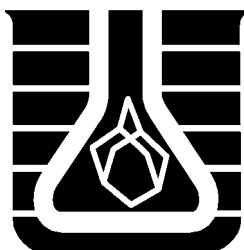


Vysoká škola chemicko-technologická v Praze



VŠCHT PRAHA

Aktualizace dlouhodobého záměru pro rok 2003

**Praha
29. května 2002**

Vysoká škola chemicko-technologická
v Praze

veřejná vysoká škola

Aktualizace dlouhodobého záměru pro rok 2003

Předkládá
doc. Ing. Vlastimil Růžička, CSc.
rektor

Schváleno Akademickým senátem VŠCHT Praha
dne 28. května 2002

Projednáno Vědeckou radou VŠCHT Praha
dne 23. května 2002

V Praze dne 29. května 2002

OBSAH

vzdělávání	1
výzkum a vývoj	3
informační technologie	5
mezinárodní spolupráce ve vzdělávání	6
ubytovací a stravovací zařízení, péče o studenty	6
investice	6
příloha	8

Aktualizace dlouhodobého záměru VŠCHT Praha pro rok 2003

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 ke stanovenému termínu 31. května 2002 aktualizaci svého dlouhodobého záměru pro rok 2003.

Kmenový materiál - Dlouhodobý záměr VŠCHT Praha - byl předložen v roce 1999.

Předkládaná aktualizace VŠCHT Praha zohledňuje i zveřejněnou aktualizaci dlouhodobého záměru MŠMT pro rok 2003.

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

- 1) VŠCHT Praha v souladu s požadavky zákona o vysokých školách v oblasti harmonizace vysokoškolského vzdělávání v Evropě v duchu Boloňské deklarace a Pražského komuniké
 - a) předloží k akreditaci nový návrh strukturovaného studia ve všech studijních programech uskutečňovaných fakultami VŠCHT Praha
 - b) navrhované studijní programy budou koncipovány tak, aby umožňovaly zvýšení počtu studentů bakalářského studia při zachování vysoké kvality absolventů magisterského studia
 - c) při přípravě studijních programů bude úzce spolupracovat s dalšími vysokými školami s cílem sblížení navrhovaných programů a tím umožnění snadnější mobility studentů po absolvování bakalářského stupně studia
 - d) zvýšený důraz bude kladen na výchovu k samostatné tvůrčí práci studentů například formou projektové výuky a zapojení do vědecké činnosti ústavu

- e) návrh strukturovaného studia bude plně kompatibilní s ECTS kreditním systémem ve všech studijních programech a zaměří se na využití jeho předností ve strukturovaném studiu včetně uznávání studia v zahraničí nebo jeho části
 - f) při přípravě studijních programů bude vycházet také z poznatků a informací získaných od významných průmyslových zaměstnavatelů absolventů VŠCHT Praha a z výsledků průzkumu organizovaného mezi absolventy VŠCHT Praha
 - g) bude i nadále rozšiřovat nabídku výuky v anglickém jazyce v oborových předmětech jak povinně volitelných tak volitelných
 - h) bude rozšiřovat mobilitu studentů i akademických pracovníků zvyšováním počtu výjezdů v rámci programů Socrates - Erasmus, Leonardo da Vinci a bilaterálních smluv se zahraničními vysokými školami.
- 2) V přijímání uchazečů o studium bude udržovat počet přijatých a do 1. ročníku magisterských studijních programů zapsaných studentů.
 - 3) Bude nadále zlepšovat personální a materiální předpoklady ke zkvalitňování akreditovaného studijního programu Specializace v pedagogice. V této oblasti bude úzce spolupracovat s PedF UK, ČVUT Praha a dalšími vysokými školami.
 - 4) Bude pokračovat v tvorbě digitálních učebnic a dalších studijních materiálů, multimediálních vzdělávacích pomůcek a databází v elektronické formě, dostupných na síti vysoké školy jako součást zvyšování zájmu o kombinovanou formu studia
 - 5) Bude i nadále pokračovat v inovaci a rozvoji laboratoří studentů, aby studenti již během studia měli možnost samostatně pracovat na špičkových laboratorních přístrojích. Zároveň bude pokračovat v inovacích pracovišť pro praktickou výuku studentů bakalářského studijního programu Specializace v pedagogice, určeného pro vzdělávání učitelů odborných předmětů na středních školách.
 - 6) V oblasti celoživotního vzdělávání bude
 - a) pokračovat v dlouholeté úspěšné realizaci dlouhodobých a krátkodobých programů rekvalifikačního, specializačního a inovačního charakteru,
 - b) nadále pořádat Universitu třetího věku, kde se mimo již nabízených programů s chemickou, potravinářskou, biochemickou a environmentální tematikou zaměříme na rozšíření nabídky vyučovaných programů zejména do oblasti moderních informačních technologií,
 - c) podporovat vznik nových programů pro zajištění vzdělávání pracovníků veřejné správy. V této oblasti naváže spolupráci s orgány územní samosprávy, kde vytipuje možné oblasti, kde by VŠCHT Praha mohla nabídnout vhodné vzdělávací programy,
 - d) se zaměřovat rovněž na další vzdělávání absolventů středních škol, umožňující jejich lepší uplatnění na trhu práce.
 - 7) V oblasti uplatnění informačních technologií se zaměří na další rozšiřování počítačové sítě. Bude zajišťovat jak vznik dalších počítačových center v budovách VŠCHT Praha tak rozšiřování počítačové sítě do ubytovacích kapacit vysoké školy za účelem zvýšení přístupnosti počítačové techniky studentům nižších ročníků s časově neomezeným přístupem pro jejich samostatnou práci.
 - 8) Dále bude podporovat již realizované environmentální vzdělávání formou zařazených témat o životním prostředí a udržitelném rozvoji do předmětů, které tvoří společný základ

studentů ve všech studijních programech uskutečňovaných VŠCHT Praha a jejími fakultami.

- 9) Bude dále rozvíjet informační systém ve vzdělávací činnosti pro učitele, studenty a uchazeče o studium. Zde bude pokračovat v implementaci a rozvoji počítačového systému Studium, který doplní o další moduly umožňující přístup pomocí počítačových sítí a který bude důsledně využívat k přípravě flexibilních studijních programů, vytváření rozvrhu, přihlašování studentů na předměty a zkoušky.
- 10) Ve větší míře bude využívat moderních informačních technologií k přípravě a vyhodnocování ankety studentů při hodnocení kvality pedagogické činnosti s cílem zrychlení vyhodnocení jejích výsledků.

V oblasti výzkumu a vývoje

- 1) Výzkum a vývoj na VŠCHT Praha bude i v roce 2003 probíhat v souladu s dlouhodobým záměrem školy. K vytváření větších vědeckých týmů pod jednou střechou, které je v tomto dlouhodobém záměru deklarováno, chceme konkrétně přispět těsnější spoluprací s výzkumnými pracovníky jiných organizací, zejména chemických ústavů AV ČR a dalších výzkumných ústavů chemického a potravinářského zaměření. Předpokládá se těsnější spolupráce při podávání grantových přihlášek zejména do GA ČR a GA AV ČR, ale také při zapojení do mezinárodních grantových úkolů řešených především v 6. RP.
- 2) Budeme usilovat o založení a rozjetí činnosti společného pracoviště VŠCHT Praha a Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR s názvem „Laboratoř molekulové spektroskopie vysokého rozlišení“, které by mělo vzniknout na VŠCHT za finanční účasti UFCH JH AV ČR.
- 3) I nadále bude probíhat činnost výzkumného centra LN 00B142 „Výzkumné centrum pro komplexní zpracování ropy“, jehož činnost byla zahájena v roce 2000. VŠCHT Praha je nositelem tohoto výzkumného centra a jeho vedoucím je Doc. Ing. Josef Koubek, CSc. Počítá se také s účastí pracovníků školy na činnosti dalších výzkumných center, na kterých se podílí VŠCHT Praha jako spolunositel. Jedná se o následující výzkumná centra:
 - a) LN 00A032 „Struktura a dynamika komplexních molekulových systémů a biomolekul“
 - b) LN 00A079 „Centrum integrované genomiky“
 - c) LN 00B030 „Centrum pro molekulární a genovou biotechnologii“
- 4) V oblasti personálního zajištění výzkumu budeme usilovat o zvýšení počtu vysoce kvalifikovaných pracovníků (zejména docentů a profesorů) na řešení výzkumných záměrů a grantových úkolů. Navrhujeme takové úpravy požadavků pro habilitační řízení a řízení na jmenování profesorem, které by umožnily diferencovaný přístup podle jednotlivých oborů a také s přihlédnutím k věku uchazeče. Cílem tohoto opatření je snížení průměrného věku nově se habilitovaných docentů a nově jmenovaných profesorů při udržení jejich vysoké odborné úrovně.
- 5) V oblasti mobility pracovníků ve výzkumu a vývoji chceme podpořit zejména větší mobilitu studentů doktorských studijních programů. Jako povinnou součást jejich studijních plánů chceme zařadit stáž mimo VŠCHT na pracovištích AV ČR, jiných

výzkumných ústavech či průmyslových firmách, nebo partnerských pracovištích v zahraničí. Pobyt mimo VŠCHT budou organizovány tak, aby v jejich průběhu student mohl dále pracovat na řešení své doktorské práce a výsledky získané během pobytu mimo VŠCHT tvořily část doktorské práce. K finanční podpoře těchto pobytů mimo VŠCHT Praha budou ve zvýšené míře využívány především evropské programy na podporu mobility studentů Socrates/Erasmus a Leonardo da Vinci a finanční prostředky spolupracujících firem.

- 6) Mezinárodní spolupráci ve výzkumu a vývoji chceme zintenzivnit zakládáním pracovišť zapojených do mezinárodních výzkumných programů. Konkrétním příkladem takového pracoviště je již zmiňovaná Laboratoř molekulové spektroskopie vysokého rozlišení. Předpokládá se, že v této laboratoři, která bude zapojena do struktury evropských laboratoří tohoto druhu, budou pracovat také výzkumní pracovníci a studenti ze zahraničí. Budeme také usilovat o vyšší zapojení pracovníků školy do mezinárodních výzkumných projektů řešených především v rámci 6. RP a dalších podobných programů. Na úrovni vedení školy hodláme přijmout taková opatření, která by usnadnila pracovníkům školy podávání přihlášek do těchto programů a zpracování všech podkladů vyžadovaných jako součást přihlášek.
- 7) V oblasti informační struktury a informačních technologií chceme zpracovat přehledy publikační činnosti pracovníků školy podle jednotlivých kategorií v elektronické podobě takovým způsobem, který by umožňoval vyhledávání podle různých kritérií. Budeme vyžadovat odevzdávání doktorských prací a habilitačních prací nejen v tištěné podobě, ale také v elektronické podobě na CD. Výsledky řešení jednotlivých výzkumných záměrů budou přístupné na webových stránkách školy.
- 8) Základní činnost pracovníků školy v oblasti výzkumu bude zaměřena na řešení výzkumných záměrů, grantových projektů a řešení výzkumných projektů pro průmyslové partnery. V této posledně jmenované oblasti se chceme obrátit především na velké průmyslové firmy s nabídkou projektů, které jsme v rámci spolupráce schopni řešit.
- 9) Řešení výzkumných záměrů bude vycházet z jejich základní struktury a zaměření uvedených v dlouhodobém záměru. Aktualizace výzkumné náplně jednotlivých výzkumných záměrů na rok 2003 (poslední rok jejich řešení) je uvedena v příloze.
- 10) Investiční záměry školy v oblasti přístrojového parku budou rovněž vycházet z příslušné kapitoly dlouhodobého záměru. V roce 2003 bychom rádi pořídili následující přístrojovou techniku vyšší ceny:

a) NMR spektrometr pracující na frekvenci 600 MHz	cca 30 mil. Kč
b) rentgenový monokrystalový difraktometr	cca 12 mil. Kč
c) termováhy s napojením na hmotnostní spektrometr	cca 5,5 mil. Kč
d) DSC kalorimetr	cca 2,2 mil. Kč
e) Analyzátor koncentrace biomasy BIOMASS MONITOR 214M	720 tis. Kč
f) Multifunkční vědecký mikroskop včetně možnosti pozorování v IR oblasti,	1 mil. Kč
g) Autosampler pro HPLC s chlazením vzorků Waters 717	500 tis. Kč
h) UV-VIS spektrofotometr s DAD detektorem	450 tis. Kč

Dále hodláme modernizovat následující přístrojové vybavení:

a) rozšířit NMR spektrometr DRX 500 o 4. frekvenční kanál	cca 0,9 mil. Kč
b) upgrade spektrometru AMX3 400	cca 4 mil. Kč

V oblasti informačních technologií

- 1) Pokračovat v zavádění systému čipových karet na VŠCHT Praha s cílem vytvoření integrovaného systému pro identifikaci studentů a zaměstnanců, kontrol vstupu a ovládání samoobslužných systémů.
- 2) Modernizovat hardwarové a softwarové vybavení poslucháren pro výuku informačních technologií v souladu s vývojem a s cílem zpřístupnit studentům nejnovější informační technologie.
- 3) Dokončit počítačovou síť na kolejích Sázava a Volha v areálu kolejí na Jižním městě a tak umožnit studentům přístup k internetovým informačním zdrojům v této lokalitě.
- 4) Rozšířit počítačovou síť VŠCHT Praha do nově rekonstruovaných prostor v budově Technická 3.
- 5) Pokračovat v systematickém budování souboru informačních pramenů pokrývajících všechny obory čisté i užité chemie a současně odpovídající vývojovým trendům dalšího rozvoje informačních technologií. Propojovat primární a sekundární zdroje, postupně přecházet na webovské alternativy přístupu k informacím umožňujícím plné využití funkcionality takových dokumentů.
- 6) Vytvářet podmínky pro zdokonalování propagační a informační činnosti školy posilováním personálního obsazení příslušného informačního útvaru školy s následným rozšiřováním jeho aktivit.
- 7) Pokračovat v zavádění systémů zvyšující bezpečnost provozu (zavedení systému Mailgear) a kapacitu vnitřní sítě VŠCHT Praha (rozšíření RAM serveru a diskového prostoru SAN).
- 8) Rozšiřovat a zdokonalovat novou verzi Internetových stránek školy, zvyšovat informační obsah stránek, zjednodušit distribuci vnitřních dokumentů.
- 9) Zvýšit výkonnost některých serverů zajišťujících ekonomické (zpracování mezd) a pedagogické agendy (systém Student).
- 10) Rozšířit možnosti stávajícího informačního systému (upgrade stávajících modulů, zvýšení komfortu uživatelů).

