broncová, Ph.D.
prom. fyz. Jan Fährnich, CSc.
Ing. Radka Pataridu, Ph.D.

Sekce: **Matematické modelování a informatika (přednášková)**
posluchárna B139, 9.00 hod

Komise:

Předseda: Prof. Ing. Egon Eckert, CSc.

Členové: RNDr. Miroslava Dubcová, Ph.D.
Ing. Lubor Buřič
Ing.Otto Hadač

Sekce: **Procesní inženýrství a měřicí technika (přednášková)**
Knihovna ÚCHI, 9.00 hod.

Komise:

Předseda: Doc. RNDr. Tomáš Vaněk, CSc.

Členové: Doc. Ing. Vladimír Václavek, CSc.
Ing. Filip Vysloužil, Ph.D.
Ing. Libor Šeda

Sekce: **Chemické inženýrství, biotechnologie a experimenty (přednášková)**
posluchárna B03, 9.00 hod

Komise:

Předseda: Doc. Ing.Dalimil Šnita, CSc.

Členové: Ing. František Hovorka, CSc.
Ing .Michal Kordač, Ph.D
Ing. Walter Schrott

Sekce: **Management podnikových procesů (přednášková)**
posluchárna C11, 9.00 hod

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Stanislava Grosová, CSc

Členové: Mgr. Ing. Marek Botek, Ph.D.

Ing. Dana Strachotová, Ph.D.

Ing. Olga Kutnohorská

Sekce: **Logistické řízení podniku (přednášková)**
posluchárna C14, 9.00 hod

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Sláva Balatka, CSc.

Členové: Ing. Pavel Hradecký, Ph.D.

Ing. Petra Vegnerová

Ing. Veronika Nolčová

Sekce: Aplikovaná fyzikální chemie

Teplotní závislost limitních aktivních koeficientů 2-propanonu ve vodě

Autor: Aleš Blahut
Ročník: 1. navazující magisterské
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Ing. D. Fenclová, CSc.

Cílem práce bylo stanovení teplotní závislosti limitních aktivních koeficientů 2-propanonu ve vodě v intervalu 273-373 K. Za tímto účelem byla provedena měření při 5 teplotách v intervalu 60-100°C modifikovanou metodou Phase Ratio Variation (PRV). Naměřené limitní aktivní koeficienty spolu s již dříve v naší laboratoři stanovenými údaji (0-50°C) byly simultánně korelovány s literárními aktivními koeficienty, parciálními molárními dodatkovými enthalpiemi a parciálními molárními dodatkovými tepelnými kapacitami v nekonečném zředění. Výsledkem jsou doporučené parametry korelační rovnice vystihující závislost limitních aktivních koeficientů na teplotě od teploty tání až po normální teplotu varu vody.

Sekce: Aplikovaná fyzikální chemie

Stanovení sorpce toluenu a n-heptanu v polyimidových polymerech s různou příměsí polyethylenglykolu

Autor: Barbora Černochová
Ročník: 1. navazující magisterské
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Ing. Karel Friess, Ph.D., Ing. Vladimír Hynek, CSc.

Pomocí gravimetrické metody byly studovány sorpční vlastnosti čtyř kopolymerních membrán připravených na bázi polyimidu s různou příměsí polyethylenglykolu. Experimentálně byly stanoveny rovnovážné hodnoty sorpce par n-heptanu a toluenu a na základě sledování kinetiky sorpce látek v polymerních membránách byly vypočteny a porovnány difuzní a sorpční koeficienty studovaných látek. Bylo zjištěno, že přidavek polyethylenglykolu v polyimidové membráně zvyšoval sorpci toluenu a n-heptanu.

Sekce: Aplikovaná fyzikální chemie

Fotokatalytický rozklad škodlivin ve vodném prostředí na membránách s vrstvou TiO₂

Autor: Václav Frýdl
Ročník: 1. navazující magisterské
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Ing. Vladimír Hynek, CSc.

V této práci byla řešena problematika fotokatalytické membránové degradace kyseliny šťavelové. Byly testovány membrány potažené vrstvou oxidu titaničitého. Byly použity membrány dvou typů: ze skleněných vláken nebo nerezová síta. Byly zkoumány vlivy některých parametrů měření: teplota, směr toku roztoku kyseliny šťavelové, průtok roztoku kyseliny šťavelové, průtok kyslíku a vliv vlnové délky použitého osvětlení. Bylo zjištěno, že největší vliv na rychlost degradace kyseliny šťavelové má vlnová délka použitého světla. Jako lepší se ukázala být nerezová síta, neboť vykazovala větší rychlost degradace kyseliny šťavelové a také vykazovala lepší mechanickou odolnost a lepší časovou stálost fotokatalytické vrstvy.

Sekce: Aplikovaná fyzikální chemie

Určení povrchového napětí na základě parametrů digitalizovaného profilu visící kapky

Autor: Magda Poloncarzová
Ročník: 5.
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Ing. Štěpán Hovorka, Ph.D.

Předkládaná práce popisuje konstrukční úpravy a následné testování druhé verze aparatury vlastní konstrukce pro stanovení povrchového napětí na základě analýzy profilu visící a přisedlé kapky. Při použití této metody je na ústí injekční jehly nebo na pevné podložce utvářena kapka kapaliny a její obraz je přes mikroskop snímán fotoaparátem, digitalizován a za použití Laplaceovy rovnice vyhodnocován počítačem. Největší konstrukční úpravou bylo zabudování termostatované cely vyrobené podle vlastního návrhu. V práci je dále rozebrán rozdíl mezi měřením s visící a přisedlou kapkou. Aparatura byla použita i pro měření smáčecích úhlů, kdy pro tento účel byla navržena a postavena vyhřívaná pracovní podložka.

Sekce: Aplikovaná fyzikální chemie

Gravimetrická odpařovací metoda pro stanovení rozpustnosti iontových kapalin ve vodě

Autor: Martin Strejc
Ročník: 3.
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Ing. Karel Řehák, CSc.

Kvantitativní znalost mísitelnosti nových materiálů – iontových kapalin s vodou je důležitá pro další potenciální využití těchto materiálů v praxi i pro jejich další výzkum. Vzhledem k povaze iontových kapalin je měření jejich rozpustnosti ve vodě ztíženo. Iontové kapaliny mají například zanedbatelný tlak nasycených par, což vylučuje použití plynového chromatografu.

V práci je demonstrována jednoduchá metoda stanovení rozpustnosti iontových kapalin ve vodě, která je založena na vážení kapalných vzorků a na odpaření těkavé složky (vody). Tato metoda byla otestována měřením rozpustnosti 1-butyl-3-methylimidazolium hexafluorofosfátu ve vodě. Aplikací zákona šíření chyb byly odvozeny vztahy pro výpočet směrodatné odchylky hmotnostního zlomku, který vyjadřuje rozpustnost kapaliny ve vodě. Výsledná nejistota měření naznačuje, že metoda může poskytovat výsledky s dobrou přesností.

Sekce: Aplikovaná fyzikální chemie

Porovnání dynamických polytermních metod měření rovnováhy pevná fáze-kapalina

Autor: Jiří Zapletal
Ročník: 1. navazující magisterské
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Ing. Ivona Malíjevska, CSc.

Obsahem této práce byla příprava měření fázových rovnováh kapalina-pevná fáze pro malé vzorky. Měření byla prováděna v pozorovacím termostatu. Porovnávány byly dva způsoby měření, optická metoda měření intenzity rozptýleného světla a metoda měření křivek tání. Dále byly srovnávány dva typy měřicích cel, cela bez vzduchového pláště a cela se vzduchovým pláštěm. Bylo provedeno celkem 16 měření systémů organických látek, v jejichž důsledku jsme dospěli k závěru, že vhodnější metodou je dynamická metoda měření křivek tání a k měření se více hodí cela bez vzduchového pláště.

Sekce: Aplikovaná fyzikální chemie

Vliv rozpuštěných solí na limitní aktivitní koeficient methyl *t*-butyl etheru ve vodě

Autor: Kateřina Zemánková
Ročník: 3.
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Dr. Ing. Pavel Vrbka, Doc. Ing. Vladimír Dohnal, CSc.

V práci jsou prezentovány výsledky stanovení limitního aktivitního koeficientu methyl *t*-butyl etheru (MTBE) ve vodě s přidavkem anorganické soli.

Ke stanovení byla vybrána saturační metoda (IGS), jejíž použitelnost byla ověřena měřením s roztoky Na₂SO₄, který podle literatury vykazuje zvláště silný vliv na hodnotu limitního aktivitního koeficientu VOC ve vodě.

K systematickému zkoumání byla vybrána skupina látek (NaCl, KCl, MgCl₂, MgSO₄ a CaCl₂), které představují nejdůležitější soli obsažené v mořské vodě. Měření byla prováděna při teplotě 298,15 K a při obsahu soli 0,6 a 1 mol/kg. Ze závislosti limitního aktivitního koeficientu MTBE na koncentraci soli ve vodě byly vyhodnoceny konstanty Sečenovovy rovnice.

Sekce: Teoretická fyzikální chemie

Studium polohy fluorescenčních značek v lipidové dvojvrstvě

Autor: Michal Kocourek
Ročník: 1. navazující magisterské
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: RNDr. Petr Slaviček, Ph.D.

Lipidová dvojvrstva představuje významný prvek biologických systémů. Mnoho důležitých metabolických procesů v buňce, jako je fotosyntéza a buněčné dýchání, je úzce spjato s touto strukturou. Nově byla studována solvatační dynamika v lipidových dvojvrstevách experimentální skupinou doc. Martina Hofa (Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR). Metodou Time resolved emission spectroscopy (TRES) byly zaznamenány emisní spektra *n*-AS (*n*-AP) fluorescenčních značek umístěných v dvojvrstvě. *n*-AS (*n*-AP) značky jsou tvořeny stearovou (palmitovou) kyselinou s 9-antroyloxy fluoroforem kovalentně navázaným na uhlíkatém řetězci. Na základě získaných spekter bylo usuzováno na hydrataci jednotlivých částí dvojvrstvy.

Předkládaná práce má za úkol prozkoumat vlastnosti fázového rozhraní hexan-voda a popsat chování *n*-AS značek na tomto rozhraní, zejména jejich orientaci a polohu. Systém hexan-voda je vybrán jako modelový systém hydrofobní-hydrofilní látky, jehož vlastnosti mohou být využity k interpretaci některých jevů v budoucnu modelované lipidové dvojvrstvě. Ke studiu je využito nástrojů teoretické chemie, zejména molekulové dynamiky.

Sekce: Teoretická fyzikální chemie

Vliv monovrstvy hexadekan-1-olu a oktan-1-olu na povrchové napětí a odpařování vody

Autor: Karel Matas
Ročník: 1. navazující magisterské
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Doc. RNDr. Jiří Kolafa, CSc.

