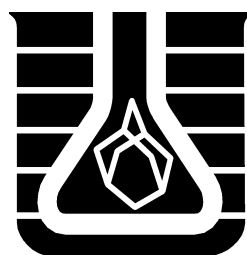


**Vysoká škola chemicko-technologická
v Praze**



VŠCHT

**Aktualizace
dlouhodobého záměru
pro rok 2001**

**Praha
31. května 2000**

Aktualizace dlouhodobého záměru VŠCHT Praha pro rok 2001

V souladu se zněním zákona č. 111/1998 Sb., o vysokých školách a o změně a doplnění dalších zákonů, § 21 odst. 1 písm. b) předkládá Vysoká škola chemicko-technologická v Praze k termínu 31. května 2000 aktualizaci svého dlouhodobého záměru pro rok 2001. Dlouhodobý záměr VŠCHT Praha byl předložen v roce 1999 a byl komisionálně projednán na Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy v prosinci roku 1999 současně s jeho aktualizací pro rok 2000. Předkládaná aktualizace VŠCHT Praha zohledňuje i zveřejněnou aktualizaci dlouhodobého záměru MŠMT pro rok 2001.

V přílohách uvádíme, na vyzvání MŠMT, předpokládané počty přijímaných studentů do všech tří typů studijních programů uskutečňovaných na VŠCHT Praha v letech 2000 až 2006 a detailní údaje o investičních akcích.

Aktualizaci dlouhodobého záměru prezentuje VŠCHT Praha podle těchto oblastí své činnosti:

- **vzdělávání**
- **výzkum a vývoj**
- **informační technologie**
- **mezinárodní spolupráce ve vzdělávání**
- **ubytovací a stravovací zařízení, péče o studenty**
- **investice**

V oblasti vzdělávání:

VŠCHT Praha v roce 2001

- a) přijme opatření k realizaci závěrů a doporučení Akreditační komise k akreditaci bakalářských a magisterských studijních programů uskutečňovaných VŠCHT v Praze a jejími fakultami
- b) bude pokračovat v přípravě systému k přechodu studentů z magisterských do bakalářských studijních programů k dokončení studia
- c) v přijímacím řízení uchazečů o studium v magisterských studijních programech bude pokračovat v dodržování stejného počtu přijatých a do 1. ročníku zapsaných studentů. V dlouhodobém záměru VŠCHT Praha předpokládaný 1 až 2% růst počtu studentů v těchto programech bude docílovat zvýšením počtu uchazečů se skutečným zájmem o studium chemie v rámci jejich souboru.
- d) bude pokračovat v řešení koncepce rozvoje bakalářských studijních programů a zvyšování počtu přijatých uchazečů do těchto programů k naplnění předpokládaného nárůstu počtu těchto studentů v dlouhodobém záměru VŠCHT Praha
- e) přijme opatření k vyrovnání přechodného snížení počtu studentů v důsledku poklesu maturantů v roce 2000
- f) předloží žádost o akreditaci nového studijního oboru v bakalářském studijním programu Specializace v pedagogice pro vzdělávání středoškolských učitelů k rozšíření kvalifikace pro vyučování chemie

- g) předloží k celoškolské diskusi návrh koncepce modulové stavby předmětů jako základu řešení přímé vazby bakalářského a navazujícího magisterského studia
- h) bude pokračovat v tvorbě systému dostupnosti studijních materiálů a databází v elektronické formě na síti vysoké školy
- i) přijme opatření k realizaci závěrů a doporučení k výuce výpočetní techniky na VŠCHT Praha
- j) zpracuje návrh koncepce informačního systému ve vzdělávací činnosti pro uchazeče o studium a veřejnost jako součást propagační, informační a poradenské činnosti VŠCHT
- k) bude pokračovat v inovaci a rozvoji laboratoří studentů včetně pracovišť pro praktickou výuku studentů bakalářského studijního programu Specializace v pedagogice, určených pro vzdělávání učitelů chemie na středních školách
- l) sjednotí systém zpracování nabídek reálných pracovních příležitostí a stavu uplatnění absolventů z jednotlivých studijních programů.

V oblasti doktorských studií počítá VŠCHT Praha s mírně zvýšenými počty přijímaných studentů doktorských studijních programů. Pro akademický rok 2000/2001 přijmeme 150 nových doktorandů a v akademickém roce 2001/2002 160 doktorandů. V příslušných akademických rocích tak dosáhne celkový počet doktorandů na VŠCHT Praha 615 až 620. V nově akreditovaném doktorském studijním oboru „Aplikovaná matematika“ předpokládáme přijetí 2 až 3 studentů.

V oblasti výzkumu a vývoje

VŠCHT Praha bude i v roce 2001 pokračovat v intenzivní výzkumné činnosti jako integrální součástí činnosti vzdělávací.

Od r. 2001 budou řešeny nové projekty 5. rámcového programu. Jednotlivé ústavy podaly doposud 29 přihlášek k účasti na 5. programu a doběhnou projekty v rámci 4. rámcového programu a některé další projekty (granty).

Předpokládá se také přibližně stejná aktivita a úspěšnost ve výběrových řízeních na projekty GA ČR, FR VŠ a jednotlivých ministerstev jako v minulých letech.

V roce 2000 rovněž končí řešení pěti projektů v rámci programu „Posílení výzkumu na vysokých školách“ a proto budou pro rok 2001 řešeny otázky spojené se začleněním řešitelských kolektivů do vědecko-výzkumné struktury VŠCHT.

V roce 2001 bude pokračovat řešení osmi výzkumných záměrů s následující tematikou a konkrétním obsahem pro rok 2001:

1 Katalytické procesy v chemii a chemické technologii

Prioritou v roce 2001 budou katalytické procesy, které budou studovány z širokého spektra aspektů. Jde například o jejich aplikace do syntéz chemických specialit i vývoj velkokapacitních technologií, jejich optimalizaci a dále na studium vícefázových katalytických reaktorů s důrazem na procesy šetrné k prostředí a na environmentální technologie. V oblasti organické chemie je důraz položen na teoretické aspekty - kvantově chemické a spektrální metody včetně jejich aplikací, řešení reakčních mechanismů i studium

vztahu mezi strukturou na jedné straně a reaktivitou či fyzikálními, biologickými vlastnostmi na straně druhé. Budou studovány heterocyklické, makrocyklické i fluor-obsahující sloučeniny z hlediska jejich přípravy, reaktivity i aplikačních možností.

Katalytický výzkum je zaměřen na vývoj nových typů katalyzátorů určených především pro hydrogenace, dehydrogenace a kyselou katalyzované reakce, nosičové katalyzátory s kovovou nebo oxidickou aktivní složkou a zeolity. Nezbytnou součástí syntézy procesů organické technologie je jejich matematické modelování a optimalizace, vyhodnocení kinetiky reakcí a parametrické citlivosti. Ve stejné souvislosti se budou studovat dynamika a transportní jevy ve vícefázových katalytických reakčních systémech i tepelné efekty reakcí. Kombinace separačních procesů s reakcí, např. katalytická destilace patří v současnosti k nejintenzivněji studovaným procesům. Trvalá pozornost je věnována také uplatnění principů chemických technologií šetrných k prostředí, jak u výše zmíněných procesů, tak i vývojem postupů katalytických oxidací nežádoucích organických látek v odpadních vodách. Stálá pozornost bude věnována elektrochemickým metodám a elektrochemickému inženýrství při ochraně životního prostředí, při zavádění ekologických technologií, při studiu nových zdrojů energie a při charakterizaci korozně namáhaných materiálů. V oboru organické chemie půjde především o vývoj metodik organické syntézy složitých přírodních i biologicky aktivních sloučenin včetně jejich stereochemického i teoretického studia, dále všechny aspekty vzájemných interakcí organických sloučenin popřípadě o interakce s anorganickými atomy. Velmi intenzivně budou studovány sloučeniny povahy komplexů (například přechodových kovů), které v posledních desetiletích přinesly revoluční změny do syntetických katalytických procesů. S využitím znalosti mechanismů účinku těchto látek budou navrženy nové struktury s předvídatelnými vlastnostmi. To umožní konkrétní aplikace v oblasti chemie nadmolekulárních struktur (micelární katalýza, molekulární receptory nabitých i nenabitých částic, kapalné krystaly, rozpoznání chirálních sloučenin, enantioselektivní katalyzované reakce), modelování biologických dějů i syntézy nových molekulárních zařízení a materiálů.

V oblasti nových možností získávání speciálních výrobků organické a anorganické technologie bude řešena problematika přeměn aromátů na zeolitických katalyzátorech, kinetiky hydrogenačních aminací a hydrogenací nitrilů, syntézy adamantanu na zeolitických katalyzátorech, hydroizomerace dicyklopentadienu na adamantan, syntézy a využití nových látky pro parfumářský průmysl, hydrogenace alkylaromátů na cyklické ketony a alkoholy, selektivní hydrogenace nenasycených karbonylových sloučenin. Dále budou studovány makrocyklické sloučeniny vzniklé cyklokondenzací fenolů s aldehydy nebo sírou, přičemž pozornost bude věnována jejich přípravě i aplikacím. Nové heterocyklické povrchově aktivní sloučeniny budou syntetizovány a bude studována jejich aplikace v micelární katalýze i transportu iontů přes membránu. Budou studovány nové komplexy přechodových kovů se syntetickými i přírodními ligandy, jejich struktura i možnosti jejich aplikace.

V oblasti metodik a procesů pro syntézu nových látek s žádoucími chemickými, fyzikálními a biologickými vlastnostmi budou detailně studovány shora vyjmenované reakce. Pozornost bude věnována metodice a procesům pro syntézu nových látek s žádoucími chemickými, fyzikálními a biologickými vlastnostmi, procesům s nestacionární kinetikou, studiu adsorpčních isoterem v systémech tuhá látka-kapalina, matematickému modelování pyrolýzy, využití neuronových sítí pro zpracování kinetických dat a studium konkurenčních katalytických hydrogenací

V oblasti nových katalytických materiálů pro výrobu chemických specialit včetně jejich aplikací v katalytických procesech, budou řešeny otázky selektivních vlastností hydrogenačních katalyzátorů (Pt-Sn, Ru-Sn, Ni-modifikátor), acidobazických vlastností katalyzátorů pro anilinový proces, metodiky testování relativní bazicity katalyzátorů, cesiem modifikovaných katalyzátorů pro nízkoteplotní konverzi syntézniho plynu a konečně nových

směru využití zeolitických katalyzátorů (acylační reakce, Meerwein-Ponndorfova redukce, Oppenauerova oxidace) a bifunkčních katalyzátorů zeolit-kov a hydrotalcit-kov.

V oblasti výzkumu chování vícefázových a mebránových reaktorů, jejich modelování a optimalizace bude zejména studována problematika reaktoru se zkrápnou vrstvou katalyzátoru, procesů s využitím reaktivní destilace, algoritmů pro bezpečné řízení vsádkových reaktorů se silně exotermickou reakcí i výzkumu přenosových jevů.