V oblasti mezinárodní spolupráce ve vzdělávání

- 1) Realizovat co největší počet studentských mobilit v programu SOCRATES/ERASMUS s důrazem na realizaci delších studijních pobytů studentů (1 semestr) .
- 2) Rozšiřovat počet přijíždějících zahraničních studentů v programu SOCRATES /ERASMUS aktivním vyhledáváním a jednáním s vhodnými partnerskými univerzitami.
- 3) Rozšířit aktivní zapojení do evropského programu Leonardo da Vinci zaměřeného na studentské mobility v oblasti odborného vzdělávání a to jak pro vyjíždějící studenty tak i napomáháním zajišťování odborných praxí v českých podnicích pro přijíždějící zahraniční studenty.
- 4) Aktualizovat informace o studiu v anglickém jazyce zejména na Internetové stránce školy.
- 5) Rozšířit výuku v anglickém jazyce pro zahraniční studenty programu SOCRATES /ERASMUS.
- 6) Připravovat, inovovat a rozšiřovat kurzy pro zahraniční organizace nebo zahraniční studenty samoplátce.

V oblasti ubytovacích a stravovacích zařízení, péče o studenty

- 1) Dokončit rekonstrukci elektrorozvodů, zřízení počítačové sítě a digitální telefonní ústředny na kolejích Sázava a Volha v areálu Jižní město.
- 2) Provést nutné opravy střechy a oken na kolejích Sázava a Volha, rekonstruovat ubytovací buňky na koleji Volha.
- 3) Vytvářet organizační podmínky pro získávání dat pro kvalifikované informační a poradenské služby pro studenty. Podporovat mimostudijní aktivity studentů v rámci areálu kolejí při realizaci filmového klubu, přispět k modernizaci vybavení kanceláře IAESTE.
- 4) Obnovit server a programové vybavení pro ubytování a stravování.

V oblasti investic

- 1) pokračovat v přípravě a realizaci výstavby areálu na Vítězném náměstí v Praze-Dejvicích ve spolupráci se smluvními partnery (TIMON Bauregie GmbH & Co. KG , MŠMT a ČVUT) podle Rámcové smlouvy z roku 1999 s posunutím kolaudace do roku 2004 a zahájením provozu v nových vysokoškolských prostorách v roce 2005. Všechny ostatní stavební investiční a jiné rozvojové projekty ve starých budovách VŠCHT vycházejí z předpokladu úspěšného dokončení této největší, finančně nejnáročnější a nejvýznamnější investiční akce, která je podle uvedené smlouvy zcela zabezpečena z mimorozpočtových zdrojů.
- 2) pokračovat ve spolupráci se Státní technickou knihovnou a ČVUT na projektové přípravě výstavby objektu Národní technické knihovny a knihoven technických vysokých škol v dejvickém areálu na pozemcích před budovou „A“ VŠCHT Praha. Vyřešit i

prostorové a funkční vykrytí obou parcel, dříve spravovaných VŠCHT Praha, v rámci tohoto projektu.

- 3) pokračovat v narovnávání majetkoprávních vztahů v areálu kolejí a menzy v Praze-Kunraticích tak, aby nebyly zpožděny a narušovány budoucí rozvojové investiční akce v tomto areálu. Na kolejích zvyšovat úroveň bydlení a stravování studentů a odpovídající infrastruktury pro zabezpečení tohoto cíle.
- 4) dokončit rekonstrukci technologické haly a přilehlých prostor v budově A.
- 5) vytvořit dlouhodobý plán rekonstrukce, obnovy a úprav interiérů školy, který by při respektování mimořádného a brilantního architektonického odkazu architektů Engela a Ondřeje zvýšil užitnou, estetickou, ekologickou i technickou úroveň výukových, výzkumných a administrativních prostor ve starých budovách A a B. Mezi významnější akce v roce 2003 bude patřit zřízení počítačové pracovny pro studenty, rekonstrukce nástavby X v budově B a její propojení s 3. patrem budovy B ve Studentské ulici, sanace fasád na dvorech v budově B, celková rekonstrukce oken na schodištích v budovách A a B, kultivace hlavního dvora v budově B a jeho přeměna na místa oddechu pro studenty a pokračování v systematické obnově teplovodních a sanitárních rozvodů v obou budovách školy, nacházejících se v předhavarijním stavu.
- 6) značnou část investičních prostředků směřovat do pořízení a obnovy přístrojového vybavení pro výzkum jako integrální součásti vysokoškolské výuky a podpory spolupráce s praxí. Při nákupu větších investičních instrumentálních celků bude důsledně zohledňován aspekt rovnováhy mezi použitím těchto investic ve výuce, výzkumu a servisu. Největšími jednotlivými přístrojovými investicemi bude pořízení spektrometru pro nukleární magnetickou rezonanci pracujícího na frekvenci 600 MHz v ceně 30 MKč a pořízení rentgenového monokrystalového difraktometru v ceně 12 MKč. V roce 2003 bude připravena detailní přístrojová a náplňová koncepce nového pracoviště ESCA zaměřeného na zkoumání povrchových vlastností nových materiálů v souvislosti s postupnými rozsáhlými investicemi do tohoto pracoviště v následujících letech.

Rok 2003 je úvodním rokem pětiletého období (2003-2007), pro něž předložila VŠCHT Praha správci kapitoly (MŠMT) k 21. 5. 2002 detailní dokumentaci svých plánovaných investičních programů pro nové struktury financování programů reprodukce majetku v souladu s metodickým pokynem Ministerstva financí č. j. 113/1991/2002 ze dne 28. 1. 2002.

Příloha

VZ MSM 223100001 – Katalytické procesy v chemii a chemické technologii

V souladu s koncepcí výzkumu a s cíli výzkumného záměru *Katalytické procesy v chemii a chemické technologii* budou i v roce 2003 na FCHT zachovány následující priority výzkumu. Tyto budou dále konkrétněji specifikovány pro období roku 2003.

1.1. Priority dlouhodobého záměru : Katalytické procesy v chemii a chemické technologii

Prioritou 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, makrocyclické i fluorobsahující sloučeniny z hlediska jejich přípravy, reaktivity i aplikačních možností.

Katalytický výzkum je zaměřen na vývoj nových typů katalyzátorů určených především pro hydrogenaci, dehydrogenaci a kysele 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, fluorofilní katalýza, molekulární receptory nabitých i nenabitých částic, kapalně krystalové, krevní náhrady, systémy pro cílený transport léčiv, rozpoznání chirálních sloučenin, enantioselektivní katalyzované reakce), modelování biologických dějů i syntézy nových molekulárních zařízení a materiálů.

1.2. Aktualizace dlouhodobého záměru pro rok 2003

1.2.1. 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 látek pro parfumářský průmysl. Zde půjde hlavně o převedení alkylaromátů na cyklické ketony a alkoholy a selektivní hydrogenace nenasyčených karbonylových sloučenin. Dále budou studovány makrocyclické sloučeniny vzniklé cyklokondenzací fenolů s aldehydy nebo sírou, přičemž pozornost bude věnována jejich přípravě i aplikacím.

1.2.2. Nové katalyzované reakce budou studovány z hlediska jejich průběhu, struktury a funkce katalyzátoru i z hlediska aplikace jejich produktů. Zvláště budou studovány následující systémy:

1.2.2.1. Nově připravené heterocyklické povrchově aktivní látky budou studovány z hlediska jejich možné aplikace v micelární katalýze a při separaci iontů jejich transportem přes kapalnou membránu.

1.2.2.2. Tradičně budou studovány nové komplexy přechodových kovů se syntetickými i přírodními ligandy, jejich struktura i možnosti jejich aplikace. V této velmi rychle se rozvíjející oblasti chemie budeme zvláště sledovat:

- Pd-katalyzované reakce organokovových sloučenin B, Sn a Cu k derivatizaci bazí nukleových kyselin (především purinových). Cílem je jednak příprava biologicky aktivních látek jako jsou virostatika a cytostatika, ale i snaha vypracovat nové metody umožňující další derivatizaci purinového skeletu.

- možnosti využití aniontů aminokarboenových komplexů chromu v Pd- katalyzované allylové substituci. Tato reakce umožňuje přípravu řady nových nenasyčených karboenových komplexů, které mají obecné využití v organické syntéze a zvláště při syntéze biologicky zajímavých látek, například α -laktamů, aminokyselin, sloučenin s chinoidním skeletem.

- syntézu nových P-chirálních ligandů na bázi ferrocenu s obecným využitím v enantioselektivní katalýze.

- využití axiálně chirálních látek na bázi 3,3'-bi(benzothiofenu) jako chirálních „auxiliary“ v stereoselektivních redukcích karbonylových sloučenin.

1.2.2.3. Analoga bioaktivních přírodních látek, jejich struktura, syntéza i studium jejich vlastností tvoří velmi širokou oblast aplikace katalyzovaných reakcí. Zde budeme v následujícím roce aktivní zvláště v následujících oblastech.

- Analoga alkaloidů Peganinové skupiny

Peganin a jeho deriváty a analoga se vyznačují širokým spektrem farmaceutických vlastností – od psychotherapeutických, přes antialergické až po kancerostatické. Na druhé straně je známo, že fluorové substituenty obecně výrazně modifikují biologické vlastnosti organických sloučenin. S ohledem na tyto skutečnosti budou vyvíjeny efektivní, stereoselektivní syntézy Peganinových analog obsahující trifluormethylovou skupinu s cílem získat sloučeniny s novými farmakologickými vlastnostmi. Přitom budou využívány různé způsoby bazické katalýzy.

- Butenolidy a sloučeniny strukturně blízké vitaminu C

Velký počet sloučenin s různými biochemickými a farmakologickými vlastnostmi obsahuje butenolidový farmakofoor. Typickým příkladem je vitamin C. V tomto záměru budou syntetizovány fluorované butenolidy strukturně příbuzné vitaminu C pro biochemické studie. Hlavní zaměření syntéz bude jejich stereoselektivita s využitím kyselých a bazických katalýz. Jelikož fluorované butenolidy představují rovněž nové reaktivní systémy, budou studovány i z tohoto hlediska se

záměrem následného využití poznání reakcí v syntézách cílových sloučenin.

1.2.2.4. Syntetické molekulární složky pro umělou krev, systémy pro cílený transport léčiv a další biomedicínské aplikace tvoří další oblast základního výzkumu, kde je velmi bohatá aplikace metod katalyzovaných reakcí.

S ohledem na celosvětový nedostatek krve pro transfuze a infekční rizika aplikace cizí krve se stal výzkum krevních náhrad jednou ze světových priorit.