Pokrytí vodní hladiny monovrstvou vyšších alkoholů je jednou z metod omezení výparu vody z vodních nádrží v suchých oblastech. Provedl jsem sérii simulací systémů obsahujících vodu a hexadekan-1-ol (cetyl alkohol, komerčně používaný) a oktan-1-ol (kapryl alkohol, referenční systém) metodou molekulární dynamiky ve "slab" geometrii. Sledoval jsem vliv pokrytí vodní hladiny (v rozsahu 0,2 až 0,8 nm² na molekulu alkoholu) i teploty (300 a 320 K) na rychlost odpařování vody, povrchové napětí a strukturu (úhel sklonu molekul v povrchové vrstvě). K simulaci jsem použil SPC model vody a TraPPE-UA model alkoholů. Výsledky pro povrchové napětí a strukturu jsou v dobré shodě s experimenty, výsledky pro rychlost výparu v kvalitativní shodě.

Sekce: Teoretická fyzikální chemie

Fotochemie halogenvodíku na povrchu ledových nanočástic

Autor: Milan Ončák
Ročník: 5.
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: RNDr. Petr Slaviček, PhD.

Acidická disociace halogenvodíku ve vodě je jednou ze základních chemických reakcí a přes obrovské úsilí věnované jejímu pochopení zůstávají detaily disociačního mechanismu stále do určité míry nejisté. Nově byla tato reakce zkoumána pomocí fotodisociačního experimentu v molekulových paprscích v laboratoři dr. Michala Fárníka v Ústavu fyzikální chemie Jaroslava Heyrovského. Na nanoklastry ledu o průměrném složení (H₂O)₅₀₀ a teplotě 110 K byla umístěna molekula HX a systém byl poté excitován laserem o vlnové délce 193 nm. Následně byla měřena kinetická energie disociujících atomů vodíku.

Předkládaná práce si klade za úkol prozkoumat fotochemii halogenvodíku HX (X = F, Cl, Br) na klastrech ledu pomocí nástrojů teoretické chemie. Molekuly v základním stavu byly popsány metodami kvantové chemie, elektronové spektrum bylo počítáno za využití reflexního principu vzorkováním Wignerovy transformace vibrační vlnové funkce základního stavu. Excitované stavy byly zkoumány ab initio kvantovou molekulovou dynamikou metodou Full Multiple Spawning.

Na základě dosažených výsledků je možno interpretovat experiment. V základním stavu dochází k acidické disociaci, která indukuje silnou absorpci v oblasti kolem 193 nm díky červenému posunu elektronového spektra. Při excitaci dochází k přenosu elektronu z X⁻ na molekulu rozpouštědla a vytváří se metastabilní radikál H₃O, který následně disociuje na vodík.

V práci jsou diskutovány možné důsledky pro tvorbu ozónové díry v polární stratosféře.

Sekce: Teoretická fyzikální chemie

Ab initio studium iontových kapalin a jejich solvatace

Autor: Lukáš Šišťík
Ročník: 1. navazující magisterské
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: RNDr. Petr Slaviček, Ph.D.

Iontové kapaliny v posledních letech nabývají na významu v mnohých odvětvích chemického průmyslu a výzkumu. Avšak získávání experimentálních údajů o iontových kapalinách je mnohdy velmi obtížné a nákladné. Proto se využívají nástroje kvantové chemie a molekulární dynamiky k získání nedostupných údajů.

Zabývali jsme se výpočtem základních vlastností několik vybraných molekul vytvářejících iontové kapaliny. Konkrétně geometrií řady konformací, vibračními frekvencemi, náboji na atomech, dipólovými momenty, elektrostatickými potenciály a polarizovatelnostmi. Tyto údaje poslouží k tvorbě silového pole a získání základních chemických a fyzikálních vlastností. Výpočet základních vlastností k tvorbě kvalitního silového pole nepostačuje. Studujeme proto mezimolekulární interakce mezi samotnými molekulami iontových kapalin a interakce s vodou. Pomocí těchto výsledků budeme testovat kvalitu silového pole a případně je upravovat. Chceme také studovat chování velkých klastrů molekul vytvářejících iontové kapaliny, abychom poznali původ sil, které zapříčiňují unikátní fyzikálně chemické vlastnosti této rodiny látek. Z toho důvodu nyní testujeme lokálně korelované metody na bázi „density fitting“, které umožňují kvalitní studium velkých molekulových systémů.

Sekce: Teoretická fyzikální chemie

Vyšší viriální koeficienty prostupných koulí

Autor: Linda Viererblová
Ročník: 1. navazující magisterské
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Prof. Ing. Anatol Malijevský, CSc., Doc. RNDr. Jiří Kolafa, CSc.

Práce spadá do oboru statistické termodynamiky tekutin. Zabývá se výpočtem viriálních koeficientů pro model prostupných (anglicky penetrable) koulí. Pomocí počítačových simulací byly vypočteny viriální koeficienty od třetího do osmého a určena jejich závislost na teplotě. Nižší viriální koeficienty je možné určit analyticky, výpočet pro ně sloužil k ověření použitého algoritmu. Výpočty vyšších viriálních koeficientů jsou zcela nové.

Sekce: Teoretická fyzikální chemie

Aplikace Laplaceovy transformace na difusní rovnice

Autor: Miroslav Zgažar

Ročník: 5.

Ústav: fyzikální chemie

Školitel: Doc. Ing. Milan Šípek, CSc., Ing. Vladimír Hynek, CSc., RNDr. Miroslava Dubcová, PhD.

Prioritním cílem této práce je ukázat postup, jakým byla získána rovnice difusního toku izotropní plochou, která je rovněž publikována v mnoha pracích, avšak bez jakékoli dedukce. Tímto se také nabízí pohled na aplikaci Laplaceovy transformace v mnoha obecnějších případech. A v neposlední řadě bude ukázána užitečnost tohoto vztahu z experimentálního hlediska při vyčíslení difusního koeficientu oxidu uhličitého v polyethylenové membráně.

Sekce: Analytická chemie

Využití shlukové analýzy při vyhodnocování FT Ramanových spekter jehličí vystaveného simulovanému slunečnímu záření

Autor: Zuzana Cieslarová
Ročník: 2.
Ústav: analytické chemie
Školitel: Doc. Dr. RNDr. Pavel Matějka

Shluková analýza je vícerozměrná statistická metoda, jejíž cílem je v dané množině objektů nalézt její podmnožiny – shluky objektů – tak, aby si členové shluku byli navzájem podobní, ale nebyli si příliš podobní s objekty mimo tento shluk. Metoda tak umožňuje analyzovat vzájemné podobnosti resp. odlišnosti spekter získaných v sériích experimentů. V této práci byla studována možnost využití této metody při analýze FT Ramanových spekter jehličí.

Pomocí slunečního simulátoru (Oriel) bylo v různých časových intervalech ozařováno jehličí smrku ztepilého a jedle bělokoré. Před a po každém osvitu byla měřena FT Ramanova spektra excitovaná Nd-YAG laserem při vlnové délce 1064 nm. Vlivem osvitu docházelo k určitému zvyšování teploty v okolí jehlice a na jejím povrchu, a zároveň i k malým chemickým změnám, které se projevovaly změnami v FT Ramanových spektrech. Spektra byla vyhodnocována pomocí shlukové analýzy. Testován byl výběr spektrálního intervalu a vliv různých algoritmů pro konstrukci dendrogramů. Analyzována byla jak původní měřená spektra, tak i spektra po předchozím matematickém zpracování.

Sekce: Analytická chemie

Příprava SERS – aktivního měděného povrchu

Autor: Alžběta Kokaislová
Ročník: 2.
Ústav: analytické chemie
Školitel: Ing. Martin Člupek

Spektroskopie povrchově zesíleného Ramanova rozptylu (surface enhanced Raman scattering - SERS – spectroscopy) je analytická metoda využívající zvýšení intenzity signálů při Ramanově rozptylu, ke které dochází při působení elektromagnetického záření na povrch částic, resp. na nanostruktury vybraných kovů (SERS – aktivní substrát), v jehož blízkosti se nacházejí molekuly, které lze detekovat Ramanovou spektroskopií. Pro zvýšení intenzity signálu je třeba, aby kovový substrát měl vhodnou morfologii v nanoměřítku. Existuje řada způsobů přípravy SERS – aktivních systémů. Jedním z nich je elektrolytické vyloučení kovové vrstvy na povrchu katody.

Cílem mé práce bylo nalézt optimální postup, který povede k vyloučení SERS – aktivní Cu vrstvy z roztoku síranu měďnatého na povrchu platinového terčíku. Pro testování SERS aktivity byly vybrány thiolové deriváty alifatických karboxylových kyselin, již dříve používané u SERS – aktivních Au a Ag vrstev. Získávaná spektra lze srovnat s předchozími výsledky získanými na SERS – aktivních Au a Ag površích.

Předpokládá se, že SERS – aktivní Cu – povrchy budou sloužit ke stejnému účelu jako Au a Ag povrchy, tj. například k ukotvení specifických receptorů pro některé látky (např. pro sacharidy).

Sekce: Analytická chemie

Ověření koncentrace standardního roztoku Cu

Autor: Kateřina Mališová
Ročník: 3.
Ústav: analytické chemie
Školitel: Doc. Ing. Oto Mestek, CSc.

U srovnávacích analytických metod se používají kalibrační roztoky připravené ředěním jednoprvkových základních roztoků (standardních roztoků). Tyto roztoky se mohou připravit rozpouštěním čistých látek anebo zakoupit. Některé mohou mít i statut CRM. Jelikož neexistují žádné národní etalony chemických sloučenin a prvků, standardní roztoky by měly být navázány na jednotku mol pomocí primárních metod měření a nebo by měly být navázány na roztoky připravené obecně uznávanou metrologickou laboratoří.

Předmětem této práce bylo ověření komerčně dostupného standardního roztoku Cu o koncentraci $1\,000 \pm 2$ mg/l pomocí primárních metod měření (gravimetrie, izotopové zředování) a pomocí srovnání s primárním roztokem NIST. Součástí ověření byl i výpočet nejistoty koncentrace roztoku.

Sekce: Analytická chemie

Studium vlivu redukčního prostředí a korozních produktů při migraci radionuklidu ^{99}Tc

Autor: Marcela Ožanová
Ročník: 5.
Ústav: analytické chemie
Školitel: Ing. H. Vinšová, Ph.D.