V oblasti procesů nezatěžujících životní prostředí a procesů pro zpracování odpadních a toxických látek se budeme věnovat studium vlivu acidobazických katalyzátorů na reakce derivátů anthrachinonů, studium katalytických oxidací, organických látek ve vodném prostředí, studium povrchových vlastností oxidačních katalyzátorů na bázi TiO_2 a konečně fotooxidačnímu odbourávání polutantů. Dále bude studována fotokatalytická degradace (toxických) organických i anorganických látek ve vodách, elektrochemické odstraňování dusičnanů a těžkých kovů z vod, nové typy iontoměničových membrán pro perspektivní využití v palivových článcích, matematické modelování elektrochemických systémů. V této souvislosti bude také studována elektrokatalytické aktivita vodivých polymerů modifikovaných platinovým katalyzátorem

V oblasti elektrochemického inženýrství bude studium zaměřeno na přestup hmoty při přirozené konvekci pro objekty s komplexní geometrií, rovnováhy v soustavách omezeně mísitelných kapalin při extrakci minerálních kyselin primárními a terciárními aminy, charakterizaci zeolitických, SiO_2 a kovových mikroporézních vrstev, jejich sorpčních a transportní vlastností, teoretický popis těchto dějů na základě matematických modelů, aplikaci membránových materiálů v katalýze a při separaci plynů a par studium kinetiky katalytické přeměny methanu na vyšší uhlovodíky se zaměřením na dezaktivaci katalyzátorů a způsoby jejího potlačení, studium kinetiky heterogenně nekatalyzovaných reakcí, zachycování sulfanu při vyšších teplotách na oxidických sorbentech

2 Chemie a technologie materiálů pro technické aplikace, ochranu zdraví a životního prostředí

Materiálový výzkum na Fakultě chemické technologie (FCHT) bude i v r. 2001 zahrnovat všechny skupiny materiálů: kovové, anorganické nekovové, polymerní a kompozitní. V souladu s koncepcí výzkumu a s cíli výzkumného záměru Chemie a technologie materiálů pro technické aplikace, ochranu zdraví a životního prostředí (MSM 223100002) budou i v roce 2001 na FCHT v oblasti materiálů řešena témata, která lze rozdělit do tří základních skupin:

- Materiály pro technické aplikace
- Materiály a zdraví člověka
- Materiály a životní prostředí

V jednotlivých skupinách předpokládáme řešení následujících témat:

A. Materiály pro technické aplikace

Vliv stavu povrchu ocelové výztuže na korozní odolnost v betonu, korozní chování alternativních kovových materiálů (korozivzdorné oceli, zinek) v betonu, elektrochemické metody ochrany a monitorování koroze výztuže v betonu, poruchy pasivity ocelí v souvislosti s přestupem tepla a se vstupem vodíku, vývoj nástrojových ledeburitických ocelí s niobem

připravených technologií práškové metalurgie, studium deformací ocelových součástí v automobilovém průmyslu po chemicko-tepelném zpracování, vývoj rychle ztuhlých slitin hliníku vyrobených technologií práškové metalurgie vhodných pro aplikace za zvýšených teplot, vývoj zařízení pro extrémně rychlé tuhnutí kovů, oxidická rafinace surového olova - odstranění Sn, Sb, As, plazmochemické syntézy wolframových prekurzorů pro supertěžké slitiny.

Fyzikální a matematické modelování procesů při tavení skel: sledování interakcí mezi soubory pevných částic nebo bublin a skelnou taveninou, oxidačně-redukční rovnováhy ve sklech a výměna sklovin v tavicích prostorech, systémy identifikace zdrojů bublin v tavicím procesu skel, mechanismus koroze molybdenových elektrod užívaných při elektrickém tavení skla a jeho ovlivnění střídavým proudem, vliv koroze Mo elektrod na vznik krystalických nehomogenit ve sklech, elektrické tavení skel s obsahem PbO nad 30%, vývoj a vlastnosti skel s iontovou vodivostí, vývoj křišťálových a krystalinových sklovin s lepšími užitnými vlastnostmi.

Modelování tvarovacích a nízkoteplotních procesů při výrobě keramiky, kompozitní žárovzdorné materiály s vysokoteplotními vlákny

Vysoce pevné nízkoporézní hydratované anorganické materiály: kyselinová koroze hydratovaných materiálů na bázi cementu; bezsádrovcový portlandský cement na bázi slínku bílého cementu.

Studium přípravy a vlastností polymerních materiálů typu konstrukčních plastů na základě kopolymerů laktamů s nižemolekulárními polybutadieny a směsí polymerů typu polyolefin/elastomer, polyvinylchlorid/kaučuk, polyvinylchlorid/styrenový plast. Studium přípravy a vlastností polyimidů a polymerních membrán jakožto polymerních materiálů pro speciálně náročné aplikace.

Studium fázových rovnováh a konstrukce fázových diagramů v soustavách Bi-Sr-Ca-Cu-O, Hg-Ba-Ca-Cu-O a $\text{Ln}_{1-x}\text{A}_x\text{-MnO}_3$. Studium vlivu kationtových příměsí zejména na transportní vlastnosti těchto supravodivých látek.

Příprava a vlastnosti planárních pasivních, dynamických a aktivních optických vlnovodů v dielektrických amorfních a krystalických materiálech, příprava planárních optických jedno- a mnohavidových vlnovodů, vývoj technologií plazmatické depozice tenkých dielektrických vrstev, laserová ablace a depozice tenkých vrstev anorganických a organických látek s cílem přípravy chemických senzorů.

Měření tepelných kapacit pevných látek. Optimalizace postupů pro detekci a zviditelňování materiálových struktur a jejich poruch. Dielektrické a elektrické vlastnosti polymerních kompozitů

B. Materiály a zdraví člověka

Využití RTG difrakce ve farmacii: strukturní a fázová analýza modifikovaných cyklosporinů, námelových alkaloidů, morfinanů, příp. jiných terapeuticky aktivních sloučenin, řešení vztahu struktura / biologická aktivita.

Mechanismus koroze dentálních slitin na bázi palladium-stříbro-měď, hodnocení vlivu technologie zpracování na korozi dentálních slitin.

Kinetika a mechanismy koroze skel ve vodných roztocích, příprava povrchových vrstev na sklech metodou sol-gel a jejich chemická odolnost

Kinetika a mechanismy nukleace hydroxyapatitu na povrchu bioaktivních materiálů, příprava

bioinertní keramiky na bázi $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$ litím suspenzí, vývoj technologie ATZ keramiky metodou sol-gel, vývoj funkčně gradované keramiky s řízenou pórovitostí.

Studium přípravy a vlastností medicínálně čistých kompozitních materiálů typu silikonový kaučuk/hydrogel.

Modifikované polymery pro tkáňové inženýrství (cévní protézy, léčba popálenin – adheze a růst keratinocytů)

C. Materiály a životní prostředí

Získávání chloridu germaničitého z úlětů po spalování hnědého uhlí, získávání neželezných kovů (Cu, Co, Ni, Zn) z odpadních kovonosných kalů, recyklace cínu z rafinačních produktů po kyslíkové rafinaci surového olova, zpracování hlubokomořských konkrecí s cílem oddělení Fe a Mn od Co, Cu a Ni. Mechanismy degradace kovových materiálů (měď, železo, zlato) na uměleckých památkách vystavených vnějším atmosférickým vlivům a způsoby jejich protikorozi ochrany.

Využití nebezpečných odpadů na bázi oxidů Fe (ocelářenské úlety) jako nové přísady do stavebních hmot

Skla pro fixace radioaktivních odpadů, hnojiva na bázi sklokeramiky s řízeným uvolňováním živin, ekologizace čeření sklovin, reaktivní vypařování těkavých složek ze skloviny.

Modifikace přírodních organických i anorganických materiálů: modifikace vápenných a vápenocementových malt polymerními aditivami, impregnace dřeva polymery, použití polymerních aditiv do minerálních fasádních barev, využití polymerních organokřemičitých sloučenin jako konsolidantů přírodního kamene, omítek, nástěnných maleb. Možnosti čištění památkových objektů a jejich preventivní ochrana s využitím polymerních materiálů. Studium možností nápravy chybné aplikace polymerních látek (jako důsledek nedostatečných technologických znalostí) starších konzervačních zásahů, především u textilu a papíru.

Příprava, charakterizace a využití sloučenin typu hydrotalcitu (katalyticky aktivní materiály a sorbenty), využití kamence hlinito-amonného na komerčně využitelné produkty (oxid hlinitý, zeolit A).

Studium přípravy a vlastností biologicky odbouratelných polymerních materiálů na základě kopolymerů laktamů s aminokyselinami. Prohloubení studia depolymerizace silikonových vulkanizátů, devulkanizace pryže a recyklace polymerních odpadů.

Využití elektronové řádkovací mikroskopie pro hodnocení morfologické kvality stomatálních vosků smrku ztepilého.

3 Studium chemicko-technologických procesů pro ochranu životního prostředí a zpracování paliv

Konkretizace výzkumného záměru FTOP pro rok 2001 vychází z hlavních směrů dlouhodobého záměru FTOP v oblasti vědecké a výzkumné činnosti a z výsledků získaných z jeho dosavadního řešení. Je zaměřena zejména na ochranu životního prostředí a jeho složek, na chemické a energetické využití fosilních paliv a na procesy koroze v energetických zařízeních. V rámci řešení výzkumného záměru budou v roce 2001 řešeny níže uvedené tématické okruhy.

Studium štěpení zbytkových ropných frakcí v atmosféře vodíku. Vliv reakčních podmínek na složení a vlastnosti reakčních produktů.

Oxidační stabilita mazacích olejů, stanovení metodou tlakové DSC. Ověření různých metodik měření, vliv teplotního režimu na vlastní měření a na oxidační stabilitu olejů.

Analýza rizikových heterosloučenin přítomných v emisích ze spalování kapalných a plyných paliv v motorových vozidlech.

Emise ze spalování kapalných a plyných paliv v motorových vozidlech. Sledování účinnosti klasických a speciálních konvertorů výfukových plynů v motorových vozidlech upravených pro spalování zemního plynu.

Fyzikálně-chemické vlastnosti zemních plynů. Měření parametrů a ověřování výpočetních vztahů využívaných při studiu chování reálných plynů.

Nové selektivní adsorbenty pro technologické a analytické aplikace. Zvyšování kapacity uhlíkatých a přírodních adsorbentů.

Ochrana ovzduší. Zplyňování biomasy a studium katalyzátorů pro čištění plynů z tohoto zplyňování. Zvyšování účinnosti odsíření spalin aditivací vypíracích kapalin. Aditivace pevných paliv za účelem snížení tvorby dehtovitých látek. Analýza VOC v ovzduší.

Studium příčin pěnění v aerobních i anaerobních čistírenských procesech a příprava postupů pro jeho eliminaci. Identifikace pěnotvorných mikroorganismů a studium jejich vlastností.