Jedním z hlavních cílů v tomto záměru je připravit strukturně definované molekulární složky pro přenašeče kyslíku, resp. krevní náhrady. Jde o amfifilní sloučeniny s vlastnostmi tenzidů. Základní požadovanou vlastností je biokompatibilita, resp. hemokompatibilita a dobré koemulgační vlastnosti, které se uplatňují při stabilizaci základní složky přenašečů kyslíku, tj. emulzí perfluorovaných sloučenin. Jako strukturní typy budou zkoumány: fluoralkylované deriváty sacharidů, fluoralkylderiváty fosfocholinu a fosfatidylcholinu, a fluoralkylderiváty makrocyclů. Při syntézách těchto sloučenin budou využívány výhody bazické nebo kyselé katalýzy a zároveň uplatňováno stereochemické hledisko. Z makrocyclů budou v tomto směru zkoumány porfyrinové deriváty a jejich schopnost komplexace s kovy a studována interakce s kyslíkem z hlediska jeho přenosu do tkání. Připravené amfifily-tenzidy budou zkoumány z hlediska schopnosti tvořit nadmolekulární systémy, jako jsou vesikuly a tubuly, které se mohou uplatnit v cíleném transportu léčiv v intravenózních aplikacích. Deriváty porfyrinu budou rovněž zkoumány na protirakovinné vlastnosti v aplikaci fotodynamické terapie.

1.2.2.5. Speciální komonomery pro biokompatibilní polymery

Význam biomateriálů v posledních desetiletích neustále vzrůstá. Současně roste i poptávka po nich a v odpověď vznikají nové typy těchto materiálů. Zároveň se rozšiřuje i spektrum aplikací polymerů v lékařství a farmakologii. Kromě průmyslové výroby měkkých a tvrdých kontaktních i nitroočních čoček jsou to různé implantáty (pro otorinolaryngologii, neurologii, urologii, gynekologii, kostní, zubní i plastickou chirurgii), protézy (oční, prsní, součásti protéz kloubů nebo obratlů), náhrady oběhového aparátu (umělé srdce, cévy), nebo nosiče pro kultivaci a transport buněk v léčbě popálenin, proleženin či jiných rozsáhlých kožních defektů.

Cílem rámcového záměru je tedy výzkum a vývoj nových hydrofilně/hydrofobních biomateriálů obsahujících atomy fluoru, které budou určené pro kontaktní čočky, rohovkové kryty, nosiče pro kultivaci buněk, obvazové materiály apod. a budou se vyznačovat zvýšenou propustností pro kyslík, dobrou biokompatibilitou a nastavitelnými mechanickými a botnacími vlastnostmi.

Na VŠCHT bude řešena syntéza speciálních monomerů obsahujících fluorové substituenty a/nebo siloxanové skupiny. Přitom budou využívány různé způsoby bazické a kyselé, resp. elektrofilní katalýzy. Zvláště moderní oblastí syntéz budou tzv. makromery (makromonomery), tedy oligomerní až polymerní řetězce, které ve své struktuře nesou nějakou polymerizovatelnou funkční skupinu. Jejich použití je jednou z cest vedoucích k blokovým kopolymerům. Umožňují přitom v širokém spektru nastavit délku i strukturu jednotlivých bloků.

1.2.2.6. Selektivní dehalogenace polyhalogenderivátů

Tato část se dotýká problematiky halogenovaných látek v životním prostředí. Jeho obsahem je hledání způsobů chemického využití polyhalogenovaných sloučenin před jejich energeticky náročnou a ekologicky nevýhodnou totální likvidací. Předmětem výzkumu jsou polyhalogenované průmyslové sloučeniny, a to produkty jak hlavní, tak sloučeniny vedlejší, resp. odpady. V první fázi řešení bude prováděn výzkum regioselectivity různých dehalogenačních metod na modelových sloučeninách s použitím fotosensibilizovaných, fotokatalytických a dalších katalytických metod.

1.2.2.7. Molekulární senzory

V první fázi tohoto projektu budou zkoumány asociační rovnováhy porfyrinových derivátů, obsahující perfluorované skupiny a segmenty, s různými typy organických fluorovaných látek. Na základě výsledků měření pak budou konstruovány struktury s předpokládanými zlepšenými vlastnostmi. V první fázi budou syntetizovány s využitím bazické nebo kyselé katalýzy stabilní atropoisomery substituovaných meso-porfyrinových derivátů.

1.2.2.8. Příprava, studium vlastností a aplikace fluorovaných organokovových sloučenin

Cílem projektu je syntéza fluorovaných stavebních bloků na bázi organokovových sloučenin lithia, hořčíku, zinku, mědi, hliníku a manganu, studium jejich vlastností pomocí *ab initio* metod včetně zahrnutí interakcí s rozpouštědly a výpočtů chemického stínění. Získané teoretické a experimentální údaje budou porovnány pomocí nízkoteplotní NMR spektroskopie, která bude také využita pro studium stability. Dále budou syntetizovány a studovány analogy těchto sloučenin stabilizované silovou nebo borylovou skupinou. Získané fluorované stavební bloky budou aplikovány na syntézu vybraných skupin biologicky aktivních látek.

1.2.2.9. Příprava nových fluorofilních katalyzátorů na bázi polyfluorovaných cyklopentadienů

Homogenní katalýza je účinným nástrojem pro výrobu nových sloučenin, ale častým problémem je efektivní separace použitých katalyzátorů, které často obsahují toxické kovy. Světové trendy ke snížení zatížení životního prostředí vedou k zavádění procesů s vícefázovými systémy kapalina-kapalina. V posledních letech byly s tímto cílem syntetizovány četné polyfluorované ligandy pro homogenní katalyzátory a využity pro homogenní katalýzu ve fluorovém dvoufázovém systému. S cílem připravit nové typy fluorofilních ligandů budou syntetizovány nové fluorované acetyleny a cyklopentadieny a využity pro přípravu nových typů katalyzátorů pro fluorovou dvoufázovou katalýzu. Reaktivita vzniklých katalyzátorů bude studována na spolupracujících pracovištích.

1.2.2.10. Příprava a aplikace nových chirálních organokovových sloučenin s C₂-symetrií

Klíčovým problémem pro přípravu některých chirálních boranů a silanů s C₂-symetrií je konformační stabilita intermediárních organohofečnatých sloučenin, která vede k náročným separacím směsí diastereoisomerů a enantiomerů. Cílem projektu je studium chirálních organokovových sloučenin na bázi lithia, hořčíku a zinku, u nichž by konformační stabilita byla zajištěna konfigurací na sousedních atomech uhlíku, a to jak experimentálními, tak teoretickými *ab initio* postupy. Získané chirální C₂-symetrické 7-bora a 7-silabicyklo[6.3.0.0^{2,6}]undekany a jejich benzoanalogy budou využity jako činidla pro enantioselektivní hydroboraci, enantioselektivní nukleofilní fluoraci a dále jako chirální chránící a pomocné skupiny. Pro vybrané případy budou též připraveny analogické sloučeniny obsahující dlouhé fluorované řetězce s cílem syntetizovat fluorofilní sloučeniny, které bude možno po reakci snadno separovat pomocí některé z fluorových separačních metod a recyklovat.

1.2.2.11. Katalýza v oblasti tvorby a struktury peptidů a bílkovin – funkce prionů.

V této oblasti půjde zvláště o procesy modelující vznik prionů z hlediska možného katalytického ovlivnění jejich samoskladby (self-assembly). Ukazuje se, že sekundární struktura prionu je závislá na mnoha faktorech a vznik biologicky nežádoucí β -zřasené struktury nese typické znaky katalyzovaného procesu. Cílem bude studovat katalytickou funkci nukleotidů i fragmentů nukleových kyselin právě na přechod od fyziologické struktury prionu k patologické nadmolekulární amyloidní struktuře.

1.2.2.12. V oblasti chemie calixarenů:

- bude dokončena obsáhlá studie o vzniku, struktuře i katalytické aktivitě stříbrných komplexů s výrazným podílem kationt- π interakce. Semi-rigidní skelet calixarenů dovoluje významným

a kontrolovaným způsobem měnit trojrozměrnou strukturu komplexů. Tím lze ovlivnit jejich stechiometrii, a druhotně i katalytickou funkci.

- Bude studována metodika přechodovými kovy katalyzovaná tvorby C-N vazby aplikovaná na syntézu polymakrocyclických systémů na bázi calixarenů a polyazamakrocyclických, dovolující získat a studovat konformačně rigidní makrocyclické struktury.
- Na syntézu podobných polymakrocyclických sloučenin bude využita Zn-katalyzovaná McMurry reakce, vedoucí k nenasyčeným látkám, které jsou velmi výhodnými a snadno synteticky zpracovatelnými sloučeninami. Bude studována jejich reaktivita i možnosti aplikace. Bude rozpracována metodika přímé ligace monosacharidů ke skeletu calixarenu, což je obecně přechodovými kovy katalyzovaná reakce.
- Budou také studovány dendrimerní skelety na bázi calixarenů, které jednak vznikají aplikací katalyzovaných reakcí, jedna samy o sobě tvoří komplexy s řadou kovů i iontů a modelují katalýzu v silně nepolárním prostředí.

1.2.3. Pozornost bude věnována metodice a procesům pro syntézu nových látek s žádoucími chemickými, fyzikálními a biologickými vlastnostmi, procesům s nestacionární kinetikou, studiu adsorpčních isotherm v systémech tuhá látka-kapalina, testování katalyzátorů v pulzním mikroreaktoru, využití neuronových sítí pro zpracování kinetických dat a studium konkurenčních katalytických hydrogenací.

1.2.4. V oblasti nových katalytických materiálů pro výrobu chemických specialit včetně jejich aplikací v katalytických procesech, budou řešeny otázky selektivních a enantioselektivních vlastností hydrogenačních katalyzátorů (Pt-Sn, Ru-Sn, Ni-modifikátor, zakotvené Ru komplexy), acidobazických vlastností katalyzátorů pro anilinový proces, metodiky testování relativní bazicity katalyzátorů, císem modifikovaných katalyzátorů pro nízkoteplotní konverzi syntetického plynu a konečně nových směrů využití zeolitických katalyzátorů (acylační reakce) a bifunkčních katalyzátorů zeolit-kov a hydrotalcit-kov.

1.2.5. V oblasti výzkumu chování vícefázových a membránových reaktorů, jejich modelování a optimalizace bude zejména studována problematika dynamického a bezpečného řízení reaktoru se zkrápěnou vrstvou katalyzátoru, přednostně vliv dynamiky na selektivitu, časová modulace řídicích parametrů, vedoucí k intenzifikaci jeho výkonu, dále pak budou studovány reakční systémy s fázovou změnou reakční směsi, procesů s využitím reaktivní destilace pro reakční soustavy, ovlivněné chemickou rovnováhou, algoritmů pro bezpečné řízení vsádkových reaktorů se silně exotermickou reakcí i výzkumu vlivu přenosových jevů na heterogenní reakční soustavu.

1.2.6. Procesy nezatažujících životní prostředí a procesů pro zpracování odpadních a toxických látek.

Bude pokračovat studium nových typů iontoměničových membrán pro perspektivní využití v palivových článcích, pokračují studie elektrokatalytické aktivity vodivých polymerů modifikovaných platinovým katalyzátorem, elektrochemické odstraňování dusičnanů a těžkých kovů z vod spolu s matematickým modelováním elektrochemických systémů. Metodami elektrochemické impedanční spektroskopie budou sledovány korozní vlastnosti vybraných materiálů (např. slitiny Zircaloy v jaderném průmyslu). Bude pokračovat studie přestupu hmoty při přirozené konvekci pro objekty s komplexní geometrií. Fotokatalytická degradace (toxických) organických i anorganických látek ve vodách bude studována v nových typech reaktorů, dovolující snížit odpor pro přestup hmoty a kyslíku.

Budou studovány možnosti odstraňování anorganických solí z odpadních vod použitím extrakce v soustavách kapalina-kapalina a pomocí membránových extrakcí. Hlavní důraz bude kladen na studium rovnováh při extrakčních procesech spojených s chemickou reakcí. Vhodnost separace některých geneticky vázaných prvků, např. Mo, Re, které se vyskytují společně jak v surovinách, tak i v produktech a odpadech

průmyslového přepracování surovin bude studována při extrakci z kyselých roztoků primárními aminy.

Bude pokračovat vývoj technik přípravy a způsobů charakterizace zeolitických, SiO₂ a kovových mikroporézních vrstev s použitím mikroskopických a spektroskopických technik, budou sledovány jejich sorpčních a transportní vlastností a bude rozvíjen teoretický popis těchto dějů na základě fenomenologických matematických modelů a metod molekulové dynamiky. Studované membránové materiály budou uplatněny v katalytických procesech, při separaci plynů a par a současně budou studovány mechanismy a kinetika katalytické přeměny methanu na vyšší uhlovodíky se zaměřením na deaktivaci katalyzátorů a způsoby jejího potlačení. Bude studována katalytická ammoxidace ethanu v dynamickém režimu s cílem popsat kinetiku elementárních kroků katalytického procesu.