Technecium se obecně může vyskytovat v různých valenčních stavech, od -1 až po +7. Vznik jednotlivých chemických forem technecia závisí na oxidačně-redukčních podmínkách systému, zejména na pH a Eh vodného roztoku. Nejstabilnějším valenčním stavem technecia za oxidačních podmínek je Tc(VII), které se vyskytuje v podobě mobilního technecistanového aniontu. Oproti tomu, oxid-hydroxid technecia Tc(IV), který vzniká za redukčních podmínek, je velmi málo rozpustný a tudíž nedochází k migraci radionuklidu ^{99}Tc do geosféry a hydrosféry.

Předkládaná práce byla zaměřena na studium vlivu trvalého redukčního prostředí při migraci radionuklidu ^{99}Tc ve formě technecistanového aniontu z hlediska výskytu jednotlivých chemických forem technecia. Byl sledován vliv sloučenin železa v různých valenčních stavech na migraci a výskyt chemických forem radionuklidu ^{99}Tc . Jedná se o modelující korozní produkty ocelového kontejneru a sloučeniny s redukčními vlastnostmi vyskytující se v minoritním množství v poli blízkých interakcí hlubinného úložiště radioaktivního odpadu. Kapilární elektroforéza s DAD byla použita pro stanovení koncentrace technecistanového aniontu a studium chemických forem technecia. Testované systémy byly charakterizovány na základě detailní analýzy pevné a kapalně fáze.

Sekce: Analytická chemie

Vibračně spektroskopické studium vlivu simulovaného slunečního záření na vzorky jehličí

Autor: Stanislava Procházková
Ročník: 5.
Ústav: analytické chemie
Školitel: Doc. Dr. RNDr. Pavel Matějka

FT-Ramanova spektroskopie je užitečnou technikou pro nedestruktivní analýzu čerstvých rostlinných pletiv, tj. nezpůsobuje jejich mechanický, chemický, fotochemický ani termální rozklad. Vzorky mohou být analyzovány při teplotě a tlaku okolí bez jakékoliv úpravy. Metoda je vhodná pro sledování karotenoidů, jejichž nejčastějšími zástupci jsou α -, β -karoten a lutein. Jednotlivé jehlice lze měřit i IR spektroskopií s využitím techniky ATR. V těchto spektrech jsou výraznější pásy vosků.

Předkládaná práce popisuje dva experimenty. V prvním byl opakovaně ozařován semenáček smrku ztepilého a jedle bělokoré, a poté měřena Ramanova spektra. Po skončení každého ozařování byla odebrána jehlice a změřena pomocí ATR IR spektroskopie. Ve druhém experimentu byla získána Ramanova spektra semenáčku jedle, u něhož se na rozdíl od prvního experimentu doba ozařování slunečním simulátorem prodlužovala. V průběhu ozařování a měření všech Ramanových spekter byla snímána teplota jehlice polovodičovým senzorem.

Pro jehlice byly především sledovány změny intenzit pásů karotenoidů způsobené ozařováním v obou typech spekter. K vyhodnocení spekter byla použita metoda analýzy hlavních komponent (PCA).

Sekce: Analytická chemie

Iontové kapaliny a jejich hydrofobicita

Autor: Jakub Rak
Ročník: 4.
Ústav: analytické chemie
Školitel: Ing. Marcela Tkadlecová, CSc.

Iontové kapaliny jsou látky obsahující organický kation a anorganický anion, avšak na rozdíl od ryze anorganických solí mají bod tání nižší než 100°C a liší se i mnoha fyzikálně-chemickými vlastnostmi. Významnou podskupinou jsou iontové kapaliny s teplotou tání nižší než laboratorní teplota. Jejich teplotní stabilita, netěkavost, nehořlavost a především dobrá schopnost rozpouštět většinu anorganických i organických sloučenin z nich dělá konkurenty běžných organických rozpouštědel a díky svým ekotoxikologickým vlastnostem jsou často označovány jako tzv. „green solvents“. Další využití mají jako extrakční činidla, mobilní a stacionární fáze v chromatografických kolonách či v elektrochemii.

Vlastnosti iontových kapalin jsou dány kombinací kationtů a aniontů a počet kombinací byl odhadnut řádově na miliony. Vytipování vhodných iontových kapalin pro konkrétní aplikace ovšem vyžaduje znalost jejich vlastností či schopnost vlastnosti predikovat. Tato práce se zabývá studiem hydrofobicity iontových kapalin s kationtem na bázi imidazolia. Experimentální část se opírá především o NMR spektroskopii, teoretická o kvantově mechanické výpočty.

Sekce: Analytická chemie

Studium komplexace radioimunokonjugátu 90Y - (p-SCN-Bn-DOTA) - IgG pomocí TLC

Autor: Iva Tošnerová
Ročník: 5.
Ústav: analytické chemie
Školitel: Ing. Radka Pataridu, Ph.D.

Radiofarmaka jsou léčiva, která poskytují informace o kinetice, orgánové distribuci, metabolismu a vylučování aplikovaných sloučenin z lidského těla. Jsou využívána v nukleární medicíně jako terapeutika a diagnostika.

V této studii byl imunokonjugát IgG a p-SCN-Bn-DOTA značen radionuklidem ^{90}Y . Jedná se o krátkodobý beta zářič, který je možné využít v terapii nádorových onemocnění. Byla nalezena vhodná metoda TLC využívající jako stacionární fázi desku Gelman ITLC-SG a jako mobilní fázi 0,1M chelaton III, která umožňuje stanovit podíl ^{90}Y vázaného na studovaný imunokonjugát a tím i radiochemický výtěžek značení. K vyhodnocení aktivity byla použita radiometrická detekce. Cílem práce bylo danou technikou TLC definovat optimální podmínky pro přípravu radioimunokonjugátu ^{90}Y - (p-SCN-Bn-DOTA) - IgG. Použitý ligand ani kov by neměl být pacientovi aplikován v nadbytku, který by zbytečně zatěžoval organismus, a zároveň je požadován co největší radiochemický výtěžek značení. Byl sledován vliv pH, koncentrace kovu a reakční doby na výsledek komplexace. Za nalezených optimálních podmínek byl dosažen maximální radiochemický výtěžek 37,2 %.

Sekce: Analytická chemie

Interakce nukleotidů s porfyrin-guanosinovým derivátem v přítomnosti zlatých nanočástic ve vodném prostředí

Autor: Lenka Veverková
Ročník: 5.
Ústav: analytické chemie
Školitel: Ing. Kamil Záruba, Ph.D.

V této práci byly sledovány interakce nukleotid-5'-monofosfátů s porfyrin-guanosinovým derivátem ve vodném prostředí a sledován byl vliv přítomnosti nanočástic zlata na tyto interakce. Použití nanočástic přináší do systému nukleotid-porfyrinový derivát možnost preorganizace porfyrinového derivátu, který je vázán na jejich povrchu. V případě porfyrinového derivátu, použitého v této práci, se jednalo o vazbu koordinační.

Interakce byly sledovány metodou absorpční spektroskopie ve viditelné oblasti spektra jako změny absorpčního maxima porfyrinového derivátu a absorpčního maxima nanočástic (byly-li přítomny). Byla sledována především závislost velikosti těchto interakcí na pH roztoku, které bylo nastaveno pomocí různých pufrů.

Sekce: Analytická chemie

Stanovení stopových prvků a fosforu v pšenici

Autor: Eva Žáčková
Ročník: 5.
Ústav: analytické chemie
Školitel: Doc. Ing. Oto Mestek, CSc.

Stanovovalo se množství stopových prvků (Ag, As, Cd, Cu, , Fe, Mn, Mo, Ni, Zn) a fosforu v různých částech rostlin pšenice odebraných v různých vývojových stádiích. Analyzovanými vzorky byly zelené rostliny odebrané v květnu, stvolý + listy a nezralé klasy odebrané v červnu a nakonec zrní a sláma odebraná v červenci. Analýzy byly provedeny metodami ICP-MS pro rozklad vzorků v mikrovlnném rozkladném zařízení. Dalším krokem studie bylo stanovení podílu prvků extrahovatelných do pufru 0,02 mol/l Tris-HCl o pH = 7,5 a frakcionace specií v tomto extraktu metodou on-line spojení ICP-MS a SEC. Jednotlivé vzorky byly porovnávány jak z hlediska celkového a extrahovatelného obsahu prvků, tak z hlediska zastoupení frakcí specií o různé molární hmotnosti a podílu prvků vázaného v iontové formě.

Sekce: Analytická chemie

Sledování způsobu vazby modelových látek na nanočástice stříbra

Autor: Bc. Pavel Žvátora
Ročník: 1. navazující magisterské
Ústav: analytická chemie
Školitel: prof. RNDr. Vladimír Král, DrSc.

Přímá imobilizace analyticky užitečných receptorů na povrchu nanočástic často není možná, protože neobsahují vhodné funkční skupiny. Proto je nutná předřazená povrchová modifikace multifunkčními spacery. Jedna funkční skupina je využita pro vazbu na povrch, zatímco další, prostorově volná umožní v druhé vrstvě imobilizaci požadovaného receptoru. Cílem této práce bylo studium modifikace nanočástic stříbra látkami s různými funkčními skupinami tak, aby při následné modifikaci bylo zřejmé, za jakých podmínek se daná funkční skupina váže nebo s povrchem neinteraguje.

Nanočástice stříbra byly připraveny redukcí dusičnanu stříbrného různými redukčními činidly (citrát sodný, EDTA, tetrahydridoboritan sodný a síran železnatý) a charakterizovány transmisí elektronovou mikroskopií a absorpční spektroskopií ve viditelné oblasti spektra. Modelové látky byly na povrch nanočástic imobilizovány přes kyslík, dusík a síru a modifikace nanočástic probíhaly za různých podmínek (koncentrace, pH). Imobilizace byla studována spektroskopií povrchem zesíleného Ramanova rozptylu a absorpční spektroskopií ve viditelné oblasti spektra. K interpretaci Ramanových spekter byla využita spektra modelovaná ab initio výpočty.

Sekce: Matematické modelování a informatika

Filippovovy dynamické systémy

Autor: Martin Biák
Ročník: 5.
Ústav: matematiky
Školitel: Doc. RNDr. Drahoslava Janovská, CSc.

Rovinné, po částech hladké dynamické systémy s nespojitým vektorovým polem, tzv. Filippovovy dynamické systémy, se vyznačují speciálním typem bifurkací, tzv. klouzavými bifurkacemi. Tyto bifurkace vznikají na hranici nespojitosti dvou vektorových polí. Chování trajektorií na této hranici závisí na chování vektorového pole v okolí hranice.

Popis jednotlivých typů klouzavých bifurkací spolu s jejich klasifikací bude proveden na příkladech konkrétních Filippovových dynamických systémů.

K numerickým simulacím bude použit software Maple nebo Mathematica, k numerickým výpočtům balík programů AUTO.

Sekce: Matematické modelování a informatika

Matematické modelování elektrokinetického toku řízeného střídavým elektrickým polem

Autor: Petr Červenka
Ročník: 5
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Michal Příbyl, Ph.D.