Studium intenzifikace procesu anaerobní stabilizace čistírenských kalů zavedením termofilní stabilizace. Vliv termofilní stabilizace na pěnění anaerobních reaktorů.

Odstraňování těžkých kovů z vod srážecími postupy a adsorpcí na speciálních sorbentech. Jako srážecí činidlo bude použit TMT-15 (trimerkapto-S-triazin) s cílem vymezení optimálních pracovních podmínek srážení ve vztahu k minimálním zbytkovým koncentracím těžkých kovů.

Vývoj a zavedení moderních instrumentálních metod pro analýzu vod.

Úprava vody ionexy. Membránová nanofiltrace - vliv přídavku polyethyleniminů nebo aniontových polyelektrolytů na účinnost odstranění těžkých kovů z vody. Selektivní sorpce oxoaniontů As, Se, Mo a V. Sorpce huminových látek a kovů na jílových materiálech.

Korozně-materiálová a elektrochemická problematika. Studium povrchu kovů pomocí synchrotronového záření, studium ochranných vlastností keramických povlaků na kovech a korozní praskání za vysokých teplot a tlaků. destrukce persistentních

Spalovací procesy. Zplyňování biomasy a katalytická organických látek, spalování odpadů.

Sledování možností zvyšování účinnosti solidifikace průmyslových odpadů hydraulickými pojivky pomocí vhodných aditiv. Sledování vyluhovatelnosti solidifikátů v neutrálním a kyselém prostředí v závislosti na charakteru kontaminantů a množství aditiv.

Analytické a ekotoxikologické hodnocení starých zátěží (skládek a kontaminovaných půd) pomocí instrumentálních metod a testů toxicity.

Izolace a identifikace produktů degradace polychlorovaných bifenylnů aerobními bakteriemi a tkáňovými kulturami vybraných vyšších rostlin.

Ověření spolehlivosti laboratorních ventingových zkoušek na lokalitách kontaminovaných chlorovanými uhlovodíky. V rámci ověření bude prováděno srovnání laboratorních a provozních dat.

Zvyšování účinnosti techniky elektrochemické dekontaminace prostřednictvím chemické předúpravy čištěných zemin za použití anorganických kyselin a organických komplexotvorných činidel. Kombinace techniky elektrokinetické dekontaminace s technikou promývání zemin.

4 Zlepšování kvality potravin a zajištění optimální výživy obyvatelstva

Výzkum v roce 2001 bude realizován ve čtyřech hlavních směrech:

A. Výživová a senzorická jakost potravin

Výzkum bude orientován na hlavní živiny a další biologicky aktivní složky potravin a na studium mechanismů reakcí probíhajících v potravinách s ohledem na jejich výživovou a senzorickou hodnotu (zejména Maillardova reakce a její regulace, oxidace lipidů a její inhibice, hydrolytické reakce lipidů a možnosti prevence, vznik žádoucích a nežádoucích aromatických látek). Pozornost bude rovněž věnována možnostem restituce či fortifikace potravin významnými limitujícími výživovými faktory, snižování jejich energetické hodnoty a zvyšování celkové kvality.

B. Technologická jakost potravin

Výzkum bude orientován na progresivní technologické postupy a nové technologie použitelné při výrobě hlavních potravinářských komodit, náhradu tradičních surovin, zajištění správných výrobních postupů, stabilitu výrobků a její regulaci a na predikci údržnosti potravin.

C. Hygienicko-toxikologická jakost potravin

Výzkum bude orientován na ukazatele jakosti, ochranu konzumentů při dietární expozici cizorodým látkám, přírodní toxiny v potravinářských surovinách, endogenní kontaminanty vznikající při zpracování potravin, látky z chemizace zemědělství, výluhy z obalových materiálů, mechanismy průniku a distribuce kontaminujících látek ze složek ekosystému v potravním řetězci člověka a na eliminaci identifikovaných zdrojů kontaminace.

D. Potravinářská analytika

Výzkum bude orientován na vývoj a validaci stávajících analytických metod, vývoj, validaci a zavádění nových metod s důrazem zejména na metody průkazu netradičních surovin, průkaz falšování potravin, detekci žádoucích a nežádoucích enzymových aktivit, metody senzorické analýzy a instrumentální metody orientované na chuť, vůni a texturu potravin, metody stanovení patogenních mikroorganismů, moderní metody ultrastopové analýzy pro identifikaci a kvantifikaci organických kontaminantů. Pozornost bude věnována také mezinárodní harmonizaci analytických metod, především v rámci EU.

Priority jednotlivých hlavních směrů výzkumu budou v souladu s plánem a dosud získanými výsledky orientovány do jednotlivých okruhů:

A. Výživová a senzorická jakost potravin

Reakce neenzymového hnědnutí

V modelových systémech bude studován vznik a vlastnosti senzoricky aktivních produktů reakcí, zejména aromatických a barevných látek (melanoidinů) za různých experimentálních podmínek (pH, teplota, doba reakce), včetně metod jejich izolace, identifikace a studia reakčních mechanismů.

Oxidační a hydrolytické reakce lipidů

Výzkum se bude zabývat oxidačními a hydrolytickými reakcemi výrobků tukového průmyslu a lipidového podílu potravin obecně a možnostmi inhibice těchto reakcí. Bude se jednat i o studium dalších významných reakcí lipidů souvisejících s kvalitou potravinářských výrobků (hlavně jejich stabilitou, vlastnostmi organoleptickými, přijatelností), včetně technologických aspektů a příslušné metodiky.

Změny a speciace minerálních látek

Výzkum se bude zabývat studiem obsahu minerálních látek, formami jejich výskytu a distribucí (speciační analýzou) ve vybraných potravinách (zejména cereáliích) a dále možnostmi fortifikace některých potravin deficitními prvky.

Senzoricky aktivní látky

Studovány budou aromatické a další sensoricky aktivní složky potravin (významných komodit) ovlivňující pozitivně i negativně chuť, vůni a barvu. Studována bude struktura těchto látek, mechanismy jejich vzniku a možnosti regulace, včetně praktických postupů použitelných v příslušných technologiích.

Biologicky aktivní látky

Studovány budou pro lidské zdraví prospěšné složky významných druhů zeleniny, ovoce a dalších rostlinných materiálů, které mají použití jako složky lidské výživy.

B. Technologická jakost potravin

Maso a masné výrobky

Výzkum bude zaměřen na možnosti zvyšování údržnosti a kvality masa a masných výrobků ve výrobě a distribuční síti, optimalizace procesů a metody hodnocení této jakosti.

Mléko a mléčné výrobky

Výzkum se bude zabývat možnostmi zvyšování jednotlivých aspektů jakosti mléka, sýrů a mléčně kysaných výrobků a metodami hodnocení této jakosti. Součástí bude výzkum orientovaný na významné druhy mléčných bakterií.

Cereální výrobky a cukrovinky

Výzkum bude orientován na možnosti zvýšení kvality cereálních výrobků a některých druhů cukrovinek a na metody hodnocení jejich jakosti.

Ovoce a zelenina

Výzkum bude soustředěn na možnosti zvyšování kvality konzervářských výrobků, na nové technologické postupy prodloužení jejich skladovatelnosti a na metody a postupy průkazu falšování výrobků.

Produkty kvasného průmyslu

Výzkumu bude orientován zejména na možnosti zvyšování kvality piva, droždí a některých dalších produktů kvasných výrob.

C. Hygienicko-toxikologická jakost potravin

Antinutriční a přirozené toxické látky

Výzkum bude zaměřen na studium významných skupin těchto látek, zejména antinutričních látek olejnin a luštěnin, glykoalkaloidů brambor a glukosinolátů brukvovitých rostlin (zelenin, olejnin) za podmínek skladování a zpracování. Součástí bude sledování změn těchto látek v souvislosti se změnami nutriční a sensorické jakosti.

Aditivní látky

Výzkum bude zaměřen na možnosti, způsoby a další aspekty používání potravinářských aditiv v různých komoditách potravinářské průmyslu, zejména konzervačních prostředků k prodloužení trvanlivosti výrobků ze surovin živočišného původu a na imobilizace konzervačních prostředků na polymerní obalové materiály.

Kontaminanty v potravním řetězci

Pozornost bude nadále věnována nejvýznamnějším skupinám kontaminantů potravin, zejména polychlorovaným bifenylym, aromatickým uhlovodíkům, mykotoxinům, reziduím persistentních a moderních pesticidů a některým dalším skupinám kontaminantů (ftalátům, estrogením látkám, syntetickým analogům pižma). Výzkum bude orientován na vyšetření potravinářských a jiných materiálů a na testování různých technik přípravy vzorků k analýze, optimalizaci, validaci a zavádění metod (zejména multireziduálních) do praxe, stanovení nízkých hladin kontaminantů v různých biotických maticích, studium možností využití různých monitorů kontaminace, sledování vlivu technologií a skladování na hladiny kontaminantů.

Systém HACCP v potravinářském průmyslu

Pozornost bude věnována systému HACCP v různých oborech potravinářského průmyslu.

D. Potravinářská analytika

Metody hodnocení výživové, sensorické a technologické jakosti

Pro hodnocení výživové, sensorické a technologické jakosti budou vypracovány, validovány a do praxe zaváděny vhodné metody biochemické, mikrobiologické, sensorické a instrumentální analýzy.

5 Uplatnění progresivních inženýrských procesů v potravinářských technologiích s cílem vyššího zhodnocení surovin a odpadů.

Program výzkumného záměru je rozdělen do 5 tematických okruhů, jež vycházejí ze zadání výzkumného záměru. Obsah níže uvedených tematických okruhů plně pokrývá plánované úkoly a rozpracovanost jednotlivých úkolů dává předpoklady k jejich celkovému úspěšnému vyřešení.

A. Separální procesy

Membránové procesy: Separace a čištění cukerných roztoků a extraktů rostlinných polysacharidů (inulin, pektin) pomocí mikro- a ultrafiltrace na keramických membránách ("crossflow filtration") a dutých vlákních, aplikace v biotechnologiích, v bioreaktorech, při zahušťování a odsolování extraktů nanofiltrací.

Cílová etapa 2001: aplikace keramických membrán, fouling, studium nanofiltrace.

Kontinuální preparativní chromatografická separace SMB (Simulated moving bed): dělení sacharidů, dělení složek po fermentaci, purifikace bílkovin, dělení enantiomerů. Fakulta vyvíjí vlastní zařízení.

Cílová etapa 2001: dělení sacharidů a cukerných alkoholů (fruktosa, laktosa, sorbitol).

Elektrodialýza: izolace a zkoncentrování bioproduktů (organické kyseliny).

Adsorpční procesy: Odstraňování plynných polutantů a biosorpce těžkých kovů v pivovarsko-sladařském průmyslu.

Cílová etapa (polutanty) 2001: Experimentální zjištění základního reálného spektra plynných odparů různých provozů, analytické vyhodnocení, využitelnost,

Cílová etapa (biosorpce) 2001: Srovnání sorpčních vlastností dostupných materiálů.