Bude pokračovat studie matematického modelování mikroreaktorů s katalyticky aktivní stěnou s hlediska popisu rozdělení koncentrací a teplot v těchto systémech metodami CFD (Computational Fluid Dynamics) s cílem vyvinout modely těchto systémů umožňující spolehlivou predikci jejich chování v dynamických a stacionárních stavech.

Bude pokračováno ve studiu kinetiky heterogenně nekatalyzovaných reakcí v soustavách pevná látka – tekutina v některých průmyslově zajímavých procesech (technologie hořečnatých sloučenin, síranu vápenatého) a dále bude sledována kinetika sorpce a chemické reakce sulfanu při vyšších teplotách na oxidických sorbentech.

1.2.7. V oblasti elektrochemického inženýrství bude studium zaměřeno na matematické modelování elektrochemických systémů a na přestup hmoty při přirozené konvekci pro objekty s komplexní geometrií. V oblasti membránových katalyzátorů budou studovány zeolitické, SiO₂ a kovové mikroporézní vrstvy, jejich sorpční a transportní vlastnosti, teoretický popis dějů na základě matematických modelů, aplikace membránových materiálů v katalýze a při separaci plynů a par, studium kinetiky katalytické přeměny methanu na vyšší uhlovodíky. V oblasti kinetiky heterogenních nekatalyzovaných reakcí bude pozornost zaměřena na zachycování sulfanu při vyšších teplotách na oxidických sorbentech.

1.2.8. V oblasti farmaceutického inženýrství bude věnována pozornost studiu procesu granulace léčiv se zvláštním zřetelem na kinetiku tvorby granulí. Experimentální data budou základem identifikace matematických modelů procesu s následným využitím k přenosu dat mezi systémy s různou velikostí a geometrií. Bude vyvíjen postup měření distribuce velikosti granulí a s aplikací počítačové metody analýzy fotografických obrazů granulovaných produktů.

VZ MSM 223100002 – Chemie a technologie materiálů pro technologické aplikace, ochranu zdraví a životní prostředí

Materiálový výzkum na Fakultě chemické technologie (FCHT) bude i v r. 2003 pokračovat v souladu s koncepcí výzkumu a s cíli výzkumného záměru Příprava a vlastnosti moderních materiálů – modelování, charakterizace, technologie.

Výzkumný záměr se zabývá studiem vztahů mezi podmínkami přípravy materiálů a jejich složením, strukturou a vlastnostmi, tak, aby bylo možno cíleně připravovat a vyvíjet nové typy materiálů s definovanými vlastnostmi.

Výzkum je zaměřen na materiály všech skupin, tj. materiály kovové, anorganické nekovové, polymerní i kompozitní. Východním bodem je syntéza a příprava materiálu, charakterizace jeho složení, struktury a vlastností. Na tu pak navazuje fyzikálně-chemický a chemicko-inženýrský popis procesů při jejich přípravě, recyklaci a během interakce s prostředím, s využitím matematického i fyzikálního modelování. Fakulta chemické technologie sdružuje kapacity zaměřené na výzkum

všech typů materiálů, což slibuje zajistit synergický efekt při řešení jednotlivých okruhů. Zároveň široce pojatý VZ umožňuje sdružit a efektivně využít přístrojové vybavení fakulty a jejích ústavů.

Cíle a výstupy dílčích problémových skupin:

Z hlediska aplikace sledovaných materiálů je VZ v souladu se současnými prioritami orientovaného výzkumu ve světě (např. v rámcových programech EU) zaměřen i v roce 2003 na tři základní oblasti, určující základní orientaci výzkumu na FCHT:

1. Materiály pro technické aplikace
2. Materiály pro zdraví člověka
3. Materiály a ochrana prostředí

ad 1) Materiály pro technické aplikace

Materiály na bázi oxidů přechodných kovů: Cílem tohoto dílčího úkolu je příprava a charakterizace vysokoteplotních oxidových supravodičů ze systému Bi-Sr-Ca-Cu-O. Bude systematicky sledován vliv částečné substituce Bi přechodnými kovy. Na základě termodynamických dat budou ověřeny podmínky pro přípravu vzorků s definovaným chemickým a fázovým složením a bude navržen model pro výpočet vlastností vysokoteplotních oxidických supravodičů a příbuzných fází. Kromě supravodivých objemových vzorků budou připraveny i vzorky ve formě tenkých vrstev. Sledování struktury a vlastností bude dále rozšířeno i na manganité perovskity a vysokoteplotní termoelektrika.

Optické vlnovody: Cílem je příprava aktivních vlnovodných vrstev v optických krystalech na bázi LiNbO₃, Al₂O₃ a speciálních oxidových skel.

Iontově vodivá skla: Cílem je vývoj iontově vodivých skel v systémech Li₂O-MoO₃-P₂O₅ a Li₂O-WO₃-P₂O₅ s možným využitím jako pevné elektrolyty či elektrody v bateriích. Výstupem je určení optimální oblasti složení ve zkoumaném systému, ve které jeví materiál dostatečnou iontovou vodivost a zároveň nedochází k jeho krystalizaci.

Konstrukční materiály: V tomto dílčím úkolu je cílem vyvinout materiály s vysokými užitnými vlastnostmi. V oblasti polymerních materiálů jsou předpokládány výstupy zejména plasty modifikované elastomery, u kterých je předpokládána zvýšená houževnatost. Druhým cílem je vývoj separačních membrán na bázi kaučukovitých polymerů a polyimidů plněných zeolity.

Výzkum kovových materiálů v této oblasti je orientován na vlastnosti práškových slitin hliníku legovaných chromem, železem, titanem a křemíkem. Cílem je také zmapování mikrostruktur a mechanických vlastností vysoce pevných slitin Al a zlepšení jejich slévarenských vlastností. Výstupem v tomto případě je optimalizované složení slitiny. Pozornost je věnována i výzkumu koroze a protikorozi ochrany kovů. Výzkum je zaměřen na vliv stavu povrchu na korozi ocelové výztuže v betonu, s cílem stanovit mechanismus a ověřit elektrochemické metody monitorování. Dále je sledován vliv přestupu tepla na vznik nerovnoměrné koroze ocelí jsou sledovány podmínky negativního působení vodíku na pasivitu duplexních ocelí. Výstupem bude kromě popisu mechanismů koroze i návrh protikoročních opatření.

V oblasti anorganických pojiv je cílem příprava bezsádrovcového cementu jako náhrady za běžný cement portlandského typu. Výstupem bude návrh optimálního složení cementu a charakterizace jeho struktury a vlastností. Cílem studia korozního chování různých typů cementů bude vypracovat metodiku sledování dlouhodobé koroze a identifikace korozních produktů.

Poznatky o korozi všech typů materiálů umožňují rovněž hledat modifikace historických materiálů a technologií a vyvíjet nové

materiály pro potlačení koroze a odstranění jejích následků při maximálním zachování původní hmoty památek. Očekávaným výstupem jsou modifikace stávajících technologií konzervace a konsolidace památek a formulace nových materiálů a metod jejich aplikace.

Výzkum keramických materiálů je zaměřen na oxidové systémy, především Al₂O₃ a ZrO₂. Výzkum má tři základní cíle: vývoj funkčně gradientní keramiky s postupně se měnící porozitou, dále vývoj keramického materiálu s vysoce homogenní mikrostrukturou pro elektroizolační aplikace a příprava tzv. ATZ keramiky (Alumina Toughened Zirconia) s vysokou mechanickou pevností. Výstupem bude návrh technologie těchto materiálů včetně matematického popisu procesů.

Modelování tavicího procesu křemičitých skel: Cílem výzkumné oblasti, která rozvíjí tradiční obor výzkumu na VŠCHT je matematický popis dějů při výrobě křemičitých skel. Snahou je popsat vedení tepla a proudění skloviny ve sklářské peci s přihlédnutím ke geometrickému uspořádání tavicí pece a popis chemických a fyzikálně-chemických dějů v tavenině a v pecní atmosféře. Výstupem by měl být komplexní matematický model tavicího procesu s přednostním zaměřením na modifikované a nové sklářské technologie vedoucí k podstatným úsporám energie a snižování emisí a použitelný pro inteligentní řízení tavicích agregátů na základě kvality vyráběných skel.

ad 2) Materiály pro zdraví člověka

Biomateriály: Hlavním cílem je vývoj materiálů pro kostní a dentální implantáty a pro pěstování buněk a kožní implantáty. Zároveň bude simulována interakce připravených materiálů s organismem. Výstupem pak kromě nových materiálů či modifikovaných materiálů budou i testovací metody umožňující rychlý předběžný odhad vhodnosti nových materiálů pro medicínské aplikace in vitro. Studium by mělo přinést i odpověď na otázku, jaké jsou hlavní mechanismy interakce. Studovány budou především materiály na bázi titanu, dentální slitiny na bázi Pd a Ag, křemičitá skla a sklokeramika, oxidová keramika a polymery. Polymerní materiály budou rovněž využity pro vývoj nosičů léčiv i pro experimenty umožňující simulaci uvolňování léčiv z navrhovaných nosičů.

Odolnost obalových materiálů vůči korozi a degradaci: Cílem je zvýšit chemickou odolnost skel a polymerních materiálů vůči vodným roztokům. Výzkum bude zaměřen na sledování korozního chování běžně vyráběných obalových skel, případně polymerních materiálů, na přípravu ochranných vrstev (anorganických, anorganicko-organických) na povrchu obalového materiálu i na úpravu jeho povrchových vrstev. Zároveň bude sledována i interakce původních materiálů i ochranných vrstev s roztoky. Výstupem bude kromě návrhu ochranných povrchových vrstev pro hromadně vyráběné obaly i matematický popis interakce a návrh nových testů odolnosti.

Výzkum struktury farmaceutických substancí: Cílem výzkumu je rozšířit možnosti aplikace RTG difrakčních metod na výzkum farmaceutických substancí. Výzkum bude zaměřen především na oblast cyklosporinů, námelových alkaloidů a statinů. Výstupem bude strukturní popis jednotlivých polymorfů a solvatovaných forem z hlediska jejich patentové ochrany, zpracování „drug master file“ dokumentů a kontroly fázové čistoty při výrobě.

ad 3) Materiály a ochrana prostředí

Recyklace odpadů: Cílem je vývoj a laboratorní ověření hydro- a pyro- metalurgických postupů pro získávání neželezných kovů z dosud nezpracovávaných kovonosných odpadů. Výstupem bude návrh technologie. V polymerních materiálech je výzkum zacílen na silikonový kaučuk a možnost jeho recyklace. Do oblasti odpadů spadá i výzkum biologické odbouratelnosti polymerů. Cílem je opět optimalizace složení s ohledem na užitné vlastnosti na straně jedné a na maximální šetrnost k životnímu prostředí na straně druhé. K využití odpadních látek směřují i studie vlastností a syntézy nových alkalický

aktivovaných hydratovaných anorganických pojiv. Cílem je vývoj hydraulických pojiv s obsahem latentně hydraulických látek, např. popílku či strusky. Očekávaným výstupem je návrh optimálního složení z hlediska mechanických vlastností a korozní odolnosti. V rámci VZ bude pokračovat i práce na využití kamence hlinito-amonného pro syntézu zeolitu A. Cílem je využití kamence vznikajícího při likvidaci uranových dolů v Dolní Rožince. Očekávaným výstupem je návrh technologie zeolitu A.

Materiály pro likvidaci toxických látek a odpadů: Cílem této oblasti je příprava katalyzátoru na bázi kovových oxidů, získaných termickým rozkladem sloučenin typu hydroalacitu, který bude využitelný pro spalování organických těkavých látek. Výstupem by měly být podklady pro vybudování poloprovozní linky. Do této oblasti spadá i výzkum polymerních sorbentů.

Dalším cílem v této oblasti je nalezení a optimalizace povrchových úprav skla, které by mohlo sloužit pro imobilizaci mikroorganismů. Výstupem bude kromě návrhu povrchové úpravy i návrh metodiky testování koroze takto upravených skel v živných roztocích.

Vitrifikace nebezpečných odpadů z metodického hlediska navazuje na vývoj chemicky odolných skel. Cílem je popis mechanismu a kinetiky koroze skel navržených pro vitrifikaci radioaktivních odpadů a modelování dílčích dějů při jejich tavení. Výstupem budou matematické modely.