Práce je zaměřena na studium mikrofluidních čerpadel řízených střídavým (AC) elektrickým polem s malou amplitudou. Tato zařízení jsou alternativou k dosud hojně používaným systémům s tokem řízeným stejnosměrným elektrickým polem. V práci je odvozen a transformován do bezrozměrného tvaru matematický model elektrokinetického toku v kanálkovém systému s povrchovými ko-planárními elektrodami. Dále je prezentována základní parametrická studie závislosti rychlosti elektrokinetického toku na použité frekvenci AC pole. Diskutován je i vliv prostorové diskretizace výpočetní domény na přesnost získaných řešení.

Sekce: Matematické modelování a informatika

Stručný úvod do matematické teorie chaosu

Autor: Julie Kamelská
Ročník: 3.
Ústav: matematiky
Školitel: Doc. RNDr. Drahoslava Janovská, CSc.

Práce se zabývá chováním jistých nelineárních dynamických systémů, které můžeme popsat jevem zvaným chaos. Zaměří se na charakteristiku tohoto složitého neperiodického jevu, mimo jiné i na citlivost vlivu počátečních podmínek, tedy že malá změna v počátečních podmínkách vede po čase ke zcela odlišnému řešení daného dynamického systému. Jako konkrétní příklad takové citlivosti uvedeme tzv. motýlí efekt, který lze kvantifikovat Ljapunovovým exponentem.

Sekce: Matematické modelování a informatika

Grafické uživatelské rozhraní pro zobrazování dat standardu DICOM

Autor: Lenka Kňazovická
Ročník: 3.
Ústav: počítačové a řídicí techniky
Školitel: Ing. Martina Mudrová, Ph.D.

Standard DICOM je v současnosti jedním z nejpoužívanějších formátů pro ukládání informací v oblasti biomedicínských dat. Je používán při vyšetřování moderními lékařskými zobrazovacími metodami jako jsou např. NMR, PET, SPECT, CT a další. Jeho charakter umožňuje uložit jak popisné informace týkající se např. osobních údajů pacienta, tak i informace obrazového charakteru, parametrů a nastavení přístroje, na němž probíhalo vyšetřování.

Vzhledem k rychlému rozvoji metod v oblasti zpracování obrazů, včetně medicínských, je formát DICOM implementován i v nových verzích softwaru pro zpracování obrazů, včetně systému Matlab. Velké množství informací obsažených v datových souborech i velké množství souborů náležejících jednomu vyšetření může bránit přehlednému zobrazení údajů potřebných z hlediska dalšího zpracování. Proto je vhodné vytvořit grafické uživatelské rozhraní, které umožní pohodlné načtení a zobrazení vybraných dat a tím získat rychlý přehled o celé sadě souborů.

Těžiště předkládané práce je v rozboru formátu DICOM a v návrhu a tvorbě grafického uživatelského rozhraní v systému Matlab s ohledem na další zpracování daných biomedicínských obrazů.

Sekce: Matematické modelování a informatika

Parallel Processing in Multi-Channel Signal Analysis

Autor: Jan Krupa
Ročník: 3.
Ústav: počítačové a řídicí techniky
Školitel: Prof. A. Procházka

The contribution presents possibilities of distributed computing using the MATLAB distributed computing toolbox (DCT) and its application for multi-channel signal processing. The goal of the contribution is in description of parallel task processing through the computer network and cluster of computers and its use for electroencephalogram (EEG) signal analysis.

The first part of the paper presents the general principle of distributed computing and its application in the MATLAB environment. General steps that are necessary to prepare distributed tasks are presented in the main part of the paper. The whole procedure consisting of tasks submission, their processing and collection of results is analyzed in this section as well together with specific monitoring tools enabling to follow distribution of tasks between the set of computers, processing time for individual tasks, number of tasks waiting in the queue and estimation of the total processing time.

The whole distributed computing toolbox cluster has been tested for the simple set of tasks to demonstrate its functionality and time consumption. Results achieved were then compared with those obtained for processing of the same problem using a single computer generally with a multi-core processor unit. DCT cluster has been then used for processing of the large set of EEG recordings to reduce the computing time necessary for their statistical analysis.

Sekce: Matematické modelování a informatika

Hopfova bifurkace

Autor: Michal Škvarna
Ročník: 2.
Ústav: matematiky
Školitel: Doc. RNDr. Drahoslava Janovská, CSc.

Práce se zabývá periodickými orbitami, které bifurkují ze stacionárních řešení planárního, na parametru závislého, dynamického systému. Tento jev se nazývá Hopfovou bifurkací. Hopfova bifurkace je charakterizována dvojicí komplexně sdružených vlastních čísel Jacobiánu vektorového pole. Za jistých předpokladů vzniká v Hopfově bodě periodická orbita. Teoretické výsledky budou ilustrovány na konkrétních příkladech dynamických systémů. K numerickým simulacím a výpočtům bude využit dostupný software (Maple nebo Mathematica, balík programů AUTO, apod.).

Sekce: Matematické modelování a informatika

Studium dynamického chování při spalování výfukových plynů v 1D trubkovém konvertoru

Autor: Ondřej Uhýrek
Ročník: 5.
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Martin Kohout, Ph.D.

Tato práce se zabývá studiem časo-prostorového rozložení koncentrací/teplot v heterogenně-katalytických reakčních procesech probíhajících v trubkovém reaktoru s dodatečným bočním přívodem reaktantů (tzv. křížový tok) v závislosti na vstupních parametrech (vstupní koncentrace/teplota, vtoková rychlost atd.). Byly zkoumány dva modely popisující spalování výfukových plynů v monolitických katalyzátorech automobilů (TWC):

1) oxidace CO a uhlovodíků (v použitém modelu popsána reakčním mechanismem C_2H_2)

2) oxidace CO a redukce NO_x .

Jako první přiblížení byla studována pouze reakční kinetika bez vlivu transportu v ideálně míchaném reaktoru. Molární koncentrace všech složek účastnících se reakčního mechanismu se tedy mění pouze v čase a dynamika je popsána pomocí soustavy obyčejných diferenciálních rovnic. Jako měnící se parametry byly zvoleny vstupní teplota T_{in} a vstupní molární koncentrace kyslíku $y_{O_2,in}$. Za využití kontinuálních technik (studium vlivu vstupních parametrů na ustálené řešení) obsažené v kontinuálním balíku CONT byl zkoumán vliv vstupních parametrů. Byly nalezeny křivky limitních bodů a bodů Hopfovy bifurkace.

Sekce: Matematické modelování a informatika

Soustavy ODR s nespojitou pravou stranou

Autor: Milan Varga
Ročník: 5.
Ústav: matematiky
Školitel: Prof. RNDr. Alois Klíč, CSc., Ing. Lubor Buřič

V mnoha vědních oborech (mechanika, chemie, biologie, sociologie, elektro apod.) je často potřeba modelovat děje, které jsou popsány soustavou obyčejných diferenciálních rovnic (ODR) $x' = v(x)$, kde vektorové pole na pravé straně je nespojité. Tyto systémy se nazývají Filippovy systémy.

V práci jsou rozebrány pojmy řešení, trajektorie, fázového portréту pro tyto nespojitě soustavy ODR, resp. bifurkace v těchto systémech. Výsledky budou ilustrovány na rovnici tlumeného oscilátoru $x'' + f(x')x' + x = 0$, kde f je nespojitá funkce.

Sekce: Matematické modelování a informatika

Modelování transportu a fázové separace v polymerních systémech

Autor: Michal Vonka
Ročník: 3.
Ústav: chemického inženýrství
Školitelé: Dr. Ing. J. Kosek, Ing. L. Šeda

Práce představuje vývoj a testování algoritmu pro dynamickou simulaci transportních a separačních procesů během fázové separace za vzniku hetero-fázových polymerů, například houževnatého polystyrenu (HIPS). Vyvíjené modely jsou konzistentní s termodynamickým popisem systémů obsahujících polymery. Matematické modelování fázové separace a vzniku heterofázové (tzv. salámové) morfologie HIPS je založeno na modelu s gradientem chemického potenciálu jako hybnou silou transportu. Výsledky práce jsou zajímavé nejen teoreticky, ale také aplikačně pro lepší porozumění utváření heterofázových morfologií řady polymerů.

Sekce: Matematické modelování a informatika

Systematická studie transportu a reakce v rekonstruovaných částicích polyolefinů

Autor: Bc. Alexandr Zubov
Ročník: 1. navazující magisterské
Ústav: chemického inženýrství
Školitelé: Dr. Ing. J. Kosek, Ing. L. Šeda

Transport monomerů a dalších látek v částicích polyolefinů má vliv na rychlost polymerace, distribuci složení kopolymeru a rychlost odplyňování částic v následném zpracování. Pro modelování transportu v porézních částicích polyolefinů je obvykle používán pseudo-homogenní model nebo tzv. multi-grain model porézní struktury částice. Tato práce se zabývá modelováním difuze a polymerizační reakce v reálných prostorově třírozměrných částicích polyethylenu rekonstruovaných ze snímků pořízených RTG mikrotomografem a v částicích uměle rekonstruovaných metodou balistické depozice kulových částic. Diskutován je vliv vnitřní struktury částic na rychlost difuze monomeru a na rychlost reakce, simulována je také neustálená difuze porézní částic polyolefinu v procesu odplyňování částic. Modelové rovnice jsou zpracovány metodou konečných objemů (FVM) a metodou konečných elementů (FEM).

Sekce: Procesní inženýrství a měřicí technika

Katalytická redukce NO_x v dynamickém systému chudá – bohatá směs

Autor: Bc. Šárka Bártová
Ročník: 1. navazující magisterské
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Práce se zabývá experimentálním studiem dynamiky katalytické redukce NO_x pomocí CO, C₃H₆, H₂ v přítomnosti CO₂ a H₂O. Pro měření byl použit průmyslový katalyzátor typu PtRh/Ba/CeZrO₄/γ-Al₂O₃ s ukládáním NO_x a směs syntetických plynů. Provedená měření sledují chování katalyzátoru při dynamickém provozu s přepínáním oxidační (chudé) a redukční (bohaté) vstupní směsi. Vývoj výstupních koncentrací produktů redukce NO_x po přepnutí na redukční směs je zaznamenáván dynamicky s intervalem 1s. Je zkoumán vliv teploty a složení redukční směsi na dynamiku redukce NO_x.

Sekce: Procesní inženýrství a měřicí technika

Problematika zadávání dat o topologii procesů do databáze COMOS

Autor: Miroslava Hartmanová
Ročník: 5.
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Alexandra Novotná, CSc., Doc. Ing. Vladimír Václavek, CSc.