B. Tepelné procesy a vysoký tlak

Mikrovlnný ohřev. (MO)

Cílová etapa 2001: využití MO při hydrotermické úpravě potravin (luštěniny, rýže).

Extruzní a expanzní technologie: studium nutričních změn a fyzikálních vlastností při extruzi.

Cílová etapa 2001: Stanovení závislosti intenzity zbarvení a aromatu výrobků a inaktivace lipoxygenasy na receptuře a podmínkách extruze.

Vysoký hydrostatický tlak a adiabatický ohřev.

Cílová etapa 2001: Tlakové ošetření potravin, studium fyzikálně-chemických jevů a změn vlastností potravin při vysokém tlaku.

C. Řízení procesů

Expertní řízení (metodologie předpovědi technologických vlastností a průběhu děje):

Pivovarská technologie.

Cílová etapa 2001: Sběr technologických dat v pivovaru, měření NIR spekter.

Chladicí/mrazírenský řetězec.

Cílová etapa 2001: Studium vlivu podmínek chladírenského skladování na kvalitu minimálně opracovaných potravin

Simulace, modelování a bilanční výpočty technologických procesů zahrnující i systematické budování a doplňování databáze látkových vlastností surovin, mezivýrobků a potravin (2001).

Počítačové řízení procesů a bioprocusů.

Cílová etapa 2001: Řízení filmové odparky, fermentace, řízení bioprocusů, produkce biomas a bioethanolu.

D. Metody na kontrolu technologické jakosti

Metoda NIR: Zavádění rychlých a nedestruktivních zkoušek pro hodnocení kvality, aplikace v cereální technologii a cukrovinkářství, pro hodnocení technologické kvality pivovarských a cereálních surovin.

Cílová etapa 2001: aplikace NIR-polarimetrie pro přímou kontrolu složení kapalných opticky aktivních substrátů bez předchozího chemického čiření (např. surové extrakty sacharidů, využití při řízení procesů, odstranění spotřeby čiridel s obsahem těžkých kovů)

Reologie: Hodnocení technologické kvality cereálních surovin podle reologických charakteristik, doplnění viskozimetrem Haake RheoStress.

Cílová etapa 2001: oscilační rheometrie, měření viskoelasticity

Počítačová analýza obrazu: měření distribuce částic, on-line řízení procesu krystalizace, hodnocení technologické kvality cereálních surovin (granulačního spektrum mlýnských

výrobní) a škrobů, aplikace v cukrovinkářském a tukovém průmyslu.

Cílová etapa 2001: studium aplikačních možností, ověřovací zkoušky.

Vývoj spektrálních a chromatografických metod (GC, HPLC), kapilární elektroforézy a izotachoforézy.

V oblasti HACCP bude sledován vliv technologických operací při výrobě dětské výživy na hladiny reziduí pesticidů a dalších rizikových kontaminantů, monitorování kritických bodů v režimu HACCP a dále vzniku polycyklických aromatických uhlovodíků a jejich derivátů v potravinách při aplikaci různých zpracovatelských technologií.

Cílová etapa 2001: monitoring incidence jednotlivých skupin pesticidů v surovinách.

E. Vyšší zhodnocení odpadů a meziproductů potravinářských technologií a využití surovin potravinářského průmyslu pro nepotravinářské aplikace.

Studium problematiky přípravy a uplatnění bílkovinného koncentráту ze syrovátky po výrobě přírodních sýrů (WPC).

Cílová etapa 2001: studium funkčních vlastností koncentrátů.

Využití nadbytečné produkce řepkového oleje pro emulgované a pokrmové tuky:

Cílová etapa 2001: interesterifikace řepkového oleje, konverze alkylesterů s ethylenoxidem a vybranými polyoly.

Využití přebytků přírodních sacharidů z obilí a cukrovky pro výrobu přísad do paliv (bioethanol) a zejména zpracování a využití výpalků na krmiva.

Cílová etapa 2001: další možnosti fermentace výpalků, filmové odpařování a krystalizace výpalků.

Využití nadbytečné produkce řepkového oleje (derivátů) a sacharosy (cukroesterů, cukroglyceridy) na výrobu tenzidů (biologicky rozložitelné složky práškových a tekutých detergentů, náhrada fosfátů v pracích práškách a prostředcích na mytí nádobí).

Cílová etapa 2001: vývoj prostředků a studium jejich účinnosti.

Vývoj biodegradabilních obalů na bázi polysacharidů.

Cílová etapa 2001: možnosti hydrofobizace obalů na bázi škrobu a celulosy, ověření jejich biodegradovatelnosti.

6 Biochemické, mikrobiologické a molekulárně genetické studie vytvářející teoretický základ pro moderní biotechnologie

A. Studium struktury a funkce biomolekul

Vliv sacharidové části glykoproteinů na funkci glykoproteinu

Bude pokračovat výzkum vlivu sacharidových složek na konformaci a stabilitu glykoproteinů; měly by být publikačně zhodnoceny pokusy týkající se glukosa oxidasy, invertasy, fetuinu a orosomukoidu. Podobnými experimentálními přístupy bude studován vliv myristylace a biologicky relevantních bodových mutací na konformaci a stabilitu strukturních proteinů retrovirů.

Studium glykosylace a transglykosylace

Budeme pokračovat ve studiu glykosidas, α -glukosidas a β -galaktosidas, a to zejména jejich schopnosti přenášet glykosidový zbytek (glukosyl ev. galaktosyl) na cukerné i necukerné akceptory (transglykosylace). Ke studiu budou použity volné i imobilizované enzymy. Imobilizace bude prováděna bioenkapsulací ev. koacervací. Výsledky transglykosylace volnými a bioenkapsulovanými enzymy budou porovnávány a optimalizovány.

Postranslační fosforylace proteinů a peptidů

Pozornost bude věnována dalšímu zlepšení metodologie izolace a charakterisace fosfopeptidů získaných hydrolysou studovaných fosfoproteinů (např. dentinu) a vlivu fosforylace na aktivitu vybraných enzymů.

Enzymoimunoanalýza haptenu

V programu výzkumu na r. 2001 je příprava imunogenů z peptidových sekvencí vybraných povrchových proteinů *Listeria monocytogenes* a imunisace králíků připravenými imunogeny. Získané polyklonální protilátky budou dále charakterisovány a purifikovány.

Fosfolipidy v rostlinném metabolismu lipidů a fosfolipidů

Již dříve byla potvrzena existence více forem rostlinných fosfolipas D, jednak vázaných na membrány, ale i rozpustných v cytosolu, další rozlišení je dáno rozdílnými požadavky na koncentraci vápenatých iontů a přítomnost fosfatidylinositol bis-fosfátu (PIP₂). V tomto roce se zaměříme na studium membránově vázaných forem PLD a jejich lokalizaci na jednotlivých typech membrán v různých stádiích vývoje semen a rostlin. (Pokusíme se také získat specifické imunoserum pomocí antigenů vytypovaných ze známých AA sekvencí PLD z jiných zdrojů).

Vliv vybraných vnějších faktorů na aktivitu technologicky zajímavých enzymů

Program projektu v roce 2001 bude vycházet z výsledků dosažených v předcházejících letech řešení. Metodika studia vlivu vysokého hydrostatického tlaku bude použita pro další potravinářsky významné enzymy a skupiny enzymů jako jsou proteasy, askorbát oxidasa, polyfenol oxidasa a další. Kromě studia vlivu aditiv a modifikací na stabilitu enzymů při působení vysokého hydrostatického tlaku bude studována kinetika vybraných enzymových reakcí za působení vysokého hydrostatického tlaku.

Biologická aktivita derivátů sacharidů, azasacharidů a nukleotidů

Budou studovány metody přípravy a stereochemie azacukrů jako syntonů pro azaanalogy nukleosidů. V přípravu C-nukleosidů bude pozornost věnována klíčovému meziproductům a jejich následujícím cyklizačním reakcím. Budou dokončeny stereochemické studie derivátů pyrazolidinu anelovaného k furanosovému kruhu a zakončena studie konfigurační řady laktamů aminodeoxyaldonových kyselin. Pomocí matematického modelování bude studována konformace tetrosidů. Dále budou porovnány různé parametrizace silových polí a empirické Karplusovy rovnice.

B. Využití biologického potenciálu mikroorganismů a rostlin v průmyslových a environmentálních technologiích

Mikrobiální degradace organických polutantů

V roce 2001 budeme pokračovat ve studiu metabolismu PCB u bakterií a rostlin: substrátová specifita enzymu bifenyldioxygenasy u *Pseudomonas putida* 2, identifikace degradačních

produktů dichlorobifenylů (u bakterií a rostlin), studium vlivu huminových kyselin na regulaci bakteriální degradace PCB, studium enzymových systémů rostlinných buněk (peroxidasa, cyt P 450) pomocí induktorů a inhibitorů sledovaných enzymových systémů. Příprava transgenních rostlinných buněk vnesením bakteriálního genu bphC do rostlin, konkrétně klonování *ábphC* prostřednictvím *Agrobacterium tumefaciens* do rostlin, ověření úspěšnosti transformace. Studium chlorbenzoátové dráhy odbourávání PCB: určení genů zodpovědných za jednotlivé enzymové aktivity této dráhy. Klonování genů ortho-chlorbenzoátového operonu z bakteriálního kmene izolovaného z půdy kontaminované polychlorovanými bifenyly. Klonovaný operon společně s regulačními oblastmi bude následně sekvenován a geny ortho-chlorbenzoátového metabolismu exprimovány v expresním vektoru. V případě úspěšné exprese je naším cílem identifikace exprimovaného proteinu a sledování regulace celého metabolismu.

Mikrobiální biomasa pro sorpci těžkých kovů

V roce 2001 budou pokračovat experimenty věnované bioakumulaci kadmia geneticky modifikovanými bakteriálními kmeny. Důraz bude kladen na přechod k environmentálně přijatelným bakteriím (od *Escherichia coli*, která byla použita jako modelový mikroorganismus) k *Pseudomonas putida* či *Ralstonia eutropha*.

Mikroorganismy v biodegradačních a dekontaminačních procesech

V oblasti bioremediačních postupů budou práce v roce 2001 navazovat na výsledky předcházejících let řešení záměru. Budou získávány podklady pro optimalizaci funkce biofiltrů pro odstraňování těkavých polutantů a zápachajících látek z prostředí potravinářských a dalších výrobních. Budou hledány vhodné formy mikroorganismů pro degradaci různých skupin látek včetně biodegradovatelných plastů v návaznosti na další projekty řešené na ústavu.