Cíle jednotlivých dílčích oblastí je možné zobecnit a rozdělit do následujících skupin, které jdou napříč jednotlivými oblastmi VZ:

- nalezení (zobecnění) vztahů mezi složením, strukturou a podmínkami přípravy speciálních materiálů a látek s předem volenými chemickými, farmakologickými, fyzikálními a fyzikálně-chemickými vlastnostmi, rozvoj fyzikálních a fyzikálně-chemických metodik
- vývoj modifikací povrchu a sekundárních povrchových vrstev na materiálech a jejich přenesení do technické praxe,
- optimalizace technologických procesů, vývoj nových technologií (laserové, plazmové technologie, silikátový průmysl) s využitím počítačových simulací, chemicko-inženýrského a fyzikálně-chemického popisu procesů výroby a recyklace materiálů organických i polymerních
- objasňování fyzikálně-chemických procesů probíhajících při styku materiálů s prostředím a návrhy na způsoby potlačení koroze a degradace materiálů

VZ MSM 223100003 – Studium chemicko-technologických procesů pro ochranu životního prostředí a zpracování paliv

Aktualizace výzkumného záměru pro rok 2003 je zaměřena zejména na ochranu životního prostředí a jeho složek, na chemické a energetické využití fosilních paliv a na procesy koroze v energetických zařízeních. Vychází z hlavních směrů dlouhodobého záměru fakulty v oblasti vědecko-výzkumné činnosti a z dosud získaných výsledků. V roce 2003 se předpokládá řešení následujících tematických okruhů:

Analýza a hodnocení rop

Budou provedeny úvodní experimenty zaměřené na studium problémů spojených s dopravou a skladováním rop. Pozornost bude zaměřena na studium reologického chování rop a jejich směsí (s ohledem na vliv parafrinických látek způsobujících problémy při dopravě ropy) a vývoj komplexní metodiky pro analýzu ropných úsad, vznikajících při dopravě a skladování rop.

Hodnocení a zlepšování kvality silničních asfaltů

Bude studován vliv složení suroviny na vlastnosti a složení polofoukaných asfaltů. Oxidovaný boudou vakuové zbytky získané z různých druhů ropy. Získané polofoukané asfalty budou podrobně analyzovány z hlediska svých fyzikálních vlastností, skupinového složení a struktury. Pozornost bude věnována také změnám, ke kterým dochází při stárnutí asfaltů.

Diagnostika kvality motorových olejů při prodloužených výměnných intervalech

Nedávno začaly hlavní evropské automobilky doporučovat výrazné prodloužení výměnné lhůty motorových olejů u zážehových i vznětových motorů. V této souvislosti je žádoucí zjistit, jak se prodloužené výměnné lhůty projeví na kvalitě motorových olejů v reálném provozu, zejména na konci jejich životnosti. Úvodní práce řešení této problematiky budou zaměřeny na monitoring kvality opotřebených motorových olejů jak z benzinových, tak i dieselových motorů po uplynutí jejich prodloužené výměnné lhůty. Ve spolupráci s vybraným značkovým servisem budou odebírány vzorky opotřebených olejů při jejich výměně v rámci servisních prohlídek. Odebrané oleje budou analyzovány a bude stanovena většina parametrů motorových olejů, které mají vztah k jejich užitému hodnotám. Výsledky budou porovnány s parametry čerstvých motorových olejů a bude posouzena velikost změny ve vlastnostech opotřebených olejů.

Emise ze spalování plynných paliv

Budou pokračovat práce na studiu účinnosti komerčního a speciálního katalyzátoru při snižování emisí vznikajících při spalování zemního plynu v autobusovém motoru LIAZ v závislosti na počtu ujetých kilometrů. Mimo základních složek emisí, tj. CO, sumy CH, NO_x a částic, budou měřeny především nestandardní emise organických sloučenin, tj. uhlovodíků včetně aromatů, alkylovaných a nealkylovaných polyaromatických uhlovodíků a aldehydů, protože emise těchto látek velkou měrou přispívají k tvorbě smogu a řadě z nich jsou přisuzovány karcinogenní a mutagenní účinky.

Fyzikálně-chemické vlastnosti zemních plynů

Měření parametrů a ověřování výpočetních vztahů využívaných při studiu chování reálných plynů prostřednictvím modelových směsí plynů. Modelování havarijních situací při rozvodu zemního plynu.

Nové selektivní adsorbenty pro technologické a analytické aplikace

Zvyšování kapacity uhlíkatých a přírodních adsorbentů při čištění odpadních plynů. Modelové adsorpční aplikace uhlíkatých sorbentů.

Zplyňování a pyrolýza biomasy a odpadních plástů.

Studium katalyzátorů pro čištění plynů z těchto procesů. Zvyšování účinnosti odsíření spalin aditivací vypírácích kapalin. Aditivace pevných paliv za účelem snížení tvorby dehtovitých látek a nežádoucích polutantů při jejich spalování. Analýza VOC v ovzduší.

Studium pění v aerobních i anaerobních čistírenských procesech

Studium vzniku pěn v zařízeních pro biologické čištění odpadních vod a zpracování kalů bude zaměřeno na přípravu postupů pro eliminaci pěn a identifikaci pěnnotvorných mikroorganismů a studium jejich vlastností.

Intenzifikace procesu anaerobní stabilizace čistírenských kalů

Výzkum bude zaměřen na provozní vyhodnocení přechodu z mezofilní na termofilní stabilizaci a dále na studium zvyšování energetické výtěžnosti kalového hospodářství čistíren odpadních vod.

Odstraňování těžkých kovů z vod srážecími postupy

Bude vyhodnocován efekt odstraňování různých kovů srážením a rovněž také adsorpcí na speciálních sorbentech.

Vývoj a zavedení moderních instrumentálních metod pro analýzu vod.

Metody pro analýzu vod, analýzu organických látek ve vodách pomocí GC-MS, aplikace extrakce tekutinou v nadkritickém stavu a aplikace mikroextrakce tuhou fází.

Hodnocení materiálů z hlediska únavy a koroze

Sledování průběhu korozního praskání pomocí měření elektrochemického šumu a porovnání výsledků s jinými detekčními technikami.

Inhibice koroze

Testování účinnosti ekologicky přijatelných inhibitorů pro nemrznoucí směsi (např. kyselina sebaková).

Selektivní sorbenty a postupy

Studium stabilizace selektivních sorbentů (biosorbentů a aktivované aluminie) přípravou kompozitních materiálů (perličky sorbentu v polyakrylonitrilu).

Využití biomasy

Zjišťování provozních podmínek a konstrukce zařízení pro zplyňování biomasy.

Solidifikace nebezpečných odpadů

Využití pojiv a aditiv ve vhodných směsných poměrech pro solidifikaci nebezpečných odpadů a sledování kinetiky uvolňování kontaminujících látek z připravených solidifikátů do vyluhovacího média.

Odstraňování těžkých kovů z půd metodou fytořemediace

Sledování schopnosti vybraných rostlinných kultur akumulovat těžké kovy v laboratorních podmínkách a v reálných podmínkách a hodnocení jejich fytořemediačního potenciálu.

Studium degradace halogenovaných sloučenin

Vývoj ekotoxikologických metod pro hodnocení vodných výluhů, extraktů, pevných vzorků i tekutých odpadů. Toxikologické hodnocení exponovaných SPMD. Degradace vybraných látek aerobními bakteriemi.

Sledování rovnovážných a kinetických dějů

Modelování a sledování distribuce těkavých kontaminantů mezi jednotlivé složky zemin. Praktické využití takto získaných poznatků pro zpřesnění interpretace výsledků atmochemických měření.

Využívání principů integrované prevence

Studium možností využívání principů integrované prevence a omezování znečištění (IPPC) a koncepce nejlepší dostupné techniky (BAT) v oblasti odpadového hospodářství a ochrany životního prostředí.

Studium použitelnosti elektrokinetické dekontaminace

Rozšíření techniky elektrokinetické dekontaminace pro odstraňování kontaminantů, z netypických materiálů (např. kontaminovaná dřevná hmota). Poloprovozní ověření membránové separace při čištění kontaminovaných skládkových výluhů.

VZ MSM 223100004 – Zlepšování kvality potravin a zajištění optimální výživy obyvatelstva

Výzkum 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 udržitelnosti 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 potravině 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 pathogenních 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

A.1 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.

Upřesnění 2003

Bude se pokračovat ve výzkumu zaměřeném na určení struktury vybraných melanoidinů vzniklých v modelových systémech aminokyselin/produkty degradace sacharidů.

Studovány rovněž budou produkty oxidace sacharidů, zejména disacharidů a mechanismy těchto reakcí.

Dále se budou studovat reakce hnědnutí oxidovaných tuků s aminokyselinami a proteiny, interakce fosfolipidů v modelových systémech.

A.2 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.

Upřesnění 2003

Budou sledovány chemické a sensorické změny při smažení v tuku a při mikrovlnném ohřevu. Dále se budou sledovat antioxidační účinnosti přírodních látek v tucích a olejích, v emulgovaných lipidech a liposomech. Vzájemný vliv směsí antioxidantů v olejích za podmínek skladování a smažení a kinetika oxidace antioxidantů ve směších v prostředí rostlinného oleje. Bude dokončen monitoring obsahu polymerních lipidů v potravinách na českém trhu. Budou se testovat antioxidační účinnosti českých léčivých rostlin.

Sledovat se budou oxidační změny majonéz (nalezení vhodného monitorovacího parametru, monitoring kvality majonéz na českém trhu a testování účinnosti antioxidantů v těchto systémech).

Sledovat se bude vliv složení emulgátoru monoacylglycerolového typu na oxidaci lipidů margarínové emulze za podmínek definované struktury emulze a přístupu kyslíku (koncentrace kyslíku) do balení.

A.3 Změny a speciace minerálních látek

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

Upřesnění 2003

Výzkum bude zejména soustředěn na použití ICP-MS jako prvkově specifického detektoru v kapalinové chromatografii sloučenin minerálních látek.

Sledování změn speciace prvků při sušení a tepelné úpravě potravin. Bude možné stanovit změny rozpustného podílu i změny distribuce prvků mezi různými frakcemi.

Pozornost bude věnována hlavně srovnání GSCP metody s metodou ICP-MS a jejich aplikaci pro stanovení těžkých kovů v pivu, ať už s použitím rozkladu, nebo bez jeho použití.

A.4 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.

Upřesnění 2003

Vypracovány budou metodiky stanovení intenzity a příjemnosti látek ovlivňujících chuť a vůni výrobků, jejich vzájemné interakce a vliv barvy výrobků na intenzitu i hedonické ukazatele.

Bude se pokračovat ve studiu barevných změn při zpracování ovoce a zeleniny.

A.5 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.

Upřesnění 2003

Studium osudu a změn resveratrolu a jeho derivátů v původním materiálu (hroznech) a v průběhu procesu vinifikace, zejména u červených vín. Rozšíření analytických možností na stanovení analogů a derivátů resveratrolu (piceidy, viniferiny apod.).

Sledována bude oxidace fytosterolů a cholesterolu v tucích a olejích a některých dalších zdrojích.

Studovat se bude osud a změny resveratrolu a jeho derivátů v hroznech a v průběhu procesu vinifikace, zejména u červených vín. Analytická část studia se bude zabývat rozšířením analytických možností na stanovení analogů a derivátů resveratrolu (piceidy, viniferiny apod.). Bude se ověřovat možnost využití resveratrolu jako antioxidantu v rostlinných olejích a v systémech emulze typu voda v oleji, srovnání s účinkem kyseliny askorbové. Testovat se budou antimikrobiální vlastnosti resveratrolu na vybraných kmenech plísní a kvasinek. Syntetizovány budou analoga resveratrolu (monomethylethery) a studováno bude jejich použití jako antioxidantů v rostlinných olejích a v systému emulze typu voda v oleji. Započne se se sledováním účinků resveratrolu a jeho derivátů na proliferaci kapacity "nesmrtených" a nádorových buněk lidského prsního epitelu v tkáňové kultuře, která by byla indikována změnami růstu a exprese genů Gaad 45 a BRCA 1. Druhým biologickým modelem, který by sloužil ke studiu změn morfologie a fyziologického stavu buněčné populace v důsledku působení resveratrolu a jeho derivátů, by byly buňky kvasinek. Získané znalosti přispějí k objasnění chemoprotektivního účinku resveratrolu a dalších sloučenin ze skupiny fytoalexinů.

Bude se pokračovat ve studiu antimikrobiální účinnosti derivátů mastných kyselin, antifungální účinnosti dalších 6-O-acylsacharos. Validovány budou výsledky získané s 6-O-undekanoylsacharosou.

Studovat se bude kombinace antifungálního působení lauroylglycerolu a lauroylsacharosy, kombinace antibakteriálního působení lauroylglycerolu a lauroylsacharos, antibakteriální působení monoacylglycerolů (dekanoyl- až oktadekanoyl-), kombinace antimikrobiálního účinku dalších acylglycerolů a acylsacharos.

B Technologická jakost potravin

B.1 Maso a masné výrobky

Výzkum je zaměřen na možnosti zvyšování udržitelnosti a kvality masa a masných výrobků ve výrobě a distribuční síti, optimalizaci procesů a metody hodnocení této jakosti.

Upřesnění 2003

Pokračovat budou studie zaměřené na možnosti zvyšování udržitelnosti a kvality masa a masných výrobků ve výrobě a distribuční síti, optimalizace procesů a metody hodnocení této jakosti, postupy k detekci falšování masa a masných výrobků, příprava databáze k hodnocení autenticity surovin a potravin živočišného původu.