Práce shrnuje některé zkušenosti získané při řešení reálných problémů vyskytujících se při zadávání topologie procesů do profesionálních databázových systémů, konkrétně do databáze COMOS. Podklady popisující topologii procesů mohou být k dispozici v různých formách a jejich zavádění do profesionální databáze COMOS je mnohdy komplikované. Od bilančních a simulačních schémat je nutné topologickou informaci přenést na úroveň blokových schémat v COMOSu a tyto bloky postupně detailně zpracovávat tak, že se "vyplňují" jednotlivými aparáty. Přitom některé aparáty nemusí být v seznamu COMOSu a je třeba je uměle vytvořit. Důležité je také napojení bloků na vnější vstupní proudy surovin a energií na úrovni hranice procesu (battery limits). Do jednoho celku je nutné spojit procesní část procesu s utilitními okruhy. Některé součásti potrubní sítě jako např. ventily je nutno traktovat jako aparáty atd. Diskutuje se i návaznost mezi topologickými a procesními daty.

Sekce: Procesní inženýrství a měřicí technika

Nano-elektro-kinetické proudění elektrolytů

Autor: Jiří Hrdlička
Ročník: 5.
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Dalimil Šnita, CSc.

Byl sestaven matematický model popisující proudění elektrolytu podél soustavy plochých elektrod buzených střídavým elektrickým polem. Jedná se o tzv. indukovanou střídavou elektroosmózu. Model se skládá z lokálních látkových bilancí složek, Poissonovy rovnice, Navierovy-Stokesovy rovnice a z rovnice kontinuity. Pro popis transportu složek je použita Nernstova-Planckova rovnice. Model je prostorově dvourozměrný a zahrnuje popis neustáleného chování. Tento výzkum je motivován vývojem elektrokinetického čerpadla.

Cílem této práce je ukázat kvalitativní výsledky simulací a interpretovat jevy, ke kterým ve studovaném systému dochází. Simulace byly prováděny pro několik variant modelu, které se liší počtem a uspořádáním elektrod.

V soustavě periodicky se opakujících se dvojic elektrod buzených jednofázovým elektrickým napětím vznikají v důsledku symetrie dvojice proti sobě rotujících vírů a nedochází k čerpacímu efektu. V soustavě periodicky se opakujících trojic elektrod buzených třífázovým elektrickým napětím vzniká tzv. postupná vlna, která způsobuje čerpací efekt.

Sekce: Procesní inženýrství a měřicí technika

Měknutí a adhesivní vlastnosti polyolefinů za reakčních podmínek

Autor: Josef Chmelař
Ročník: 3.
Ústav: chemického inženýrství
Školitelé: Dr. Ing. J. Kosek, Ing. T. Gregor

Měknutí rostoucích částic polyolefinů v průběhu polymerace a adheze těchto částic jsou nežádoucími procesy v plynně a kapalně-disperzních polymeračních reaktorech. Náplní práce je experimentální studium vlivu molekulární architektury a sorpce reakčních složek na měknutí a adhesivní vlastnosti polyethylenových a polypropylenových částic za typických reakčních podmínek. Ke studiu tohoto problému je využita nově postavená aparatura využívající laserovou dilatometrii v tlakové cele. Tato aparatura ale bude využita také k mnoha dalším účelům. Teoretické a praktické řešení problému měknutí a adheze bylo inspirováno několika průmyslovými procesy.

Sekce: Procesní inženýrství a měřicí technika

Charakteristika aparátů pro účely databáze COMOS

Autor: Miloš Krčál
Ročník: 5.
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Vladimír Václavek, CSc., Ing. Alexandra Novotná, CSc.

Na příkladě tepelného výměníku příspěvek studuje problematiku získávání procesních a konstrukčních dat týkajících se aparátů a jejich převod do profesionální databáze COMOS. V této souvislosti jsou srovnávány možnosti komerčních simulačních programů, programů pro odhad nákladů a konečně programů pro vyplňování objednacích listů. Vše jen na úrovni základního inženýrského designu a úkolů typických pro kontraktora. Práce se zabývá i možností zobecnění tohoto přístupu na další typy aparátů.

Sekce: Procesní inženýrství a měřicí technika

Analýza pohybu volné hladiny kapaliny v míchacích nádobách

Autor: Hana Matheislová
Ročník: 5.
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Milan Jahoda, Ph.D.

Tok kapaliny vyvolaný rotačním míchadlem není stabilní a jeho proudový obrazec vykazuje výraznou nízkofrekvenční proměnlivost. Tento jev se nazývá makro-nestabilita proudového obrazce a významně ovlivňuje nejen procesy v míchacích aparátech, ale také vyvolává značné dynamické síly působící na pevné povrchy vnořené do promíchávané vsádky. Pozorovaným projevem makro-nestability toku v nádobě je deformace hladiny, tzv. makro-vzdutí. Tato práce je zaměřena na statistickou analýzu časových závislostí výšky hladiny, které byly naměřeny ve válcové míchací nádobě o průměru 1 m se čtyřmi radiálními narážkami při různých frekvencích otáčení míchadla. Konkrétně byly vyčísleny střední hodnoty, rozptyly a směrodatné odchylky a ty dále graficky zpracovány jako závislosti na poloze měřených bodů v nádobě.

Sekce: Procesní inženýrství a měřicí technika

Podrobný model reakce a transportu v porézním katalyzátoru

Autor: Vladimír Novák
Ročník: 5.
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Příspěvek se zabývá simulací reakčně transportních procesů v porézním katalyzátoru, využívající počítačově rekonstruovaný, trojrozměrný obraz skutečné porézní vrstvy. Modelové porézní struktury jsou vytvářeny na základě snímků pořízených elektronovým mikroskopem (SEM, TEM). Je užitá metoda vzhazování mikročástic nosiče s definovaným poloměrem tak, aby modelové médium vykazovalo obdobné texturní vlastnosti (porozita, střední velikost mikro a makro-pórů, korelační délka) jako skutečný katalyzátor. Obecná metodologie a model jsou aplikovány na oxidaci CO na Pt/ γ -Al₂O₃.

Jsou provedeny simulační studie systému o rozměrech 30x10x10 μm^3 mapující vliv teploty a vlastností porézní struktury na vznik koncentračních gradientů uvnitř katalyzátoru. Získané výsledky pak lze chápat v rámci celého katalyzátoru jako průřez katalytickou vrstvou nanesenou na stěně kanálku (běžná tloušťka aktivní vrstvy nanesené v monolitickém reaktoru je právě 30 μm). Dále jsou diskutovány možnosti propojení tohoto podrobného modelu katalytické vrstvy s celkovým modelem monolitického reaktoru.

Sekce: Procesní inženýrství a měřicí technika

Simulace vsádkové rektifikace v prostředí gPROMS

Autor: Jaroslav Pavlík
Ročník: 5.
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: doc. RNDr. Tomáš Vaněk, CSc.

Vsádková rektifikace patří k důležitým operacím v chemickém a farmaceutickém průmyslu. Modelování a simulace těchto procesů je velmi důležitým nástrojem, který kromě jiného poskytuje podklady pro řízení separace produktů. Předmětem této práce bylo vytvoření modelu vsádkové rektifikační kolony v prostředí gPROMS, které je vhodné pro dynamickou simulaci a optimalizaci. Práce obsahuje rovněž aplikaci modelu na rektifikaci jednoduché směsi kapalných uhlovodíků. Kromě obecného využití vytvořeného modelu je také cílem této práce jeho uplatnění při modelování charakterizace komplexních směsí, což jsou směsi látek, u nichž nelze přesně definovat složení, protože obsahují příliš mnoho složek ve velmi malých množstvích. Příkladem takové směsi je ropa. Charakterizace spočívá v naměření tzv. křivky pravých bodů varu (TBP), případně jiných křivek, které lze na TBP přepočítat. Samotné měření TBP křivky se provádí právě ve vsádkové rektifikační koloně s velkým poměrem zpětného toku (refluxem) a velkým množstvím pater.

Sekce: Procesní inženýrství a měřicí technika

Instrumentace pro měření plynem indukovaných změn voltampérových charakteristik chemických vodivostních senzorů

Autor: Bc. Jan Vlček
Ročník: 1. navazující magisterské
Ústav: fyziky a měřicí techniky
Školitel: Ing. Dušan Kopecký

Chemické senzory na bázi polovodičů jsou zařízení pro detekci oxidačních či redukčních plynů a par. V praxi se využívají především v systémech, které monitorují nebezpečné a zdraví škodlivé plyny v ovzduší. K typickým aplikacím patří např. hlásiče úniku výbušných plynů (H_2 , CH_4 , propan-butan), alkoholtestery (dechové zkoušky), indikace nedokonalého spalování (CO), sledování znečištění ovzduší v průmyslových provozech (páry rozpouštědel, korozivní plyny). V současné době se otevírají možnosti dalšího využití plynových senzorů. Perspektivním a studovaným materiálem pro aktivní vrstvy jsou organické polovodiče; zkoumají se jejich chemické a elektrické vlastnosti, mechanismy přenosu náboje či interakcí plynu s povrchem aktivní vrstvy. Úkolem práce bylo vyvinout aparaturu pro měření VA-charakteristik, která umožní diagnostikovat změny elektrických vlastností organických polovodičů při interakci s plynem. Přitom je známo, že uvedené látky vykazují vysoký elektrický odpor (100 M Ω a více).

Zhotovená měřicí aparatura využívá střídavého napětí trojúhelníkového průběhu a umožňuje měření s několika proměnnými parametry (teplota senzoru, průtok plynu, interferující látky, frekvence a amplituda napájecího napětí). Funkčnost aparatury byla ověřena sérií měření pomocí kalibračních směsí vodíku a syntetického vzduchu při různých teplotách senzoru a frekvencích zdroje napájení. Výsledkem práce je zařízení, které poskytuje informace o změnách VA-charakteristik v přítomnosti detekovaného plynu a přispěje k objasnění mechanismů detekce u chemických senzorů.

Sekce: Procesní inženýrství a měřicí technika

Studium nárazu bubliny na vodorovnou stěnu

Autor: Bc. Lucie Vobecká
Ročník: 1. navazující magisterské
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Pavlína Basařová, Ing. Mária Fujasová, Ph.D.

Tato práce je součástí projektu, který se zabývá studiem vzájemného působení bublin a částic. Pro určité modelové představy bývá částice nahrazena stěnou, která představuje částici o nekonečném průměru. Kolize bubliny se stěnou může být rozdělena do tří fází. Jako první je fáze přiblížení, kde nedochází ke kontaktu obou objektů, ale stoupající bublina před sebou vytlačuje tenký kapalný film. Při tom může dojít k deformaci bubliny ještě před kontaktem se stěnou. Druhá je fáze kontaktu, kdy při interakci dochází k maximální deformaci bubliny. Třetí fáze je odraz bubliny od povrchu stěny, přičemž rychlost bubliny je významně odlišná od její původní rychlosti ve volné kapalině. Znalost rychlosti při nárazu, při odrazu a doby kontaktu bubliny se stěnou je potřebná k popisu mechanismu celého jevu.