Vývoj nových biodegraderů

Modulace bioremediačních aktivit mechano-fyziologickými vlivy procesu mikrobiální kolonizace pevných povrchů. Biologické odbourání substituovaných aromátů a polyaromátů: vliv aditiv; vliv indukované změny vnitrobuněčné hladiny klíčového enzymu. Reaktorová verifikace aplikovatelných poznatků. Fyziologické a funkční aspekty aplikace biofiltrů v dekontaminaci odpadních plynů. Genetická modifikace produkčních kmenů mléčných bakterií; testy fyziologických vlastností GMO.

Studium toxicity látek pomocí buněk

V rámci výzkumu zaměřeného na monitorování negativního vlivu xenobiotik a sloučenin z nich vznikajících v prostředí mikrobiální degradací budeme pokračovat ve stanovení toxicity degradačních produktů juvenoidů a dalších škodlivých látek uváděných uměle do životního prostředí. Toxicita bude vyhodnocována pomocí lidských buněk ve tkáňové kultuře (konkrétně HeLa buňky).

C. Genové inženýrství v biotechnologiích

Rozvoj technik genového inženýrství

Bude pokračovat studium domén zprostředkujících primární interakce při tvorbě retrovirových kapsid. Budou vytvořeny nové deleční konstrukty jejichž schopnost tvořit kapsidy nebo tubulární útvary v *E. coli* bude analyzována pomocí elektronového mikroskopu.

Funkční genomika vybraných genomů

V roce 2001 bude pokračovat studium genů bioremediačních drah u *Rhodobacter capsulatus*, *Rhodopseudomonas palustris* a *Alcaligenes* sp. A8. Bude sekvenován megaplasmid *Alcaligenes*, na němž je kódována degradace chlorbenzoátů. Bude dále studována metabolická dráha syntézy polyhydroxyalkanoátů, u nichž je snaha vyvinout z nich biodegradovatelné hmoty použitelné jako obalový materiál. Bude studována možnost použití defektního fága integrovaného v chromosomu *R. capsulatus* pro funkční genomiku bakterií.

Mikrobiální kmeny pro potravinářské technologie

Pokus o izolaci acidocinu CH5, produkovaného *Lactobacillus acidophilus* CH5, hledání genů zodpovědných za jeho produkci.

Studium citlivosti kmenů *Lactococcus lactis* subsp. *lactis* vůči internímu a externímu působení bakteriocinů.

Charakterizace a izolace antifungálně aktivních metabolitů kmene *Lactobacillus rhamnosus* VT1.

7 Reakčně-transportní chemicko-inženýrské systémy a jejich dynamické chování, modelování a řízení chemických a biotechnologických procesů

A. Chemicko-inženýrské reakčně-transportní systémy, modelování systémů a experimentální verifikace

Výzkum dynamiky a metod řízení heterogenně-katalytických reaktorů a adsorpčních zařízení, zvláště zaměřený na využití monolitických reaktorů.

V roce 2001 bude pokračovat experimentální studium dynamického chování monolitických reaktorů nyní se zaměřením na vícesložkové reakční směsi (kyslík, dusík, oxidy uhlíku a dusíku a uhlovodíky). Dříve vytvořené programové prostředky budou přizpůsobeny pro popis konkrétních experimentálních situací. Budou použity alternativně jedno- a dvou- fázové, prostorově jedno- a dvou- rozměrné, dynamické a stacionární modely. Bude studován zejména vliv teplotního režimu na konverzi oxidů dusíků. Vedle programů vyvinutých na pracovišti bude požíván simulační program firmy CFD Reserch Corporation CFDRC ACE+ a to zejména pro popis hydrodynamiky silně neisotermního toku reakční směsi. Budou zahájeny práce na přestavbě experimentální aparatury jak z důvodu nových požadavků tak z důvodu značného mechanického a chemického opotřebení některých klíčových částí (např. systém pohyblivých termočlánků).

Identifikace charakteru toku fází zařízením v souvislosti s návrhem provozní velikosti a optimalizací provozních podmínek zejména u procesů využívaných při ochraně životního prostředí.

Měření integrálních charakteristik pro modelování přenosu hmoty v mechanicky míchaných systémech plyn-kapalina: Pokračování ve studiu vlivu geometrických parametrů míchacího zařízení na přestup hmoty mezi plynem a kapalinou. Bude provedeno porovnání přenosových charakteristik axiálních a radiálních míchadel z hlediska příkonu disipovaného ve vsádce. Porovnání bude provedeno pro různé typy vsádek jako jsou vsádky koalescentní, nekoalescentní, viskózní a vsádky s různým povrchovým napětím.

Studium vlivu fyzikálních vlastností fází na intenzitu mezifázového přenosu hmoty, metody použití absorpčních dat pro modelování rektifikačních kolon.

Základní otázky mechanismu mezifázového transportu hmoty v disperzích kapalina-plyn: Na

této problematice bude výzkum pokračovat i v tématu disertační práce. Bude měřena intenzita přestupu hmoty z bublin plynu dispergovaných v kapalině při různých intenzitách disipace energie. Bude užívána chemická metoda měření mezifázové plochy a koeficientu přestupu hmoty. Průměr bublin je určován jednak z měření zádrže a plochy disperze a jednak fotografováním disperze. Měření jsou prováděna ve vsádkách s různou viskozitou a povrchovým napětím.

Studium integrálních charakteristik toku fází a mezifázového transportu hmoty ve věžových výměnících hmoty (plněné absorpční a destilační kolony):

Budou měřeny hodnoty HETP pro systémové výplně BX a NT-700 s použitím systémů metanol-etanol, etanol-voda. Budou měřeny absorpční transportní charakteristiky (koeficienty přestupu hmoty na straně kapaliny a na straně plynu, zádrž kapaliny, tlakové ztráty) pro systémovou výplň BX.

Modelování a simulace stupňových a spojitých separačních procesů.

Budou studovány možnosti využití programového systému gPROMS ke stacionárnímu a dynamickému modelování stupně rektifikační kolony s možným výskytem dvou kapalných fází.

Budou zkoumány možnosti netradiční charakterizace ropných frakcí pomocí vybraných reálných složek vycházející z matematického modelování získávání destilačních křivek TBP a D86 s cílem využít získaná složení náhradní charakterizační směsi při modelování separačních zařízení zpracovávajících tyto frakce.

Studium hydrodynamických charakteristik v jedno- dvou- a třífázových modelových reaktorech, makroinstabilní chování.

Výzkum a modelování průběhu homogenizace kapalně pevné fáze, stupně suspendace pevné fáze a zádrže plynu ve třífázových vícemíchadlových reaktorech v závislosti na geometrických parametrech míchaného systému. Bude sledován vliv počtu a typu míchadel, vzájemná vzdálenost a umístění míchadel, výška míchané vsádky.

Studium příkonových charakteristik míchaného zařízení ve dvou- a třífázovém systému (kapalina, pevná zrnitá fáze, plyn) pro různé procesní podmínky: počet a typ míchadel (SCABA a velkoplošná hydrofil), koncentrace a druh pevné zrnité fáze a průtok plynu. Bude instalováno a testováno zařízení pro torzní měření příkonu míchadel.

Modelování dynamiky polymeračních procesů v heterogenních reaktorech, využití mikroreaktorů.

Studium dynamiky a stability polymeračních procesů v heterogenních katalytických reaktorech pro výrobu komoditních polyolefinů. Prostředky matematického modelování bude zkoumán vliv reakčních podmínek, aktivace a deaktivace katalyzátoru na stabilitu průmyslových reaktorů v různých režimech provozu včetně dynamických přechodů v průběhu najíždění a sjíždění procesu a během procesu změny kvality polymerního produktu.

Vliv elektrického pole na průběh reakcí a separaci produktů v chemických, biochemických a biologických systémech - multifunkční reaktory.

Experimentální práce a modelování v oblasti mikroreaktorů bude jednak zaměřeno na ověření funkce „elektrolytické diody a transistoru“, jednak bude pokračovat modelování DNA čipů. Elektrolytická dioda a transistor - bude zahájena výstavba experimentálního zařízení pro studium chování elektrolytické diody a transistoru a elektrických obvodů obsahujících tyto prvky. Bude vyvíjen matematický software pro systematickou analýzu stacionárního a dynamického chování elektrických integrovaných obvodů s elektrolytickými diodami a

transistory.

Bude studován (numericky i experimentálně) vliv intenzity elektrického pole na průběh vybraných enzymových reakcí a růst mikrobiálních buněk v kapilárních mikroreaktorech s enzymy, resp. buňkami imobilizovanými do hydrofilních syntetických nebo přírodních polymerních gelů.

B. Modelování, simulace a řízení chemicko-technologických a biotechnologických procesů a systémů, informační technologie a inženýrské informační systémy v chemii a potravinářství

Koncepční procesní design a modifikace stávajících chemicko-technologických a příbuzných procesů z hlediska legislativních a jiných aktuálních požadavků pro bezpečnost, ekologii a úspory energií.

Výzkum v oblasti koncepčního designu bude zaměřen na rozhodovací proces pro výběr technologie pro odstraňování těkavých organických látek v kombinaci regenerace a spalování. Výsledky budou srovnávány s tzv. „nejlepšími dostupnými technologiemi“ (angl. Best Available Technologies). Konečným cílem je zjišťování inkrementálních nákladů v závislosti na požadavcích vyplývajících z ekologických norem týkajících se emisí z procesů. Pro aparáty zajišťující v procesu tyto funkce a pro potřebné energie a materiály bude zpracována ekonomická evaluace na úrovni přesnosti nutné pro rozhodování.

Expertní a znalostní systémy pro podporu modelování, metody umělé inteligence.

Metody umělé inteligence lze aplikovat v celé řadě významných oblastí chemického inženýrství. Konkrétně budou využívány prostředky poskytované teorií neuronových sítí k vytváření empirických modelů sloužících jako náhrada složitých rigorózních modelů, které nelze použít pro modelování nebo řízení procesů v reálném čase nebo které jsou obtížně sestavitelné. Tato metodika bude využita pro adaptivní řízení nestacionárně provozovaných katalytických reaktorů a bioreaktorů a pro apriorní určení počtu fází ve vícefázových systémech.

Vývoj diskrétních optimalizačních metod pro řešení úloh z oblasti umělé inteligence, a to zejména pro učení hierarchických a samoorganizujících se neuronových sítí.

Fraktální modelování, konstrukce exaktních matematických modelů generujících fraktální množiny, studium iteračních procesů, heuristický přístup k modelování fraktálů.

Modelování, optimalizace a řízení hmotných toků v logistických řetězcích chemických a potravinářských výrobků.

Výzkum bude zaměřen na analýzu nákupních a distribučních řetězců chemických a potravinářských podniků ve vazbě na řízení výroby a jejich modelování. Vytvořené modely budou východiskem pro simulaci jejich funkce v různých vnějších podmínkách, zejména různých typech poptávky. V roce 2001 budou studována následující témata:

- Metody plánování a operativního řízení chemických a potravinářských výroby ve vazbě na požadovanou úroveň dodavatelských služeb velkých distribučních řetězců.
- Analýza trendů požadavků na služby, zejména termíny vyřizování objednávek, velikost dodávek, balení výrobků.
- Pojistná zásoba, její lokalizace v řetězcích, stanovení její optimální úrovně a vlivu na úroveň poskytovaných služeb.