B.2 Mléko a mléčné výrobky

Pokračovat bude výzkum zabývající se mabývat možnostmi zvyšování jednotlivých aspektů jakosti mléka, sýrů a mléčně kysaných výrobků a metodami hodnocení této jakosti. Součástí bude výzkum orientovaný na významné druhy mléčných baktérií.

Upřesnění 2003

Sledovat se budou změny mléčných bílkovin po tepelném, resp. proteolytickém zásahu v mléce a mléčných výrobcích pomocí vyvinutých imunosond.

Ověřovat se bude antimikrobiální účinnost vybraných kmenů BMK v mléce různé tučnosti. Studovat se bude využití kmene *Lactococcus lactis* subsp. *lactis* LTM 32 pro výrobu termizovaných tvarohových desertů, hodnocení antibakteriálního efektu použitého kmene vůči *Bacillus cereus*, využití různých metod identifikace rodu *Lactobacillus* sp. k určení změn druhového zastoupení rodu *Lactobacillus* při zrání polotvrdých sýrů s nízkodohřívanou syřeninou (vliv surovin a podmínek výroby na tvorbu textury tavených sýrů). Pro testování sterility tvárných mléčných výrobků bude využita impenetrace metoda.

Další studium se bude týkat interakcí polysacharidových hydrokoloidů a mléčných bílkovin (vliv kokultivace *Bifidobacterium* sp. a *Lactobacillus delbrueckii* subsp. *bulgaricus* 11842, *Streptococcus thermophilus* 143 a

Lactobacillus delbrueckii subsp. *lactis* 2.8. na počet bifidobakterií ve směsích, upřesnění metodiky na stanovení subletálně poškozených BMK a G+ a G- zástupců bakterií technologicky nežádoucích). Studovat se bude vliv nisinu působícího samostatně a v kombinacích s fyzikálními a chemickými stresy na subletálně poškozené BMK a technologicky nežádoucí bakterie a kvasinky.

Charakterizován budou antifungálně aktivní metabolity kmene *Lactobacillus rhamnosus* VT1.

Předpokládá se dokončení studia složení kaseinů sýrů a mléka pomocí vypracované metody kapilární elektroforesy.

B.3 Cereální výrobky a cukrovinky

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

Upřesnění 2003

Výzkum se bude zabývat identifikací polysacharidů v potravinách, zejména cukrovinkách a potravinových doplňcích za využití fyzikálně-chemických metod pro sledování fázových stavů v čokoládových a nečokoládových cukrovinkách.

B.4 Ovoce a zelenina

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

Upřesnění 2003

Předpokládá se pokračování v uvedených dílích projektech: Možnosti zvyšování kvality konzervačních výrobků, nové technologické postupy prodloužení jejich skladovatelnosti, metody a postupy průkazu falšování výrobků. Příprava a udržování databáze markerů jednotlivých komodit (kečupy, ovocné šťávy, instantní káva aj.).

Připravuje se metodika pro posouzení vlivu technologického zpracování na antioxidační vlastnosti ovoce a zeleniny. Dále budou sledovány mechanismy a dynamika průniku patogenů do vegetativních pletiv kultivarů bramboru (ve spolupráci s VÚRV v Ruzyni). Budou dokončena a vyhodnocena srovnávací měření anatomicko-morfologických charakteristik různých pletiv uvedených kultivarů bramboru.

B.5 Produkty kvasného průmyslu

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

Upřesnění 2003

Předpokládá se pokračování podle plánu, rozšíření rozsahu metodik hodnocení antioxidačních vlastností chmele chmelových výrobků, porovnání výsledků získaných metodami s odlišným principem hodnocení a nalezení vztahu technologických zásahů k aktuálnímu antioxidačnímu stavu. Podrobnější sledování složek vína ve vztahu k jeho stabilitě.

C Hygienicko-toxikologická jakost potravin

C.1 Antinutriční látky

Výzkum bude zaměřen na studium významných skupin těchto látek, zejména antinutričních látek olejnin a luštěnin.

Upřesnění 2003

Studium se bude zabývat možnostmi snížení obsahu antinutričních látek v luštěninách (čočka, fazole, cizrna) zejména klíčením, tepelnými procesy, působením vysokého tlaku aj. a možnostmi využití takto upravených luštěnin při přípravě pokrmů. Součástí bude hodnocení výživové a senzorické hodnoty luštěninových pokrmů.

C.2 Přirozené toxické látky

Výzkum bude zaměřen na studium glykoalkaloidů brambor a glukosinolatů brukvovitých rostlin (zelenin, olejnin) za podmínek skladování a zpracování. Součástí bude sledování změn těchto látek v souvislosti se změnami nutriční a senzorické jakosti.

Upřesnění 2003

Výzkum bude zaměřen na sledování hladin furanokumarinů, fytoestrogenů a minoritních glykoalkaloidů v produktech organického zemědělství (solamariny apod.), vývoj metod, zastoupení v potravním koší, změny po technologickém zpracování.

C.3 Aditivní látky

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

Upřesnění 2003

V dílčí části projektu zaměřené na studium aktivních obalů s imobilizovanými nebo inkorporovanými aditivními látkami se bude pokračovat ve studiu další konzervační látky, budou také sledovány vlastnosti obalových materiálů (migrační charakteristiky, mechanické vlastnosti apod.).

C.4 Kontaminanty v potravním řetězci

Pozornost bude nadále věnována nejvýznamnějším skupinám kontaminantů potravin, zejména polychlorovaným bifenylům, aromatickým uhlovodíkům, mykotoxinům, reziduími persistentních a moderních pesticidů a některým dalším skupinám kontaminantů (ftalátům, antropogenním estrogením látkám, syntetickým analogům pížíma). 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.

Upřesnění 2003

Pokračovat se bude ve studiu toxických produktů plísní rodů *Fusarium* a *Alternarium*, xenoestrogeny ve vodním ekosystému, polybromované perzistentní kontaminanty (retardátory hoření), alkylované fenoly. Součástí bude validace analytických metod pro sledování incidence ve vodních biotech, změny při zpracování.

Pozornost bude jako v minulých letech soustředěna na postupy analýzy fyzikálních nečistot, fyzikálních nebezpečí, posuzování struktury potravin, technologických defektů apod. s využitím počítačové analýzy obrazu v kombinaci s mikroskopií a makroskopií.

C.5 Systém HACCP v potravinářském průmyslu

Pozornost bude věnována systému HACCP v různých oborech potravinářského průmyslu.

Upřesnění 2003

Bude se pokračovat ve výzkumu z minulých let. V rámci podpory zdravotní nezávadnosti potravin budou připravovány podklady (teoretické i experimentální) pro optimalizaci systému kritických bodů v podnicích výrobců potravin. Budou získávána vlastní experimentální data a shromažďována dostupná data k přípravě databází pro analýzu nebezpečí (souvislosti mezi vlastnostmi potravin a schopnostmi patogenů a kazící mikroflóry přežít a množit se v potravinách). Budou také připravovány podklady pro podporu Svazů výrobců při přípravě

směrnic a příruček pro zavedení principů správné výrobní a hygienické praxe (GMP/GHP).

D. Potravinářská analytika

D.1 Metody hodnocení výživové, senzorické a technologické jakosti

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

Upřesnění 2003

Součástí budou analytické a zejména elektromigrační techniky zaměřené na podporu aktivit uvedených v předcházejících modulech. Vedle studia fyzikálních nečistot budou sledovány také technologické defekty. Bude se pokračovat ve vývoji dynamických metod senzorické analýzy pro sledování kvality potravinářských surovin a potravin, aplikaci techniky SPME ve spojení s GC/MS při analýze senzoricky aktivních látek, aplikace metody LC/MS v reziduální analýze polárních kontaminantů, studium kompenzace matričních efektů.

Nově se výzkum bude týkat studia preferencí vybraných potravin a pokrmů u české populace. Dále bude řešena problematika databázového zpracování analytických dat (z obrazové analýzy a ze senzorických analýz) s využitím softwaru MySQL ve verzi pro operační systém Windows NT a Windows 2000 a sběru dat prostřednictvím počítačové sítě. Dokončení validace metody pro stanovení jednotlivých tokoferolů v komplexních vzorcích typu celodenních diet. Sledování vlivu technologické úpravy pokrmu na příjem některých živin. Hodnocení výživové hodnoty stravy v české populaci na základě analytických hodnot, bilančních výpočtů a sociologického průzkumu. Sociologický průzkum vnímání zdravotních rizik z potravin u vybraných skupin populace.

Bude pokračováno ve vývoji chromatografických, případně spektrálních metod, které mají sloužit k identifikaci náhrad kakaového másla v čokoládových výrobcích. Jedná se o náhrady mísitelné i nemísitelné s kakaovým máslem.

Vzhledem ke rozšiřujícímu se využívání polysacharidů nejen jako želurujících látek, ale také jako plnidel a stabilizátorů, bude vypracován postup k jejich rychlé a spolehlivé identifikaci ve vybraných potravinářských produktech. Identifikace bude založena na interpretaci infračervených spekter. K tomu účelu bude vytvořena knihovna spekter potravinářských polysacharidů a na spektrech standardů bude ověřena přítomnost polysacharidů ve zkoumaném materiálu.

D.2 Metody stanovení přírodních toxinů a dalších biologicky aktivních látek

Výzkum je soustředěn na prioritní přírodní toxické látky, zejména na látky vykazující estrogenní účinnost.

Upřesnění 2003

Bude se pokračovat ve sledování biologicky aktivních fenolových látek v přírodních materiálech a potravinách pomocí kapilární elektroforezy. Pozornost bude věnována i minoritním fytoestrogenům vojtěšky a soji a vedle kapilární elektroforezy se bude využívat i RIA metoda.

D.3 Metody stanovení kontaminantů

Studovány jsou moderní separační metody, zejména moderní techniky plynové a kapalinové chromatografie a elektromigrační metody.

Upřesnění 2003

Studovat se bude aplikace plynové chromatografie ve spojení s "time of flight" hmotnostní spektrometrií, spojení se SPME, využitím v reziduální analýze (pesticidy, environmentální kontaminanty).

D.4 Metody stanovení pathogenních mikroorganismů

Výzkum se zabývá závažnými potravními patogeny, především rodů *Salmonella* a *Listeria*.

Upřesnění 2003

Bude se dále rozvíjet a optimalizovat PCR stanovení potravních patogenů: *Listeria monocytogenes*, *Campylobacter jejuni/coli*, *Salmonella ssp.* a *Yersinia sp.*

D.5 Geneticky modifikované potraviny

Výzkum je především orientován na metodiku průkazu geneticky modifikovaných potravin.

Upřesnění 2003

Při stanovení transgenní DNA bude optimalizována detekce transgenní DNA v řepce. Jako zcela nový problém se bude studovat možnost stanovení transgenní DNA polymerasovou řetězovou reakcí u vybraných kvasinek a bakterií.

VZ MSM 223100005 – 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.

1. Tematický okruh: Separační procesy

Nanofiltrace technických cukerných roztoků

V roce 2003 budou dále pokračovat pokusy s úpravami technických cukerných roztoků nanofiltrací s cílem identifikovat vhodné membrány a nalézt vhodné experimentální podmínky. Bude vyhodnocován efekt separační i zahušťovací

Využití membránové filtrace pro rafinaci škrobových hydrolyzátů

Rozšíření aplikace membránových separačních procesů do oblasti škrobárenství. Ověření možnosti použití membránových technik, jmenovitě tangenciální ultrafiltrace a nanofiltrace při rafinaci škrobových hydrolyzátů.

Metodika: rafinování budou průmyslově vyráběné hydrolyzáty na bázi pšeničného škrobu, připravené kyselou a enzymovou hydrolyzou; budou hledány optimální podmínky pro použití ultra- a nanofiltrace na různých druzích membrán; jako kritéria účinnosti použitého separačního procesu budou sledovány změny: viskosity, vodivosti, obsahu N-látek, barvy a zákalu. Tyto parametry budou určovány jednak v nástřiku a permeátu bezprostředně po separaci a dále v průběhu 3. – 7. měsíce skladování zahuštěného permeátu.

Membránové operace v lihovarství a v biotechnologiích

Bude zkoumáno využití membránových separačních technik při zpracování/likvidaci lihovarských obilných výpalků pomocí mikro-, ultra- a nano-filtrace na keramických membránách technikou "crossflow filtration". Dále bude studován fouling efekt a možnost regenerace membrán. Budou navrhována a zkoumány možnosti aplikace membránových operací v lihovarství, příp. v biotechnologiích.

Kontinuální preparativní chromatografická separace SMB

Aplikace kontinuální preparativní chromatografické separace SMB (Simulated moving bed) bude zkoušena na vlastní vyvinuté pilotní jednotce při dělení sacharidů, cukerných alkoholů, betainu, alkalických solí a dalších látek z modelových i technických roztoků a extraktů.