Náplní práce bylo experimentální studium interakcí bubliny s vodorovnou stěnou a vyhodnocení hydrodynamických parametrů (konečná rychlost bubliny před nárazem, rychlost při nárazu a při odrazu, doba kontaktu, restituční koeficient apod.). Experimenty byly prováděny pomocí rychloběžné kamery (rozlišení 512x512pix při 5000fps). Záznam z kamery byl zpracován v komerčním programu Matlab Image Processing Toolbox.

Sekce: Chemické inženýrství, biotechnologie a experimenty

Stanovení vlastností částic drtě z PET lahví

Autor: Zuzana Brabcová
Ročník: 3.
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Pavlína Basařová

Při recyklaci PET lahví jsou lahve nejprve drceny v nožových mlýnech. Pak je celá směs separována flotací na jednotlivé složky. Cílem separace jsou produkty o vysoké čistotě. Během průmyslového zpracování bylo zjištěno, že výslednou čistotu separovaných složek výrazně ovlivňuje kvalita drcené směsi, tzv. flaků. Bylo zjištěno, že velký vliv mají tvar, velikost a hlavně míra poškození částic – třepivost okrajů. Experimentální stanovení plochy, ekvivalentního průměru a třepivosti okrajů bylo prováděno metodou obrazové analýzy za použití digitálního fotoaparátu Nikon D80 (10 Mpx) s objektivem Micro-Nikkor. Celé zpracování probíhalo v programu NIS-Elements s programovacími moduly. Podstatnou součástí práce byla také tvorba měřících maker, které významně zjednodušily a zrychlily práci.

Sekce: Chemické inženýrství, biotechnologie a experimenty

Experimentální studium periodického provozu katalyzátoru s ukládáním NO_x

Autor: Bc. Jiří Dohnal
Ročník: 1. navazující magisterské studium
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Petr Kočí, PhD.

Práce se věnuje katalytickým monolitickým reaktorům s ukládáním NO_x na povrchu, určeným pro konversi výfukových plynů automobilů. Byly provedeny série měření za podmínek provozu katalyzátoru s periodickou změnou vstupních koncentrací redoxních složek (O₂, CO, C₃H₆ a H₂). Z naměřených dat byla vyhodnocena dosahovaná integrální konverze a selektivita redukce NO_x v závislosti na provozních podmínkách (teplota, koncentrace plynů a časování periodického provozu).

Sekce: Chemické inženýrství, biotechnologie a experimenty

Snížení rychlosti bublin před kolizí s pevnou částicí

Autor: Lucie Dolejší
Ročník: 3.
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Pavlína Basařová

Tato práce je součástí projektu, který se zabývá studiem vzájemného působení bublin a částic. Pro určité modelové představy bývá částice nahrazena stěnou, která představuje částici o nekonečném průměru. V dostatečné vzdálenosti od roviny není rychlost bubliny ovlivňována její přítomností. Při větším přiblížení dochází k zakřivení toku tekutiny a ke snížení rychlosti bubliny. Náplní této práce je experimentální pozorování a popis rychlosti izolované bubliny před kolizí s nakloněnou rovinou s úhlem náklonu od 0° do 80° . Interakce byly sledovány rychloběžnou kamerou (rozlišení 1024x256pix při 2000fps). Pro zpracování obrazu byl použit speciální software NIS-Elements.

Sekce: Chemické inženýrství, biotechnologie a experimenty

Studium kompaktních jader ve vypěněných částicích polystyrenu

Autor: Hana Hajová
Ročník: 5.
Ústav: chemického inženýrství
Školitelé: Dr. Ing. J. Kosek, Ing. T. Gregor

Výroba pěnového polystyrenu expanzí částic nebo extruzí taveniny je tradičním průmyslovým procesem. Expanze částic polystyrenu impregnovaných nadouvadlem, například pentanem, probíhá nad teplotou skelného přechodu systému polymer-nadouvadlo. Zpěňování částice polystyrenu pomocí pentanu je v naší laboratoři prováděno v tlakové cele s průzory a sledováno video-mikroskopicky. V této práci jsme se zaměřili na detailní studium zpěňování částic za podmínek, kdy ve vypěněné částici PS zůstává kompaktní jádro. Z velikosti tohoto jádra lze usuzovat na koncentrační profil pentanu v částici PS. S pomocí mikroskopu AFM byla studována hustota cel (bublinek) a distribuce velikosti cel v těsném okolí kompaktního jádra a z těchto údajů lze získat cenné informace o hustotě nukleace bublin a dalších procesech zúčastněných při tvorbě výsledné pěnové struktury

Sekce: Chemické inženýrství, biotechnologie a experimenty

Zkoumání nelineární dynamiky reakčních systémů se vzájemnou výměnou hmoty

Autor: David Hartman
Ročník: 5.
Ústav: chemické inženýrství
Školitel: Prof. Ing. Igor Schreiber, CSc., Ing. Lenka Schreiberová, CSc.

Tato práce se zabývá nelineárním chováním reakčních systémů, které lze popsat soustavou obyčejných diferenciálních rovnic (promíchávané systémy). Vzájemná provázanost těchto rovnic způsobuje při určité volbě hodnot vstupních veličin oscilační chování. Pro obecný vícesložkový systém lze analyzovat změny dynamiky v závislosti na jednom parametru a určit body, při kterých se charakter dynamického chování nějakým způsobem změní. Kromě základní konfigurace systému popisujícího průtočný izotermní promíchávaný reaktor je zkoumáno další uspořádání, které sestává ze dvou propojených izotermních průtočných reaktorů spojených mřížkou, přes kterou je možný transport hmoty. Dynamiku systému je pak možné ovlivňovat transportními parametry. Tato práce se zabývá analýzou a matematickým popisem takovýchto systémů.

Sekce: Chemické inženýrství, biotechnologie a experimenty

Výroba chemických mikrosystémů z plastových a skleněných substrátů

Autor: Jaroslav Kotowski
Ročník: 3.
Ústav: chemické inženýrství
Školitel: Ing. Jiří Lindner, Ph.D.

Chemická mikrozařízení jsou zmenšenými analogy klasických chemických mikrozařízení; úspěšně byly zkonstruovány a provozovány např. mikroreaktory, mikročerpadla, mikromísice, ale i složitější systémy jako jsou tzv. lab-on-a-chip systémy (laboratoř na čipu). V poslední době tato mikrozařízení získávají poměrně širokou pozornost díky řadě specifických vlastností, které umožňují např. zvýšení výtěžku či specifity reakcí, zlepšení odvodu tepla apod., oproti tradičním zařízením v laboratorním či provozním měřítku. Jejich plnému zavedení do průmyslu ovšem brání poměrně vysoká pořizovací cena a často složité technologie jejich výroby. Technologie, kterými se chemická mikrozařízení dnes převážně vyrábějí, vycházejí z technologií používaných v polovodičovém průmyslu, především pak z technik strukturování křemíku.

Tendence snížit výrobní cenu mikrozařízení vede ke snaze využít i jiných, levnějších materiálů jakými jsou například plasty a sklo. Plasty vykazují široké spektrum vlastností a jejich hlavní předností je snadné strukturování pomocí tepelného utváření. Sklo se vyznačuje vysokou chemickou odolností a naopak v podstatě jedinou možností strukturování (vyjma mechanického obrábění) pomocí leptání v kyselině fluorovodíkové.

Sekce: Chemické inženýrství, biotechnologie a experimenty

Testování aparatury pro inverzní plynovou chromatografii

Autor: Bc. Jiří Maršálek
Ročník: 1. ročník navazující magisterské
Ústav: chemického inženýrství
Školitelé: Dr. Ing. J. Kosek, Ing. T. Gregor

Práce popisuje nově postavenou aparaturu pro inverzní plynovou chromatografii (iGC) umožňující studium termodynamiky (ad)sorpce a dynamiky transportu v různých vzorcích polymerů nebo keramiky za normálních a zvýšených teplot a tlaků. V chromatografii iGC jsou z detailního tvaru odezvy na pulzní nebo skokový signál vyhodnocovány především transportní charakteristiky náplně kolony, např. prášku porézního polyolefinu. Je popsána metodika pro vyhodnocení parametrů výplně kolony z měřeného signálu teplotně-vodivostního detektoru. Jsou diskutovány zkušenosti se stavbou aparatury a prezentovány dosavadní experimentální výsledky.

Sekce: Chemické inženýrství, biotechnologie a experimenty

Vývoj experimentálního systému pro studium bioafinitních interakcí

Autor: Lucie Pecháčková
Ročník: 5.
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Michal Příbyl, Ph.D.

Práce je zaměřena na vývoj experimentální aparatury vhodné pro studium bioafinitních interakcí, například interakce protilátka-antigen, v mikrofluidních čípech. Jsou konstruovány a optimalizovány mikrofluidní čipy vhodné pro uskutečnění těchto reakcí v heterogenním uspořádání s receptorem ukotveným na pevné fázi. Využívány jsou techniky mikrolitografie, mikroobrábění, tepelného spojování a odlévání. Další část práce je věnována konstrukci optovláknového systému, které je testováno jako detekční zařízení pro stanovení koncentrací fluoreskujících biologických komplexů.

Sekce: Chemické inženýrství, biotechnologie a experimenty

Matematické modelování biofiltrační kolony

Autor: Tereza Skybová
Ročník: 5.
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Pavel Hasal CSc.

Tématem práce je matematické modelování procesu biofiltrace odpadních vod ve zkrápěném biofiltru. Při průtoku vody filtrační kolonou se znečišťující látky dostávají přestupem hmoty do biofilmu, difundují jím a tvoří tak koncentrační gradient. Ten udržuje tok látek z tekutiny do vrstvy mikroorganismů. Mikroorganismy látky absorbují a biodegradují na oxid uhličitý a vodu. Rovnice matematického modelu vycházejí z diferenciálních bilancí jedné znečišťující látky v elementu kapaliny a elementu biofilmu. Cílem práce je získat numerickým řešením modelových rovnic koncentrační profily této látky podél kolony v kapalině i v biofilmu, sledovat jejich změny v čase a nalézt tak vodítko pro provozování laboratorního biofiltru.