- Formulace jednoduchých simulačních modelů hmotných toků ve vybraných logistických řetězcích.
- Využití modelů pro ověřování variant řízení zásob v řetězcích.
- Analýza vlivu změn výrobního programu na výrobní a dodavatelské výkony.
- Podmínky implementace moderních systémů řízení jakosti v chemických a potravinářských výroбах.

Metody sběru, analýzy a zpracování časových řad digitalizovaných záznamů chování chemicko-inženýrských systémů.

Analýza hlavních komponent a užití Wavelet transformace pro číslicové zpracování signálů, jejich dekompozice a rekonstrukce, aplikace na biomedicínské signály a obrazy.

Užití fuzzy logiky ke zpracování obrazů, spojení exaktních algebraických postupů s konkrétními heuristikami pro zpracování obrazu formulovanými v přirozeném jazyce a vývoj fuzzy metod pro zvýšení vypovídací schopnosti obrazové informace, aplikace na biomedicínské signály a obrazy.

Vývoj nových metod pro optimalizaci umělých neuronových sítí a algoritmizace lineárních a nelineárních metod modelování signálů z hlediska jejich užití při segmentaci, klasifikaci a predikci časových řad, aplikace na spotřebu energie.

Aplikace vybraných metod statistických a metod číslicového zpracování signálů a obrazů pro analýzu, filtraci, segmentaci, kompresi a interpolaci družicových snímků a časových řad znečištění životního prostředí.

Návrh nových metod sběru dat a aplikace informačních technologií a počítačové grafiky pro vzdálenou analýzu signálů a obrazů.

Chemické senzory a aplikace senzorů pro monitorování a řízení procesů.

Výzkum v oblasti polovodičových senzorů:

Příprava a studium vlastností senzorů na bázi organických polovodičů, syntéza dalších ftalocyaninů ze skupiny lanthanidů, posouzení využitelnosti ftalocyaninů k detekci nízkých koncentrací plynů a par (citlivost, selektivita, stabilita elektrických parametrů). Zvýšení selektivity optimalizovaných senzorů (dotace, depozice povrchové selektivní membrány). Výzkum elektrického charakteru přechodu Pt-elektroda – aktivní vrstva.

Výzkum v oblasti pelistorových senzorů:

Zdokonalení technologických postupů přípravy pelistorových senzorů a aparatury pro testování senzorů. Výzkum senzorů planárního typu a planárního pelistorového pole s cílem zvýšení selektivity senzoru a odolnosti proti působení katalytických jedů (organokřemičité sloučeniny).

Výzkum v oblasti optických senzorů:

Studium vlastností optických vláknových senzorů a průzkum aplikačních možností pro měření vybraných technologických veličin (teplota, tlak, průtok, složení). Studium vlivu fyzikálních polí na fotoluminiscenci s možností optické detekce. Studium efektů doprovázejících ultrazvukovou kavitaci (sonoluminiscence).

Modelování a řízení chemicko-technologických a biotechnologických procesů a systémů.

Budou vyvíjeny vyšší algoritmy řízení založené na využití databází technologických a fyzikálně-chemických dat a prvků umělé inteligence. Budou konkrétně aplikovány na řízení

čtvrtprovozní odparky popř. dalších zařízení v laboratořích VŠCHT.

Pokračování ve vytváření matematických modelů vybraných technologických procesů (zejména ve spolupráci s ústavy FPBT) se zaměřením na jejich využití pro predikci a řízení procesů. Jejich průběžné přenášeni do výuky.

Bude dokončena celková modernizace Laboratoře řízení bioprocésů spočívající v instalaci a zprovoznění vnější mikrofiltrační jednotky k fermentoru a instalaci a on-line připojení HPLC chromatografu a v přístrojové a programové modernizaci řídicího systému fermentoru využívající programovatelného automatu a programového vybavení Concept a FactorySuite2000.

Bude pokračovat výzkum využití metod umělé inteligence v oblasti řízení bioprocésů jako nelineárních systémů s proměnnou strukturou. Převážně půjde o tzv. „soft computing“ metody a jejich aplikace při modelování a řízení uvedených procesů. Výzkum bude konkrétně směřován na znalostní modelování a řízení procesu čištění průmyslových odpadních vod termofilními směsnými populacemi mikroorganismů a procesu zpracování potravinářských průmyslových odpadů pomocí autotermní termofilní aerobní degesce. (Téma řešeno v rámci mezinárodního grantu EU v 5. RP Enhanced, Intelligent processing of Food and Related Wastes using Thermophilic Populations.) Dále bude pokračovat výzkum biodegradace fenolu v odpadních vodách s cílem optimalizace procesu.

Metody plánování, rozvrhování a řízení vsádkových chemických výrob.

V roce 2001 bude vývoj metod plánování a rozvrhování vsádkových výrob rozšířen jednak o složitější typy výrobních linek (větvení, recykly), jednak se budou vyvíjet i algoritmy umožňující uvažovat nepermutační rozvrhy. Bude studován vliv přechodů mezi výrobou jednotlivých produktů na trvání celého krátkodobého plánu nebo rozvrhu. Dále budou vyvíjeny algoritmy pro úpravy a modifikace krátkodobých plánů výroby tak, aby co nejvíce odpovídaly termínovým požadavkům zákazníků. Cílem vyvinutých algoritmů je umožnit efektivnější využívání výrobního zařízení a zvýšení účinnosti využití surovin, energií, vody a dalších zdrojů.

Další oblastí činnosti je modelování a optimalizace logistických řetězců. Práce budou zaměřeny na urychlení a vylepšení práce vyvinutých algoritmů pro návrhy optimálních přepravních tras produktů a pro optimální lokalizaci distribučních skladů jako prvků logistických řetězců. Předpokládá se vytvoření maker v prostředí MS Visual Basicu for Application a MS Excelu tak, aby tyto algoritmy bylo možné rutinně používat v rámci malých a středních podniků.

Aplikace vypracované metodiky řízení vsádkových výrob včetně původních postupů založené na využívání ISA normy S88.01 na praktickou realizaci prototypu řídicího systému InBatch (FactorySuite 2000) procesu separace Nystatinu.

C. Nelineární dynamika chemických a biologických systémů

Kvalitativní a kvantitativní analýza vývoje prostorových polí chemických a fyzikálních veličin popisujících stav systému.

Kvalitativní analýza dynamických systémů vychází ze struktury a rozložení invariantních množin (např. stacionární body, periodické orbity) ve fázovém prostoru a studuje jejich závislost na parametrech pomocí bifurkační analýzy. Budou nadále rozvíjeny metody pro nalezení speciálních invariantních množin (např. prahové množiny excitabilních systémů) a formulovány jako softwarové aplikace.

Kvantitativní určení dynamiky zahrnuje nejen rozčlenění parametrického prostoru na oblasti s rozdílnou dynamikou, ale také detailní určení charakteru dynamiky uvnitř každé parametrické podoblasti. K tomuto účelu slouží především metoda kontinuace, popřípadě metoda přímých dynamických simulací. Již vyvinutý software umožňující řešit počáteční i okrajové úlohy pro systémy obyčejných popř. parciálních diferenciálních rovnic bude nadále rozvíjen, např. budou vytvořeny další moduly pro okrajové a integrální úlohy, moduly pro určení stability nehomogenně rozložených koncentračních polí u pohybujících se chemických vln.

Obecné analytické a počítačově-numericke metody analyzy komplexnich nelinearnich dynamickych systemu.

Metody studia pohybujících se chemických vln spojitým prostředím s reakcí, difuzí a migrací budou nadále rozvíjeny. Problém nalezení vlnových řešení reakčně-difuzních rovnic, která odpovídají solitární vlně (fronta nebo puls) může být formulován jako okrajová úloha s tzv. projekčními okrajovými podmínkami řešená metodou vícenásobné střelby. Takto nalezené řešení lze pomocí metody kontinuace získat ve formě parametrické závislosti. Dříve započatý vývoj souboru programů pro analýzu solitárních a periodických vln bude dále rozvíjen, se zaměřením na robustnost numerických postupů a bude opatřen analýzou stability pulsních vln a front.

Pokračovat ve studiu zig-zag dynamických systémů, zejména důkazu konvergence příslušné BCH formule a dále zig-zag DS s náhodně alternujícími poli.

Budou studovány LDS (Lattice Dynamical Systems) jako diskrétní verze PDR reakčně-difúzního typu, zejména „shadowing problem“ je velmi důležitý, protože zkoumá ty rysy LDS, které mají vztah k „robustním“ vlastnostem LDS a za druhé zkoumá korektnost výpočtů ve specifických případech.

Vývoj efektivnich numerickych metod pro simulaci a analyzu dynamickych modelu popsaných zejména soustavami parciálních diferenciálních rovnic.

Budou probíhat práce jak v oblasti teoretické analýzy matematických modelů tvořených parciálními diferenciálními rovnicemi, tak v oblasti vývoje efektivních algoritmů v prostředí jazyků FORTRAN a C, tak v prostředí vyšších jazyků typu MATLAB, za využití komerčních numerických knihoven. Budou dále doplňovány zakoupené komerční simulační programy CFDRC a MicroCosmos o další možnosti, zejména v oblasti mnohasložkových chemických systémů s mnoha chemickými reakcemi. Bude rozvíjena spolupráce se softwarovou firmou CFD Research Corporation v této oblasti. Budou vyvinuty speciální algoritmy využívající adaptivní prostorové sítě k matematickému modelování systémů s extrémně vysokými hodnotami gradientů některých veličin lokalizovanými v relativně velmi malé části studovaného systému. Tento úkol bude řešen v návaznosti na experimentální studium elektrochemických systému typu „elektrolytická dioda a transistor“ v spolupráci s pracovišti v Anglii a Maďarsku. Bude rozvíjena hardwarová základna našeho pracoviště, jak ve formě sítě pracovních stanic UNIX, tak ve formě sítě Windows98/NT.

Budou vyvíjeny a testovány vhodné numerické metody pro problémy, kde transportní rovnice nedefinují toky složek explicitně, např. v Maxwell-Stefanově popisu transportu. Původní numerické metody pro simulaci prostorově 2D a 3D problémů budou postupně paralelizovány tak, aby došlo ke snížení nároků na výpočetní čas a paměť na paralelních architekturách.

Studium excitabilnich chemickych a biochemickych systemu.

Dynamika odezev chemických excitabilních systémů (bromičnan-siřičitan-ferokyanid, chloritan-jodid) na vnější periodické přísady různých reaktantů a meziproductů bude využita

k analýze reakčního mechanismu autokatalytických excitabilních reakcí. Pomocí metody stechiometrických sítí a metody kategorizace bude určena úloha reagujících složek v mechanismu a typ mechanismu determinující typ excitability. Perturbačních experimentů bude využito pro vytvoření obecného postupu konstrukce modelu složitého nelineárního systému s využitím teorie stechiometrických sítí. Modely uvedených experimentálních systémů budou studovány s využitím bifurkační analýzy. Dále budou studovány dynamické režimy vznikající v soustavách oscilujících a excitabilních jednotek (reakčních cel), které komunikují prostřednictvím vzájemné výměny hmoty.