Bude navržena úprava zařízení umožňující provoz zařízení s recyklem, což dále zvýší účinnost zařízení. Bude vyvinut matematický model procesu a vypracován software s jeho aplikací.

Elektrodialýza při izolaci a zkoncentrování bioproduktů (organických kyselin)

Bude ověřováno využití ED technik pro izolaci a purifikaci kyseliny mléčné z fermentačních médií a pro elektrokonverzi látkatů na kyselinu mléčnou pomocí bipolárních membrán. Výsledky budou součástí studia transportních jevů na iontovýměnných a bipolárních membránách. Dále bude provedeno ověření procesu na reálných vzorcích média, včetně odbarvení média a odstraňování vícevazných iontů kovů pomocí sloupcové chromatografie.

Adsorpční procesy

V roce 2003 bude navržen ekonomicky zdůvodnitelný a použitelný postup izolace a využití těkavých odparů aplikovatelný v provozní pivovarské praxi za účelem snížení obsahu organických složek v plynných efluentech pivovarského varního procesu. Cílem je jejich další efektivnější využití a zhodnocení i k zlepšení ochrany životního prostředí. Současně tím bude zakončena podle původního plánu navrhovaná dílčí část výzkumného záměru.

II) Tepelné procesy a vysoký tlak

Mikrovlňový ohřev při hydrotermické úpravě potravin

Dále bude pokračovat studium chemických a biochemických změn při klíčení a následujícím mikrovlňovým ošetření hrachu a lupiny; změny škrobu při mikrovlňovém ošetření pšenice a rýže; stabilizace pšeničných klíčků mikrovlňovým ohřevem;

Bude vypracován návrh způsobu klíčení a následující hydrotermické úpravy semen hrachu, lupiny a dalších luštěnin s cílem zlepšení stravitelnosti luštěninových pokrmů návrh způsobu stabilizace pšeničných klíčků mikrovlňovým ohřevem.

Mikrovlňový ohřev rostlinných olejů

V roce 2003 bude zkoumán vliv přírodních antioxidantů na oxidaci rostlinných olejů při mikrovlňovém ohřevu. Dále bude vyhodnocen vliv mikrovlňového ohřevu na vznik sekundárních oxidačních produktů v těchto olejích. Bude provedena identifikace některých sekundárních oxidačních produktů vznikajících při mikrovlňovém ohřevu rostlinných olejů

Extruzní a expanzní technologie

V oblasti extruzních postupů bude zkoumán vliv přídavku bílkovin a bílkovinných přísad na složení aromatu cereálních extrudátů. Dále bude provedena optimalizace podmínek extruze při výrobě extrudovaných krmných směsí

Dále bude extruze studována ve spojení s úpravou potravin při tepelném zpracování pečárenských materiálů za současného přídavků fortifikátorů. Bude sledován vliv oxidačních prostředků (jodičnan draselný) na vlastnosti těst pro jemné pšeničné pečivo, příp. speciální těsta. Vliv vyhodnocen vliv oxidačního působení jodičnanu na gliadinové a gluteninové podjednotky pšeničné bílkoviny.

Vysoký tlak

V roce 2003 bude výzkum v oblasti vysokého tlaku orientován na následující problematiku:

- a) Optimalizace podmínek použití vysokého hydrostatického tlaku při konzervaci potravin.
- b) Vliv vysokého tlaku na aktivitu enzymů, modifikace enzymů, vliv modifikace na odolnost modifikovaných enzymů vůči účinkům vysokého hydrostatického tlaku
- c) Vliv vysokého tlaku na funkční vlastnosti obalových materiálů (včetně vlivu na propustnost plynů)

Tepelné procesy

Budou sledovány průběhy teplot, teplotní historie v provezech společného stravování (v souvislosti s probíhající kampaní zavádění systému kritických bodů) s využitím software Food Micromodel. Dále bude prováděna analýza nebezpečí jednotlivých kroků a získané informace budou použity při novelizaci předpisů.

III) Řízení procesů

Databáze vlastností cukerných roztoků, škrobu, škrobových, glukosových a fruktosových sirupů

Na rok 2002 a 2003 byly nově zařazeny tyto cíle řešení: zpracování základních dat o vlastnostech škrobu, škrobových, glukosových a fruktosových sirupů, vložení dat do databáze Nelfood. Do téže databáze budou vloženy i data o vlastnostech cukerných roztoků.

V roce 2003 bude dokončena kompletace databáze fyzikálních vlastností škrobu, škrobových, glukosových a fruktosových sirupů a aktualizována databáze fyzikálních vlastností sacharosy a cukerných roztoků.

Počítačové řízení filmové odpadky

Bude dokončeno komplexní PC řízení filmové odpadky Armfield v oblasti hardware i software. Budou vypracovány úlohy pro využití této pilotní stanice i v laboratorních pracích studentů.

Řízení chladicí krystalizace a stanovení šířky metastabilní oblasti

Řízení chladicí krystalizace sacharidů z roztoků přírodních extraktů je zaměřeno na vývoj metody na stanovení šířky metastabilní oblasti pomocí nízkovýkonového ultrazvuku. V roce 2003 budou zkoumány vlivy různých parametrů (teplota, míchání, složení směsí) a experimentálního uspořádání na výsledné hodnoty přesycení.

Modelování a znalostní řízení bioprocusu

Bude vypracován model biodegradace lihovarských obilných výpalků pomocí aerobních termofilních populací mikroorganismů.

Bude ověřen matematický model elektrodialýzy popisující transportní jevy při izolaci a purifikaci kyseliny mléčné z fermentačních médií.

V roce 2003 bude zkompletován, plně ověřen a publikován model sčezování v pivovarnické technologii. Současně bude dokončen a uveřejněn i model predikce obsahu hořkých látek ve chmelu pomocí snímání spekter ve viditelné a NIR oblasti.

V oblasti pivovarského kvašení budou experimentální práce zaměřeny na dovršení výzkumu problematiky procesu kvašení v technologii HGB s kmeny pivovarských kvasinek používaných v čs. pivovarech. Kvašení výšekcentrovaných mladin představuje do určité míry stresový proces z hlediska osmotolerance a ethanol tolerance kvasinek. Monitoring změn obsahově významných látek a tvorby senzorycky významných látek by měl určit vhodnost ověřovaných kmenů kvasinek pro tuto technologii z hlediska zachování požadované kvality piva.

Optimalizaci procesů

Budou pokračovat dílčí studie zaměřené na optimalizaci procesů zejména s ohledem na zdravotní nezávadnost produkce (proměření teplotního pole, vyhodnocení inaktivačního účinku zářevu, optimalizace technologických postupů – např. odhad maximální prodlevy mezi plněním a sterilací apod.)

V roce 2003 budou dokončeny výzkumy vlivu geneticky kódovaných vlastností v českých pivovarech nejvíce rozšířených národních kmenů kvasnic především na koloidní a senzoryckou stabilitu piva, ovlivnění těchto vlastností (schopnosti optimální tvorby základních buketních látek a tvorby redox potenciálu piva, enzymové aktivity redukce tzv. komponent staré chuti piva především typu karbonylů a tvorby

přirozených antioxidantů) podmínkami regulace technologického procesu kvašení.

IV) Metody na kontrolu technologické jakosti

Výzkum v této oblasti je orientován především na následující oblasti: Postupy posouzení dodržení deklarované technologie výroby potravin, postupy pro detekci defektů potravin,

vývoj analytických metod pro hodnocení technologické jakosti potravin a postupy na nezávislé posuzování systému zajištění jakosti a zdravotní nezávadnosti (příprava podkladů pro novelizaci předpisů a norem atd., sylaby školení, publikace)

Aplikace NIR při měření parametrů cukrovinkářských hmot a produktů

V roce 2003 bude ukončena kalibrace různých typů NIR spektroskopů pomocí analytických parametrů cukrovinkářských hmot a produktů. Na základě kalibrací bude možné používat NIR spektroskopii ke technologické kontrole v cukrovinkářských závodech.

Aplikace NIR při analýze cereálních výrobků

Technika NIR bude aplikována v následujících oblastech: možnosti predikce alveografických charakteristik pomocí NIRS6500, vyhodnocení vztahů mezi fermentografickými charakteristikami kynutého těsta a spektrální analýzou pšeničné mouky, predikce tzv. Zeleného sedimentačního hodnoty potravinářské pšenice pomocí NIRS 6500 a stanovení vlhkosti těsta a žitných kvasů.

Reologie cereálních meziproduktů

Budou sledovány vlastnosti fermentovaného pšeničného těsta pomocí fermentografu SIA (Švédsko): zejména vliv jakosti pšeničné mouky a recepturních složek pšeničného pečiva, změny viskoelastických vlastností těsta, kvasná mohutnost mouky, vliv podmínek fermentace, sledování kvality pekařského droždí aj.

Bude pokračováno v zavádění tzv. Zeleného testu pro sledování pekařské jakosti potravinářské pšenice (zejména vliv přípravy pšeničné mouky, ověření různých režimů před mletím, korelace s reologickými charakteristikami aj.)

Kontrolní metody v cereální technologii

Ve spolupráce s ČSNI se bude pokračovat v úpravách a přípravě ISO norem a na přípravě sjednocování norem Komise pro evropskou normalizaci (CEN) v oblasti obilovin. Bude pokračovat informační a publikační činnost pro pracovníky výrobní praxe výkupu, skladování i zpracování cereálních surovin ve mlýnech, těstárnách a pekárnách.

Bude pokračovat spolupráce při vypracování a zavádění příruček správné výrobní praxe (GMP) a správné hygienické praxe (GHP) v provozech mlýnů, pekáren, těstáren, cukráren, výroby

Počítačová analýza obrazu (Image analysis)

V roce 2003 bude metoda IA dále rozvíjena v oblasti cereální technologie při hodnocení pekárenských produktů – např. morfologie pečiva, při hodnocení technologické kvality cereálních surovin (granulační spektrum mlýnských výrobků), dále v oblasti krystalizace (on-line řízení procesu krystalizace, měření velikosti částic) a při aplikacích v cukrovinkářském, škrobařském a tukovém průmyslu.

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

Tyto metody mají na fakultě tradici a v řadě případů byly právě zde vypracovány metodiky měření pro potravinářský průmysl (2002)

V roce 2003 bude ukončen vývoj metody stanovení aldehydů v pivu pomocí chromatografické metody GC-MS. Stejná metoda bude použita na charakterizaci iso-alfa-hořkých látek. Dále bude vyvinuta metoda charakterizace zákalu v pivech pomocí průtokové fluorescenční cytometrie.

V úseku pivovarského kvasného procesu bude provedeno hodnocení fyziologického stavu aktivity pivovarských kvasinek zahrnující acidifikační test a metodu průtokové cytometrie bude prováděno zejména v souvislosti s problematikou kvašení v techno-logii HGB. Z kvalitativních parametrů hodnocení jakosti piva bude pozornost soustředěna na optimální obsah dusíkatých látek a aminokyselin z hlediska senzorické stability piva a jeho pěnivosti. Ta bude hodnocena klasickými a moderními přístrojovými metodami na základě předchozí izolace účinných složek. Metoda průtokové cytometrie bude dále spolu s nově pořízeným přístrojem - buněčný tříděč (sorter) - využita pro studium změn projevů stárnutí kvasinek *Saccharomyces cerevisiae* a k hodnocení jakosti nápojů (přítomnost kontaminace, zákalů, apod.).

Porovnání sacharidických profilů vybraných potravinářských komodit stanovených katexovou a anexovou HPLC

Využití aniontové kapalinové chromatografie s elektrochemickou detekcí při stopové analýze sacharidů ve vzorcích potravin. Srovnání aniontové chromatografie v alkalickém prostředí s pulzní amperometrickou detekcí (HPAEC – PAD) s kationtovou chromatografií využívající refraktometrické (RI) detekce.

Metodika: porovnání sacharidických profilů škrobových hydrolyzátů s různým DE katexovou a anexovou HPLC; porovnání sacharidických profilů medů (květový, smíšený, medovicový) katexovou a anexovou HPLC; porovnání metod pro průkazy falšování medu přidávkou škrobových hydrolyzátů katexovou (stávající) a anexovou (Dionex) HPLC; porovnání sacharidických profilů dalších potravinářských komodit, např. ovocných šťáv, džusů, kečupů apod.; porovnání sacharidických profilů DIA výrobků slazených umělými sladidly.

V) Vyšší zhodnocení odpadů a meziproduktů potravinářských technologií a využití surovin potravinářského průmyslu pro nepotravinářské aplikace

Uplatnění bílkovinného koncentráту ze syrovátky

Při studiu problematiky přípravy a uplatnění bílkovinného koncentráту ze syrovátky budou zkoumány aplikace při výrobě přírodních sýrů (WPC). Cílové etapy: modifikace koncentrátů a aplikace v potravinářském průmyslu.