Sekce: Chemické inženýrství, biotechnologie a experimenty

Řízení morfologie pěny při zpěňování částic polystyrenu

Autor: Klára Smolná
Ročník: 3.
Ústav: chemického inženýrství
Školitelé: Dr. Ing. J. Kosek, Ing. T. Gregor

Vypěňování částic polystyrenu je zajímavé ze dvou důvodů. Jednak je nutno snižovat emise těkavých organických látek používaných jako zpěňovací činidla, jednak je proces zpěňování zajímavý teoreticky z pohledu nukleace a růstu cel pěnové struktury. Ukazuje se, že difúze zpěňovacího činidla polymerem má důležitou úlohu v procesu zpěňování. Vypěňování částic polystyrenu bylo sledováno video-mikroskopicky v tlakové pozorovací cele s průzory. Byla provedena systematická experimentální studie vlivu procesních parametrů na vypěňování (teplota, tlak, impregnace částic polymeru zpěňovadlem). Byly získány zajímavé experimentální poznatky o průběhu impregnace částic polystyrenu nadouvadlem a o řízení morfologie částic pěnového polystyrenu s pomocí řízeného koncentračního profilu nadouvadla.

Sekce: Chemické inženýrství, biotechnologie a experimenty

Měření koeficientu přestupu hmoty O₂ a H₂ polarografickou sondou v cele s klidnou hladinou

Autor: Ján Šíma
Ročník: 3.
Ústav: 409
Školitel: Ing. Michal Kordač, Ph.D.

Přestup hmoty z plynu do kapaliny často představuje rychlost určující děj v mnoha chemických a potravinářských zařízeních. Je proto důležité stanovovat koeficient přestupu hmoty k_L v závislosti na různých podmínkách mezi které patří viskozita, povrchové napětí, příkon dodávaný míchadlem a případně přítomnost a vlastnosti pevných částic. Tyto závislosti jsou v literatuře popisovány pomocí různých teoretických modelů. Platnost těchto modelů je však limitována jejich předpoklady, jejichž platnost není v experimentálních pracích často nijak ověřována.

V této práci byl stanovován koeficient přestupu hmoty (k_L) v cele s klidnou hladinou a známým specifickým povrchem pomocí metody záměny plynů nad hladinou která vyvolala vzruch měřitelný polarografickou sondou. k_L bylo vyhodnocováno pomocí exponenciální a linearizované aproximace naměřených dat. Pro oba plyny byla proměřena závislost k_L na otáčkách míchadla. Tyto závislosti jsou porovnány s předpověďmi teoretických modelů přestupu hmoty.

Sekce: Chemické inženýrství, biotechnologie a experimenty

Studium adhezní účinnosti při interakci pevné částice a bubliny

Autor: Kateřina Šmídová
Ročník: 5.
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Pavlína Basařová

Tato práce je součástí projektu, který se zabývá studiem vzájemného působení bublin a částic, se zaměřením na studium adhezní účinnosti. Adheze bubliny na povrch pevné částice začíná okamžikem kolize a je charakterizována vznikem a dynamickým rozšiřováním linie třífázového kontaktu. Proces adheze bubliny končí tehdy, když bublina zaujímá neměnné místo na povrchu pevné částice a její smáčený obvod je konstantní. Úvodní část práce je věnována měření smáčecího úhlu upraveného skleněného povrchu v závislosti na době silanizace a typu silanu. Cílem je stanovení postupu při čištění skla a optimální doby silanizace, jež je potřebná ke zvýšení smáčecího úhlu, protože hydrofobicita povrchu zvyšuje pravděpodobnost adheze. Stěžejní částí práce je studium interakce bubliny a pevné kulové částice se zaměřením na popis pohybu bubliny po povrchu částice a měření kontaktního času. Proměnnými parametry při experimentálním měření je velikost pevné částice a velikost bubliny. Interakce jsou sledovány rychloběžnou kamerou a pro zpracování obrazu je použit speciální software NIS-Elements.

Sekce: Management podnikových procesů

Podnikatelský záměr: Zpracování odpadních pivovarských kvasnic

Autor: Blanka Jiříčková
Ročník: 5.
Ústav: ekonomiky a řízení chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Doc. Ing. Stanislava Grosová, CSc.

Cílem práce bylo určit výdělečnost podnikatelského záměru využití pivovarských kvasnic, které jsou vedlejším produktem při výrobě piva. Projekt by byl realizován v Las Palmas de Gran Canaria na Kanárských ostrovech.

Tato práce se zabývá vybráním vhodného procesu výroby a výrobního zařízení, zhodnocením příležitostí a hrozeb při vstupu na trh, uvedením silných a slabých stránek uvažovaného projektu, vyčíslením nákladů a finanční analýza investičního záměru.

Sekce: Management podnikových procesů

Analýza a doporučení další strategie v oblasti vnějších obalů retailových výrobků

Autor: Vítězslav Skřivánek
Ročník: 5.
Ústav: ekonomiky a řízení chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Doc. Ing. Stanislava Grosová, CSc.

Cílem práce bylo hodnocení úrovně vybraných skupinových obalů, které používá podnik Vitana, a.s. a návrh opatření pro jejich zlepšení z hlediska jejich marketingové a logistické funkce. Sběr informací byl realizován ve vybraných obchodních jednotkách, byly použity metody pozorování na místě prodeje a dotazování pracovníků prodeje. Práce je rozdělena do čtyř částí:

- Vnitřní analýza, kde jsou zmapovány podnikem používané skupinové obaly.
- Vnější analýza, která zkoumá obaly používané konkurencí.
- Srovnání výsledků obou analýz.
- Závěrečného doporučení další strategie u vytipovaných produktů.

Součástí práce je fotografická dokumentace variant a vzorky obalů, na kterých je možné vysledovat základní trendy v této oblasti.

Sekce: Management podnikových procesů

Design nového produktu

Autor: Kamila Soběslavová
Ročník: 5.
Ústav: ekonomiky a řízení chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Dr. Miguel Bagajewicz, University of Oklahoma

Návrh nového produktu v sobě zahrnuje několik kroků. Na jedné straně řetězce je zákazník, který určuje poptávku. Poptávka je funkcí několika faktorů, mezi nimi nejdůležitější roli hraje rozpočtové omezení zákazníků, konkurence a vlastnosti nabízeného produktu. Vlastnosti produktu mohou být vyjádřeny určitými technickými parametry. Např. mýdlo je charakterizováno čistící schopností, pěnivostí, vůní, viskozitou aj. Tyto parametry jsou zase funkcí chemického složení a fyzikální struktury. Identifikace složení směsi, které nejvíce oslovuje potřeby zákazníků tedy stojí na druhé straně návrhu nového produktu. Při návrhu je také nutné brát v potaz všechny náklady, které ovlivňují cenu konečného produktu, z nichž některé jsou funkcí složení produktu.

Jinými slovy je na začátku celé procedury marketingový průzkum trhu, který zjistí, co zákazníci požadují a co by je učinilo šťastnými. Požadavky zákazníků jsou poté předány inženýrům, kteří navrhnu složení a výrobu nového produktu. Vyčíslí všechny náklady a zjistí optimální složení produktu, aby na jedné straně byli spokojeni zákazníci a na druhé straně výrobci, prodejci, aj.

Cílem této práce je návrh nového modelu chování zákazníků, který by lépe vystihoval skutečnost než doposud existující modely a jeho následná aplikace na repelent proti hmyzu. Výsledkem je optimální složení repelentu za současné maximalizace spokojenosti zákazníků a NPV.

Sekce: Management podnikových procesů

„Bud’ in, hod’ out“ – akce na podporu prodeje piva Ostravar

Autor: Iva Šmídová
Ročník: 5.
Ústav: ekonomiky a řízení chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: doc. Ing. Stanislava Grosová, CSc.

Práce je věnovaná podpoře prodeje piva Ostravar, který je lokální značkou pivovarů Staropramen, se silnou pozicí především v městě Ostrava. Informace pro zpracování práce byly získány v oddělení trade marketingu Pražských pivovarů a.s., kde jsem pracovala na projektu akcí na podporu prodeje

První kapitoly definují podporu prodeje a její cíle, její postavení v rámci komunikačního mixu, vymezují typologii akcí podpory prodeje. Další kapitoly jsou věnovány konkrétní situaci ve společnosti Staropramen a speciálně značce Ostravar, se kterou jsem v rámci zpracování projektu pracovala. Nejdříve je představena značka Ostravar jako taková, její spotřebitelé a trh a akce na podporu prodeje „Bud’ in, hod’ out“, na které jsem pracovala. V závěru jsou zhodnoceny výsledky této akce

Sekce: Management podnikových procesů

Analýzy a návrh systému údržby

Autor: Martin Šťavík
Ročník: 5.
Ústav: ekonomiky a řízení chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Dana Strachotová, Ph.D.

Práce se zabývá analýzou a návrhem systému údržby ve společnosti Lasselsberger a.s. v závodě RAKO III. Součástí práce byla spolupráce při workshopech probíhajícího projektu – P2 Funkční systém závodové údržby.

Součástí práce je analýza výchozího stavu, klasifikace strojů a zařízení, zpracování základní dokumentace pro zařízení kategorie A, nastavení parametrů systému preventivní a autonomní údržby a zahájení pilotního projektu.

Cílem práce je podpora zavedení funkčního systému údržby, který umožní lepší využití kapacity výrobních linek a povede ke zvýšení kvality produkce.

Sekce: Management podnikových procesů

Market with Liquid Oxygen in Czech Republic

Autor: Josef Šuber
Ročník: 5.
Ústav: ekonomiky a řízení chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Doc.Ing. Stanislava Grosová, CSc.

This work is concerning in liquid oxygen market and mainly with opportunities for Chart as a producer a Micro Bulk system. This work is divided into several parts. First part describes Hospital markets, the second part deals with home health care. Home health care system is rapidly evolving market. It shows that this rapidly growing market gives some opportunities and gave a lot of insights about where we can use oxygen and where we can make some progress. The market research is supported a statistical data and it will show how the market can go in future and how it can develop. This research was made for company named Chart what is leader in producing Micro Bulk system in the world.

Sekce: Management podnikových procesů

Zefektivnění procesu náboru výrobního personálu v Siemens VDO

Autor: Lucie Urbančíková
Ročník: 5.
Ústav: ekonomiky a řízení chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Mgr. Ing. Marek Botek, Ph.D.