Šíření excitačních odezev na vnější perturbace (chemické vlny) je jedním ze paradigmatických problémů spojených s přenosem informace v samoorganizujících se systémech (tedy i v živých organismech). Rychlost transportu reakčních složek mezi jednotkami je ovlivněna elektrickým polem, tj. do popisu systému musí být (kromě molekulární difuze mezi jednotkami) zahrnut jednosměrný transport elektricky nabitých složek v elektrickém poli. Vliv intenzity elektrického pole na dynamické režimy v soustavě a způsoby jejich ovlivňování budou zkoumány v systémech chemických i biologických a bude zahrnut vliv stochastických fluktuací intenzity elektrického pole na dynamiku soustavy.

Bude pokračovat experimentální a modelovací výzkum šíření pulsních vln chemoatraktantu cAMP v excitabilním prostředí tvořeném buňkami hlenky *Dictyostelium discoideum* a jeho ovlivnění vnějším elektrickým polem a také bude studovány účinky elektrického pole na plasmodia jiného mikroorganismu *Physarium polycephalum*.

Budou studovány dynamické režimy vznikající v prostorově distribuovaných reakčně-difusních systémech nastavených prostřednictvím vybraných parametrů do excitabilního režimu, ve kterých je umístěna jedna (nebo i více) autonomně oscilující oblast (pacemaker).

Vývoj a aplikace technik pro charakterizaci chaotických časových a časoprostorových dat. Bude dále rozpracována aplikace Karhunenovy – Loévy dekompozice na prostorově dvou- a třírozměrná data (jak experimentální tak i numericky simulovaná) s využitím komerčně dostupných programovacích prostředí (MATLAB) s následující rekonstrukcí chaotických atraktorů a výpočtem jejich invariantů, dimenze, entropie a Ljapunovových exponentů.

8 Metody a prostředky chemické a fyzikálně-chemické analýzy vlastností a chování bioinženýrských a chemicko-inženýrských systémů

A. Teoretické metody výpočtu nebo odhadu vlastností systémů

Metody chemické termodynamiky

Aplikace klasické termodynamiky na vícesložkové fázové a chemické rovnováhy v širším teplotním rozsahu, zejména pak v soustavách výrazně kineticky determinovaných a pro aplikace v materiálovém inženýrství

Vytvoření souboru efektivních a robustních algoritmů pro výpočet termodynamických veličin, transportních veličin a řešení nejdůležitějších termodynamických dějů pro technologicky významné plyny.

Uzavření problematiky modelování fázové rovnováhy voda-alkany v podkritické, kritické i nadkritické oblasti.

Vývoj metodologie výpočtu chemické rovnováhy v uzavřených a polootevřených

systemech. Aplikace nových metod při řešení konkrétních technologických úloh, ve kterých kondenzované fáze jsou svým způsobem dominantní.

Rozvoj simulačních metod a teoretických postupů ve statistické termodynamice tekutin

Výpočet struktury a termodynamických vlastností směsí modelových molekulárních tekutin pomocí Ornsteinovy - Zernikeho integrální rovnice.

Statisticko-termodynamická a kvantově-chemická studie termodynamických vlastností jednoduchých reálných tekutin pomocí simulací Monte Carlo se započtením tříčásticových interakcí.

Studium možnosti existence fázové rovnováhy tekutina-tekutina v modelových koloidních soustavách.

Nevratná racionální termodynamika chemicky reagujících směsí

Studium kritéria rovnováhy na fázovém rozhraní ve směších pomocí tenzoru chemického potenciálu (Eshelbyho tenzoru). Tento tenzor je zobecněním skalárního potenciálu v netekutinách. Hodláme se zabývat jeho vlastnostmi v nereagujících a reagujících směších.

Vývoj metod pro výpočet a odhad fyzikálně-chemických vlastností systémů na základě spojení teoretických modelů a generalizace experimentálních dat

Práce na databázi termochemických veličin v ideálním plynném stavu. Výpočty termochemických vlastností iontů za vysokých teplot.

Počítačové metody zpracování experimentálních dat

Metody a algoritmy pro zpracování experimentálních dat

Posuzování vypovídací hodnoty výsledků kombinovaných vícerozměrných statistických metod s malým počtem pozorování.

Vývoj a aplikace moderních statistických metod a grafických a interakčních metod pro zadávání a zobrazování numerických dat.

Počítačová simulace složitých chemických, ekologických a technologických systémů.

Matematické modelování procesu termoinaktivace enzymů a tepelné degradace mikroorganismů s ohledem na procesy sterilace v potravinářství, zdravotnictví a farmacii.

Vývoj metod sloužících k analýze a předpovědi procesu dekontaminace s předem určenou pravděpodobností rizika defektu.

Vývoj statistických metod sloužících k vyhodnocení experimentu v medicíně.

Matematické modelování kinetiky transportu v krevním řečišti.

Pro potřeby analýzy rozsáhlých dat bude vypracována metoda hlavních komponent kombinována s fuzzy analýzou. Dále budou zkoumány vlastnosti fuzzy shlukovací analýzy pro různá statistická rozdělení rozsáhlých dat.

Kompilace a kritické vyhodnocování fyzikálně-chemických dat

V současné době je dokončena kompilace a kritické zpracování dat o stavovém chování čistých kapalných uhlovodíků, sloučenin C-H-O a sloučenin C-H-halogen

(vyjma látek používaných jako chladiva). Pro rok 2001 je plánováno dokončení kompilace dostupných dat pro stavové chování čistých kapalin obsahující vedle uhlíku, vodíku a kyslíku ještě dusík a síru a kapalin, které nepatří do žádné z předchozích skupin. Bude pokračováno v kompilaci dat pro stavové chování čistých plynů a par pro vybrané skupiny látek a prováděno zpracování dat o celé fluidní oblasti (včetně fázové rovnováhy kapalina-pára) do formy stavové rovnice.

Bude prováděna aktualizace databáze kalorimetricky měřených tepelných kapacit čistých látek v kapalném stavu. Předpokládá se příprava 2. doplňku souboru kriticky zhodnocených doporučených dat.

Databáze limitních aktivitních koeficientů bude rozšiřována jak o kriticky evaluovaná data, tak o přídavné moduly umožňující grafickou prezentaci uložených dat a výpočet dalších termodynamických vlastností odvozených od limitních aktivitních koeficientů resp. jejich teplotních závislostí.

Bude provedeno shrnutí a kritický rozbor metod predikce slučovací tepel pevných oxidů - a to jak metod příspěvkových tak metod korelačních. Předpokládá se vytvoření programu pro automatizovaný odhad této termodynamické vlastnosti. Stávající databázová aplikace materiálového inženýrství MSE DATA bude převáděna do grafického prostředí a rozšířena o data látek ze skupiny směsných oxidů, s ohledem na jejich využití v oblasti supravodičů.

B. Experimentální metody

Experimentální studium vlastností systémů

Fyzikálně-chemická analýza vlastností čistých látek a směsí, fyzikálně-chemické vlastnosti čistých látek a směsí, fázové rovnováhy a separační procesy

Těžištěm výzkumu skupiny bude i nadále experimentální studium termodynamických vlastností vysoce zředěných roztoků neelektrolytů. Pokračovat budou práce na zdokonalování a vývoji nových technik ke stanovení limitních aktivitních koeficientů, distribučních koeficientů plyn-kapalina a rozpustností organických látek ve vodě. Pro stanovení rozpustností vysoce hydrofobních látek ve vodě se počítá se zavedením nové experimentální techniky využívající kapalinové chromatografie. Dále bude rovněž pokračovat zkoumání systémů se silnými vodíkovými vazbami s využitím NMR spektroskopie – zkoumán obecný vztah mezi NMR a termodynamickými vlastnostmi (směšovací enthalpie, rovnováha kapalina – pára). Počítá se s rozšířením na směsi dichlormethanu s vybranými kyslíkatými rozpouštědly.

Experimentální studium teplotní závislosti rovnováhy kapalina-kapalina v ternárních systémech; systematické studium rovnováhy kapalina-kapalina ve vodných systémech; další zdokonalení zkonstruované aparatury pro objektivní měření vzniku zákalu a vývoj metody pro zjištění teplotní závislosti vzájemné rozpustnosti složek v ternárních systémech. V případě, že bude dostatek finančních prostředků na pořízení titračního mikrokcalorimetru, budou provedena testování kalorimetru měřením komplexačních tepel u standardních systémů.

Studium reaktivních systémů měřením rovnováh pevná látka-kapalina; hledání organických sloučenin v pevné fázi.

Dělení směsí plynů a par polymerními membránami, přičemž výzkum bude

zaměřen na stanovení koeficientů propustnosti a difuze par organických látek v polymerních, kopolymerních a kompozitních membránách. Pro analýzu velmi nízkých koncentrací par organických látek v plynech bude uveden do provozu hmotnostní spektrometr (quadropol) pro přímou analýzu permeátu spojený se zařízením s novou permeační celou. Pervaporační dělení směsí kapalin polymerními membránami bude orientováno na dělení binárních směsí organických látek. Stanovení kinetiky sorpce par v polymerech bude zaměřeno na stanovení sorpčních a difuzních koeficientů par čistých organických látek v polymerech pomocí Mc Bainových spirálních vah. Ke stanovení sorpčních koeficientů směsí par organických látek bude zkonstruována nová aparatura.

Studium povrchových a mezifázových jevů v tříložkových systémech.

Měření tenze par derivátů benzenu statickou metodou v oboru environmentálně relevantních teplot. Příprava doporučených dat pro predikci osudu látek v prostředí.

Stanovení tepelných kapacit čistých organických látek v tuhé a kapalné fázi (podpůrná data pro popis rovnovážné křivky tuhá látka-kapalina a kapalina-pára).

Testování ebulliometrické aparatury pro měření tenze par v oboru středních tlaků.

Pokračování v systematickém experimentálním studiu volumetrických vlastností zředěných vodných roztoků organických látek (deriváty benzenu) metodou vibrační densimetrie za vysokých teplot a tlaků. Analýza výsledků z hlediska struktury látek.

Stopová prvková analýza

Značení monoklonálních látek radionuklidy holmia a yttria.

Studium komplexace sloučenin Ho a Y s ligandy na bázi porfyrinů.

Studium různých komplexních sloučenin rhenia pomocí vybraných elektromigračních metod.

Návrh metod analytické kontroly radiochemické čistoty radionuklidů Y a Sr při aplikaci generátoru Y/Srov.

Využití kapalinové, popř. gelové chromatografie při studiu komplexů radionuklidů vhodných pro přípravu radiofarmak.