Siemens VDO je výrobním podnikem, kde dochází k velké fluktuaci zaměstnanců, neustálému najíždění nových projektů a tudíž i zvyšování požadavků výroby na lidský faktor ve výrobě. Nábor a obsazení linek je primordiálním problémem u firmy s 1600 zaměstnanci ve výrobních pozicích. Počty uchazečů o zaměstnání v této mezinárodní firmě jsou vysoké a tudíž je třeba snažit se o co nejobektivnější a nejsystematičtější výběr zaměstnanců. Náborová matice, vytvořena týmem HR Siemens VDO ve spolupráci s vedoucími pracovníky ve výrobě je nástrojem, který umožňuje zefektivnit proces náboru samotný a snižuje čas, potřebný k vyhodnocení daného uchazeče. Náborový proces tak v historickém vývoji firmy přechází touto maticí do další fáze, která se zdá být nejkomplexnější. Zvyšující se požadavky zákazníků na kvalitu a spolehlivost výrobků neumožňují zaměstnávat levnou zahraniční pracovní sílu, proto je potřeba systematicky oslovovat domácí pracovní sílu, nabídnout na trhu práce více než konkurence, být o krok napřed. Od začátku letošního roku prošlo náborovým procesem Siemens VDO 1000 uchazečů o práci. Z toho 500 již nastoupilo a dalších 150 je předpokládáno, že nastoupí do konce roku. Jedná se tedy o velké množství uchazečů, proto matice pro nábor je skvělým nástrojem pro objektivizaci a širší aplikaci. Každý náborář je schopen dle předem stanoveného klíče vyhodnotit jednotlivého uchazeče, dle daných kritérií, bodů a škál hodnot.

Sekce: Management podnikových procesů

Snímek pracovního času výrobní linky

Autor: Alice Vosečková
Ročník: 5.
Ústav: ekonomiky a řízení chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Dana Strachotová, Ph.D.

Předkládaná práce vychází z dat zjištěných v podniku Zentiva, a.s., který se zabývá výrobou a distribucí léčiv, kde jsem absolvovala třítydenní letní praxi. Na útvaru polotuhých lékových forem jsem prováděla snímek operace výrobní linky na plnění mastí do tub. Metoda snímkování patří mezi časové studie práce, jejichž účelem je zajistit správné organizování práce na pracovišti a hlavně pak jeho ekonomickou účelnost. Konkrétně se používají ke stanovení norem práce, kde je zapotřebí určit čas potřebný k jednotlivým operacím výrobního procesu.

Smyslem mé práce bylo sledovat adjustační linku, kde jsem se nejprve musela seznámit s technologií vlastního výrobního procesu, poté naměřit a shromáždit potřebná data a vyhodnotit je. Náplní mé práce tedy bylo sledovat a zaznamenat výrobní a nevýrobní časy linky a zároveň popsat příčiny zastavení linky a kvantifikovat ty nejčastější. Na závěr jsem provedla statistický rozbor snímku operace.

Sekce: Logistické řízení podniku

Vytvoření modelu pro vícekriteriální optimalizaci procesu statické kompletace zásilek ve společnosti FM Logistic

utor: Lukáš Bláha
Ročník: 5.
Ústav: ekonomiky a řízení chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Jakub Dyntar

Kompletace je soubor činností spojených se sestavením zásilky ze zásob dodavatele obsahující požadovaná množství jednotlivých položek uvedených na objednávce zákazníka. Jejich pracnost je největší z celého toku materiálu skladem. Tyto činnosti jsou náročné na čas a na dobrou organizaci práce.

FM Logistic působí po celé Evropě. V ČR je zastoupena společností FM Česká s.r.o., která nabízí především skladovací a kompletační služby.

Tato práce je zaměřena na vytvoření modelu schopného získávat a zpracovávat informace o skladovaných položkách z podnikové databáze. Na základě předem definovaných kritérií, jimž lze přiřadit různé váhy, navrhne model nové uspořádání skladovaných položek vedoucí ke zvýšení efektivity procesu kompletace. Jako optimalizační kritéria byla použita hmotnost kartonu, pevnost kartonu, rotace zboží a počet vypotřebovaných palet s jednotlivými položkami pro kompletaci za období 30 dnů.

Model byl vytvořen v programu Microsoft Excel v prostředí Visual Basic for Applications.

Sekce: Logistické řízení podniku

Předpověď spotřeby etiket na rok 2008

Autor: Jan Ficl
Ročník: 5.
Ústav: ekonomiky a řízení chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Prof. Ing. Ivan Gros, CSc.

Zpracovávanými daty v ročníkovém projektu je plán spotřeby etiket na jednotlivé měsíce na rok 2007 získaných během letní odborné praxe v podniku Budějovický Budvar, n.p. Pomocí regresní analýzy a sezónních indexů (spotřeba piva je sezónního charakteru) je v práci vypracována předpověď spotřeby etiket na rok 2008. Vedle této předpovědi byla provedena ABC analýza a jednotlivé etikety byly rozděleny do třech skupin (celkové množství položek etiket je 126, jedná se o etikety určené na český i zahraniční trh). Je zde vedle hodnocení ukázek jednotlivých etiket a celkového hodnocení na rok 2008 rovněž i hodnocení těchto tří skupin.

V úvodu jsou uvedeny základní informace o pivovaru - jeho portfolio výrobků, systém distribuce v České republice a v zahraničí, základní ekonomické informace (výstav piva, export a tržby za několik posledních let) a stručná historie známkoprávních sporů s americkým pivovarem Anheuser - Bush.

Sekce: Logistické řízení podniku

Optimalizace systému skladování

Autor: Tomáš Horák
Ročník: 5.
Ústav: ekonomiky a řízení chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Pavel Hradecký, Ph.D.

Zadání projektu vychází z reálného výrobního procesu v pražském výrobním závodě společnosti Mitas, a. s. Tématem projektu je návrh nového prostorového uspořádání manipulačních prostředků ve skladu a návrh nového systému manipulace s těmito prostředky uvnitř skladu. První část práce se zabývá definicí problému a popisem teoretických pojmů s řešeným problémem souvisejících. Jedná se o popis systému FIFO, metody Just in Time nebo metody CRAFT. Druhou částí je pak aplikace teoretických poznatků v reálném problému a návrh jeho řešení.

Řešení problému se skládá z praktických rad pro způsob doplňování a odebrání manipulačních prostředků uvnitř skladu a dále z několika nákrešů uspořádání skladu. Tyto nákresy jsou pomocí zvolených kritérií ohodnoceny z hlediska vhodnosti jejich aplikace v podniku.

V úvodu práce nechybí ani stručné informace o podniku, jeho produktovém portfoliu a o celém výrobním procesu.

Sekce: Logistické řízení podniku

Ekonomika malých šarží

Autor: Aleš Pavelek
Ročník: 5.
Ústav: ekonomiky a řízení chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Doc.Ing. Sláva Balatka, CSc.

Svou letní praxi jsem absolvoval ve společnosti Akzo Nobel Coatings CZ, a.s., která je výrobcem klasických nátěrových hmot a také práškových barev. Ve své SVK se zaměřím na profil a historii společnosti. Dále pak provedu ABC analýzu výrobků podle velikosti produkce. Zaměřím se také na způsob kalkulace nákladů ve společnosti a předvedu vlastní model výpočtu variabilních nákladů a také grafické zpracování závislosti velikosti variabilních výrobních nákladů na velikosti výrobní šarže.

Sekce: Logistické řízení podniku

Generátor časových řad vykazujících znaky sporadické poptávky

Autor: Eva Rusnoková
Ročník: 5.
Ústav: ekonomiky a řízení chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Jakub Dyntar

Sporadická poptávka je jev, se kterým se v poslední době potýká mnoho distributorů zejména v oblasti automobilového průmyslu. Klasické metody předpovědi poptávky využívané v obvyklých systémech řízení zásob se ukazují být při konfrontaci se sporadickou poptávkou neúčinné a přínos nových metod ještě nebyl dostatečně prokázán.

Mým cílem je vytvořit uživatelské prostředí, ve kterém by si uživatel zadáním určitého počtu numerických parametrů, relevantních k reálnému problému, mohl generovat časovou řadu hodnot popisující občasnou poptávku. Na takto definované časové řadě by bylo možné testovat účinnost dostupných metod předpovědi poptávky a prokázat jejich použitelnost v systémech řízení zásob. Práce bude realizována v prostředí MS Excel pomocí programovacího jazyku Visual Basic.

Sekce: Logistické řízení podniku

Návrh nastavení kanbanového řízení výrobního řetězce v Cadence Innovation

Autor: Ondřej Salava
Ročník: 5.
Ústav: ekonomiky a řízení chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Prof. Ing. Ivan Gros, CSc.

Cílem práce je navrhnout postup výpočtu množství kanbanových karet potřebných pro řízení výrobního řetězce v podniku Cadence Innovation na několika modelových výrobcích, včetně zhodnocení výhod a nevýhod této metody vůči stávajícímu způsobu řízení, se zaměřením na skladové prostory a provázanost toku materiálu a informací. Hlavní pozornost je věnována lineární části řetězce, která je pro aplikaci nejvhodnější s přihlédnutím k možnostem aplikace na kompletačních stupních.

Sekce: Logistické řízení podniku

Model pro nákladové hodnocení variant výroby BHPS

Autor: Petr Tulach
Ročník: 5.
Ústav: ekonomiky a řízení chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Petra Vegnerová

Cílem práce bylo propočítat varianty výrobního programu na lince Blokového houževnatého polystyrénu (BHPS) v akciové společnosti Kaučuk a určit hlavní faktory, které ovlivňují náklady na výrobu.

Byl vytvořen model, který umožňuje vyčíslit náklady ve výrobě na základě zadaného výrobního programu. Sledovány byly náklady na udržování zásob, náklady na ztráty z neuskutečněných prodejů a náklady na přejetí.

Pro přípravu modelu byla provedena rozsáhlá analýza prodejů BHPS za poslední dva roky. Pomocí modelu byly propočítány varianty výroby pro první čtvrtletí 2007 a tyto byly porovnány se skutečným programem.

Sekce: Logistické řízení podniku

Analýza variant delimitace výrobního programu

Autor: Jan Záhora
Ročník: 5.
Ústav: ekonomiky a řízení chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Petra Vegnerová

Projekt byl zpracováván v rámci letní odborné praxe ve společnosti Kaučuk, Kralupy nad Vltavou a.s. Z důvodů prodeje společnosti, nastal problém úpravy výrobního programu. V tomto případě konkrétně na výrobní jednotce blokového krystalového polystyrenu (BKPS). Jako aktuální se jevíly 3 rozdílné varianty. Hlavní změnou, která ve výrobním programu nastala, bylo zařazení nového typu PS do výroby. Na tento typ PS vlastnila společnost Kaučuk licenci, avšak doposud jej ještě nevyráběla.

Cílem projektu bylo navrhnout varianty výrobního programu. Jako podklad pro jejich tvorbu posloužila data z prodejního oddělení o předpokládaných prodejích jednotlivých typů PS pro následujících 12 měsíců. K těmto datům byly přidány technologické a kapacitní možnosti výrobní jednotky BKPS. Kritéria, podle kterých se jednotlivé varianty posuzovaly, byly náklady na skladování (N1), náklady na přejiždění mezi jednotlivými typy PS (N2) a ztráta z vyčerpání zásob (N3).