Výběr systému pro chromatografické dělení radionuklid – ligand – protilátka pro analytickou kontrolu vybraných radiofarmak.

Studium migrace některých kontaminantů v půdách a retardačních vlastností vybraných přírodních sorbentů.

Základní ověřovací práce na výzkumu elektrodepozice ve spojení s elektrotermickou atomizací AAS (ETAAS). Budou zahájeny práce na kvalifikaci software pro automatický režim a provedeno základní srovnání metody s ICP-MS. Cílem základních prací je validace metody pro stanovení některých kovů v čistých solích.

Chemická a strukturní molekulová analýza

Spektroskopie VCD:

Rozšíření měření do oblasti CH, OH, NH valenčních vibrací.

Rozpracování metodiky teplotních měření, studium mezimolekulárních interakcí chirálních látek, teplotně citlivé interakce.

Komplexní počítačová analýza VCD spekter malých až středních molekul, odhad geometrie chirálních látek.

Spektroskopie NMR

NMR studium konformačního a komplexačního chování sirných derivátů calix[4]arenů, tj. studium komplexace různých konformerů téhož kalixarenu s alkalickými kovy, porovnání pro různé substituované kalixareny.

DNMR a konformační studie u derivátů furanosy, cukerných laktamů a laktonů, tj. měření ^1H , ^{13}C i 2D spekter v širokém rozmezí teplot, včetně nízkoteplotních měření, výpočty aktivačních parametrů konformačních výměn, výpočty převažujících konformací Karplusovou rovnicí.

Studium homo- a heteroasociací na bázi vodíkové vazby u dvou typů systémů: alkohol + inertní rozpouštědlo nebo silný proton-donor (chloroform, halothan) + kyslíkatý proton-akceptor s cílem porovnat termodynamické veličiny pro různé modely molekulové asociace takto získané s hodnotami změřenými běžnými fyzikálně-chemickými metodami (rovnováha kapalina-pára, kalorimetrie, chromatografie).

Ramanova spektroskopie

Studium struktury elektropolymerizovaných a sebeskladných vrstev na povrchu zlata metodami Ramanovy spektroskopie a mikroskopie.

Spektroskopické studium složení nových sorbentů pro kapalinovou chromatografii na bázi modifikovaného silikagelu.

Spektroskopické studium jehličí smrku ztepilého.

Analýza vzorků kožních melanomů ozářených protonovými svazky (ve spolupráci se skupinou prof. J. de Boera, Ludwig-Maximilians-Universität München).

Plynová, resp. kapalinová chromatografie ve spojení s hmotnostní spektroskopií

Rozpracování metodiky studia biologických materiálů, konkrétně epikutikulárního vosku smrku ztepilého.

Studium specifických mezimolekulárních interakcí

Studium specifických mezimolekulárních interakcí (systémy silných proton donorů s kyslíkatými a dusíkatými rozpouštědly jako proton akceptory a dále vodné roztoky modelových hydrofobních látek s přísadkou třetí složky jako modifikátoru (guanidin hydrochlorid, močovina). Mezinárodní spolupráce s Universidad Nacional Autónoma de México.

Vývoj senzorů a sorbentů na bázi molekulárního rozpoznávání

Příprava makrocyclů a dalších derivátů (1,1'-binaftoly, Trögerovy báze, vybrané alkaloidy), které budou použity pro přípravu membránových ISE pro vybrané analyty. Po derivatizaci (anilinem, pyrolem) budou použity pro přípravu polymerních elektrod. Testování bude provedeno na nově vyvinutém přístroji naší konstrukce, které umožní testování a statistické vyhodnocení velkých sérií připravených elektrod.

Sledované analyty budou anionty zajímavé z hlediska biochemických procesů a monitorování životního prostředí, cukerné deriváty, aminokyseliny, tensidy, chlorované fenoly a polyaromáty. Bude dále rozvíjena možnost využití SAM makrocyklických sloučenin pro analytické aplikace.

Připojením fluorescenčně aktivní signální části (porfyrin, safyryn, kalixfyrin) k rozpoznávací části Trögerovy báze, steroidní deriváty, heliceny, binaftoly, imunologicky důležité oligosaccharidy a oligopeptidy budou připraveny fluorescenční sensory pro biologicky významné analyty.

Biosensory na bázi distamycinu a oligonukleotidových derivátů pro cílové sekvence DNA budou připraveny jako ISE, a to jak polymerního (oligonukleotidové konjugáty s pyrolem) tak membránového typu (oligonukleotidové konjugáty se steroidy a polyaromáty). Zde bude sledován způsob ukotvení polárních oligonukleotidů v PVC membráně.

Dva typy nových sorbentů pro enantioselektivní HPLC separaci budou navrženy a testovány. Jedná se o sorbenty nekovalentně pokryté chirálním selektorem, obvykle komerčně dostupným a dále o kovalentní připojení chirálních selektorů na bázi 1,1'-binaftolů, chirálních makrocyklů, helicenů, chirálních polyanilinů, alkaloidů, Trögerových bazí. Připravené chirální selektory budou studovány pomocí CD a VCD spekter.

Budou připraveny nové ve vodě rozpustné makrocyklické deriváty a testovány jako nové fotosensitizery pro fotodynamickou terapii. Biolokalizace bude studována pomocí kombinace extrakce-UV-VIS a Ramanovy spektroskopie. Změny po osvětlení laserem příslušné vlnové délky budou sledovány s cílem zjistit mechanismus vedoucí k degradaci nádorových buněk.

Metrologie v chemii

Rozvoj primárních metod měření

Společně s ČMI Brno bude realizován národní standard pro měření pH. Coulometricky bude ověřena funkce vodíkové elektrody. Dále budou realizovány primární standardy měření pH.

Budou připraveny referenční materiály s biotickou matricí a různými hodnotami měřených veličin. Bude vytvořen experimentální kalibrační model „in situ“. Z primárních metod měření bude pro tuto práci použita metoda ICP/MS.

Měření teploty a tlaku s použitím instalovaného zařízení pro kalibrace laboratorních teploměrů v rozsahu 20 až 250°C. Modifikace zejména v oblasti software.

Validace primárních analytických metod a postupů v oblasti analýz anorganických a organických analytů, včetně odhadu kombinované nejistoty

Bude vytvořen validační plán pro data s Poissonovým rozdělením. Bude vytvořen program pro automatickou validaci analytických metod.

Rozvoj stávající experimentální základny

Zdokonalování přístrojové techniky pro studium fázových rovnováh

Rozvoj přístrojové techniky v oblasti měření zákalu (rovnováha kapalina-kapalina) a

měření limitních aktivitních koeficientů.

Vývoj unikátních zařízení v oblasti kalorimetrie a stavového chování v rozšířených oblastech teplot a tlaků

V oblasti vibrační densimetrie doplnění zařízení o plynový regulátor zpětného tlaku pro oblast kolem 30 MPa.

Vývoj a instalace techniky z oblasti metrologie (metrologie teploty, tlaku a dalších veličin).

Další rozvoj pracoviště pro kalibrace teploměrů.

V oblasti informačních technologií

- a) Dokončení modernizace počítačové sítě školy, zahájení hardwarové modernizace centrálních serverů VŠCHT Praha.
- b) Modernizace softwarového, případně i hardwarového vybavení poslucháren pro výuku informačních technologií v souladu s vývojem a s cílem zpřístupnit studentům nejaktuálnější poznatky a dovednosti.
- c) Zpřístupňování informačních zdrojů studentům i zaměstnancům prostřednictvím moderních informačních technologií. Jedná se o poskytování odborných chemických informací, rozšiřování přístupu k informacím nechemické povahy, např. z oblasti matematického modelování, technické kybernetiky.
- d) Rozšiřování a zdokonalování obsahu Internetových stránek školy.
- e) Vytváření podmínek pro zdokonalování propagační a informační činnosti školy posilováním personálního obsazení příslušného odborného útvaru školy s následným rozšiřováním jeho aktivit.
- f) Využití informačních technologií pro doplňkovou činnost školy.

V oblasti mezinárodní spolupráce ve vzdělávání

- a) Zavedení evropského kreditního systému v rámci programu SOCRATES/ERASMUS ve zbývajících studijních programech v souladu s uzavřeným kontraktem.
- b) Aktualizace a dokončení brožury *Katalog předmětů s ECTS informačním balíkem* zahrnutím zbývajících studijních programů v souladu s uzavřeným kontraktem.
- c) Realizace co největšího počtu studentských mobility v programu SOCRATES/ERASMUS při zachování přijatelné výše studentského grantu.
- d) Aktivní zapojení do evropského programu Leonardo da Vinci zaměřeného na studentské mobility v oblasti odborného vzdělávání.
- e) Aktualizace informací o studiu v anglickém jazyce zejména na Internetové stránce školy.
- f) Realizaci odborné výuky v anglickém jazyce pro zahraniční studenty programu SOCRATES/ERASMUS.
- g) Příprava kurzů pro zahraniční organizace nebo zahraniční studenty samoplátce.

V oblasti ubytovacích a stravovacích zařízení, péče o studenty

- a) Stabilizace organizační strukturu SUZ v areálu kolejí Kunratice po uzavření majetko-právních vztahů a dosažení dohody o provozování areálu.
- b) Vytváření organizačních podmínek a získávání dat pro kvalifikované informační a poradenské služby pro studenty.

V oblasti investic

- a) Podniknout ve spolupráci se smluvními partnery (TIMON Bauregie, MŠMT a ČVUT Praha) všechny kroky k dodržení harmonogramu výstavby na Vítězném náměstí podle Rámcové smlouvy z roku 1999, tj. zahájit vlastní stavební práce na pozemku v druhém čtvrtletí 2001, neprodleně po získání stavebního povolení.
- b) Pokračovat v rekonstrukcích studentských laboratoří a poslucháren.
- c) Dokončit modernizaci počítačové sítě v budovách A, B a C včetně kompletní přípravy připojení nového objektu na Vítězném náměstí.
- d) Zahájit rekonstrukci technologické haly v budově B.
- e) Nadále směřovat většinu investičních prostředků do pořízení a obnovy přístrojového vybavení pro výuku a výzkum s prioritou velkých investic MS a ESCA. Za klíčovou investici v r. 2001 pokládáme pořízení hmotnostního spektrometru s vysokým rozlišením (HR MS) do Centrálních laboratoří VŠCHT. Další investicí celoškolského významu je NMR spektrometr, na jehož inovaci sdruží tři fakulty naší vysoké školy investiční prostředky. Zároveň byl do Fondu rozvoje vysokých škol podán návrh projektu se žádostí o částečnou podporu této inovace.
- f) V návaznosti na ukončení přesunů vlastnických práv k majetku v areálu kolejí na Jižním městě
 - realizovat novou areálovou telefonní ústřednu
 - zahájit investiční akci „Zateplení objektů kolejí“
 - realizovat propojení ústředního vytápění objektu Volha s ostatními objekty, rekonstruovat stoupačky ústředního topení.