Využití nadbytečné produkce řepkového oleje

V roce 2003 bude dále studováno využití nadbytečné produkce řepkového oleje pro emulgované a pokrmové tuky. Cílové etapy: interesterifikace řepkového oleje a konverze alkylesterů s ethylenoxidem a vybranými polyoly

Další oblast výzkumu bude orientována na využití řepkového oleje (derivátů) a sacharosy (cukroesterů, cukroglyceridů) na výrobu tenzidů (biologicky rozložitelné složky práškových a tekutých detergentů, náhrada fosfátů v pracích práškách a prostředcích na mytí nádobí). Cílová etapa: vývoj prostředků a studium jejich účinnosti.

Fermentace přírodních extraktů na bioethanol

Bude vyhodnocena možnost využití netradičních sacharidických zdrojů – různých typů rostliny *Jakon* – pro zpracování pro potravinářské i nepotravinářské účely.

Výpalky z fermentace a destilace surové řepné šťávy budou podrobeny různým typům odpařovacích procesů a ze zahuštěného produktu bude krystalizací získáván síran draselný a sodný. Budou vyhodnoceny základní data odpařovacího a krystalizačního procesu včetně hmotnostní bilance.

Zhodnocení lihovarských výpalků pro krmné účely

Dále bude pokračovat studium problematiky zhodnocení lihovarských výpalků pro krmné účely. Cílem výzkumu je získání nutričně hodnotných frakcí použitelných jako „BSE-free“ bílkovinný koncentrát.

Moderní postupy v balení potravin

V oblasti moderních postupů v balení potravin bude věnována pozornost následujícím tématům: Optimalizace způsobu přípravy obalů s antimikrobiální funkcí, rozvoj techniky sledování propustnosti fólií pro plyny a vodní páru, výzkum v oblasti minimálně opracovaných potravin, zejména balení dýchajících potravin v atmosféře s vysokou koncentrací kyslíku a studium antioxidačních vlastností vedlejších zemědělských produktů

Vývoj biodegradabilních obalů na bázi polysacharidů

Nadále bude věnována pozornost hydrofobizaci materiálů na bázi škrobu a celulosy jejich povrchovou úpravou pomocí biologicky odbouratelných syntetických polymerů na bázi kopolyamidů a kopolyesterů.

Vývoj derivátů pektinů, chitinu a kyseliny ferulové

V roce 2003 bude pokračovat derivatizace pektinů s alkylaminy, alkyldiaminy (počet uhlíků 2-18), hydrazinem a hydroxylaminem. Deriváty budou charakterizovány pomocí organické analýzy, vibrační spektroskopii a NMR spektroskopii. Modifikací pektinů vzniknou deriváty, které na rozdíl od pektinů mají změněné fyzikálně-chemické vlastnosti. Předpokládání použití – stabilizátory emulzí, vázaní žlučových kyselin a čištění odpadních vod.

Bude prováděna izolace a charakterizace chitinových komplexů s dalšími polysacharidy z různých biologických zdrojů. Účel – nalezení nových zdrojů chitinu, který je surovinou pro výrobu chitosanu. Chitosan je účinná přídatná látka v komerčních potravinových doplňcích, léčích a kosmetice.

Bude pokračovat studie komplexu pektin-kyselina ferulová ve vysazených řepných řízciích, které jsou vedlejším produktem v cukrovarnictví. Kyselina ferulová je zdrojem pro výrobu vanilinu a důležitý antioxidant, což je zvláště zajímavé ve spojení s řepným pektinem.

VZ MSM 223100006 – Biochemické, mikrobiologické a molekulární genetické studie vytvářející teoretický základ pro moderní biotechnologie

1. Studium struktury a funkce biomolekul

1.1 Vliv sacharidové části glykoproteinů na funkci glykoproteinu

V roce 2003 se chceme především soustředit na využití nových metodik studia konformace proteinů pomocí hmotnostní spektrometrie. Jde o mapování povrchů na základě specifických chemických modifikací reaktivních postranních řetězců aminokyselin a vyhodnocení jejich dostupnosti pro jednotlivá modifikační činidla. Tímto způsobem by měly být prostudovány konformační rozdíly mezi glykoproteiny a jejich deglykosylovanými deriváty. Do konce roku 2003 by měly být publikovány výsledky týkající se všech dosud studovaných glykoproteinů, tedy orosomukoidu, fetuinu, glukosaoxidasu a invertasy.

1.2 Studium glykosylace a transglykosylace

Bude studována prostorová struktura β -galaktosidasu z psychrotolerantního kmene *Arthrobacter sp.* C2-2. Při tomto studiu budou využity metody modelování (predikce struktury, metody s využitím silového pole), což umožní sledovat podstatu adaptačního procesu pro funkci enzymu při nízkých teplotách.

Dále bude izolována a charakterisována β -galaktosidasa z psychrofilního kmene *Arthrobacter sp.* C1-1. Její struktura a

vlastnosti budou porovnány s β -galaktosidasou z výše uvedeného psychrotolerantního kmene C2-2.

1.3 Posttranslační fosforylace proteinů a peptidů

Pomocí analytických metod vyvinutých na modelových proteinech budeme sledovat množství fosfátových skupin v bílkovinách izolovaných z řady vzorků lidských tkání (dentin, pepsinogeny a pepsiny). Ke studiím budou použity techniky na bázi kapilární elektroforesy, monoklonálních protilátek a HPLC technik. Bude dokončena studie vlivu fosforylace na proteolýzu bílkovin.

Podobnými experimentálními přístupy bude studován vliv myristylace a biologicky relevantních bodových mutací na konformaci a stabilitu strukturních proteinů retrovirů. Pro tuto práci bude použit myristylovaný matrixový protein a jeho nemyristylovaný analog.

1.4 Enzymoimunoanalýza haptenu

Stanovení N-methylkarbamátů v modelových a reálných vzorcích potravin a jiného biologického materiálu

Vývoj specifického imunochemického formátu pro detekci *Listeria monocytogenes* v potravinách

1.5 Fosfolipasy v rostlinném metabolismu lipidů a fosfolipidů

Program projektu v roce 2003 bude vycházet z výsledků dosažených v předcházejících letech řešení. Budeme pokračovat ve studiu funkce fosfolipasy v procesech přenosu signálu v rostlinných buňkách zejména v obranné reakci rostliny proti stresovým faktorům, zvláště po působení elicitorů a chemických induktorů SAR (kyseliny salicylové, benzothiadiazolu). Dále se zaměříme na studium regulace aktivity fosfolipasy Dz klíčních rostlin *Brassica napus*.

1.6 Vliv vybraných vnějších faktorů na aktivitu technologicky zajímavých enzymů

V oblasti vlivu vysokého isostatického tlaku na aktivitu a stabilitu potravinářsky významných enzymů bude pokračováno ve studiu potenciálního vlivu přidaných stabilizátorů na stabilitu enzymu glukosaoxidasu, papainu, askorbát oxidasy, polyfenol oxidasy a pektinesterasy. Jako stabilizující aditiva budou testovány alkoholické cukry a neredukující oligosacharidy. Vliv vysokého tlaku bude porovnáván s termostabilitou uvedených enzymů. Bude studován vliv chemické modifikace zmíněných enzymů na jejich stabilitu vůči oběma vlivům.

1.7 Biologicky aktivní deriváty sacharidů a studium interakcí na molekulové úrovni

V rámci studia prostorového uspořádání sacharidů bude v roce 2003 zahájeno systematické mapování konformačního prostoru v silovém poli AMBER, čímž bude uzavřena kapitola mapovacích analýz na úrovni molekulové mechaniky. Se silovými poli CFF97 v programu Discover a AMBER budou započaty molekulárně-dynamické studie s explicitní přítomností molekul rozpouštědla. Vliv rozpouštědla na prostorové uspořádání jednoduchých monosacharidů bude rovněž studován kvantově chemickými výpočty s použitím dostupných solvačních modelů v programu Gaussian98.

Vypracovaná metodika přípravy diastereoisomerních C-disacharidů, obsahujících D-glukosu nebo D-galaktosu spojenou methylenovým můstkem se 2-deoxyglukosou bude použita i pro syntézu odpovídajících C-disacharidů s konfigurací D-manno tak, aby bylo možno vyhodnotit biologickou aktivitu těchto potenciálních inhibitorů glykosidas v závislosti na jejich struktuře.

Optimalizovaný protokol Mitsunobuovy aktivace hydroxylových skupin bude použit při přípravě analogů 5'-thioadenosinu modifikovaného thioheteroarylem v poloze 5'. Zároveň budou připraveny nukleosidy, které budou mít cukernou část molekuly modifikovanou připojeným pyrazolidinovým kruhem v poloze 3' a 5'.

2 Využití biologického potenciálu mikroorganismů a rostlin v průmyslových a environmentálních technologiích

2.1 Mikrobiální degradace organických polutantů

Dokončení komplexní metodologie monitorování a charakterizace procesu kolonizace modelových nosičů populacemi prokaryotních a eukaryotních kmenů s použitím: navrženého průtočného systému a analýzy obrazu. Studium vlivu hydrofobicity buněčného povrchu a povrchově vázaných polysacharidů na vývoj biofilmu modelových biodegradérů. Vliv huminových látek v přípravě a reaktorové (biodegradční) funkci biofilmu.

Příprava a testování nových náplňových materiálů pro biofiltry eliminující uhlovodíky. Individuální studium degradace benzínu Natural, acetonu a fenolu se zaměřením na hydrodynamické chování, typ biodegradéra, kinetiku procesu a návrh a ověření „biotrikling filtru“. Izolace, identifikace a testování nových biodegradérů vůči nitrosloučeninám.

2.2 Mikrobiální biomasa pro sorpci těžkých kovů

V roce 2003 budou pokračovat experimenty věnované sorpci těžkých kovů na peptidy produkované geneticky modifikovanými bakteriálními kmeny do růstového média. Zaměříme se na možnost jejich imobilizace a charakterizaci vzniklých nosičů.

V návaznosti na zprovoznění elektrochemického senzoru na analýzu těžkých kovů v roztoku v on-line režimu bude v roce 2003 pokračovat jeho zapojení na výtok z kolony plněné bisorbentem a budou pokračovat pokusy ve čtvrtprovozním měřítku. Jako bisorbenty těžkých kovů budou použity materiály vyvinuté v předchozích letech. Pro návrh bioadsorberu bude použit počítačový model rovněž využitý v předchozích letech. Bude rovněž studován vztah tvaru sorbentu na účinnost biosorbce a bude doplněno studium vlivu kultivačních podmínek biosorbčního materiálu na jeho biosorbční vlastnosti. Budou rovněž testovány nové peptidy navržené na základě počítačového modelování a které byly navrženy tak aby preferenčně vázaly ionty Hg^{2+} .

2.3 Mikroorganismy v biodegradčních a dekontaminačních procesech

V oblasti dekontaminačních procesů bude i nadále věnována pozornost způsobu kontroly procesu dekontaminace vzduchu v provozních biofiltrech instalovaných v lakovnách v Krušnohorských strojárnách v Komořanech a ve Vysoké Peci. Na základě modelování spolu s chemicko-inženýrskými výpočty budou stanoveny potřebné rozměry a poté bude instalován biofiltr v lakovně v Radonicích pro halu s ručním stříkáním barev. Bude zjišťována biologická odbouratelnost vybraných látek – potenciálních kontaminantů ze zemědělsko-potravinářského komplexu – pomocí používaných kmenů rodu *Acinetobacter* a *Klebsiella*.

2.4 Mikroorganismy v potravinářských technologiích

- 1) Přenos genů nisinového operonu mezi různými kmeny *Lactococcus lactis* konjugací. Charakterizace fenotypu a genotypu nových generací transkonjugovaných kmenů *Lactococcus lactis*.
- 2) Indukce produkce bakteriocinů (acidocin CH5, nisin) pomocí různých metod.
- 3) Pokračování identifikace antifungálně aktivních metabolitů BMK.

2.5 Studium toxicity látek pomocí buněk

V rámci výzkumu zaměřeného na monitorování negativního vlivu xenobiotik a sloučenin z nich vznikajících v prostředí mikrobiální degradací bude pokračovat stanovení toxicity degradčních produktů vybraných škodlivých látek uváděných uměle do životního prostředí. V tomto bodě bude rozvinuta spolupráce se skupinami zaměřenými na biodegradaci polutantů v rámci záměru. Toxicita bude vyhodnocována pomocí lidských

buněk ve tkáňové kultuře (konkrétně HeLa buňky). Pro zvýšení citlivosti se pokusíme vyvinout buňky vhodné pro fluorimetrické vyhodnocování (např. exprese GFP).

3 Genové inženýrství v biotechnologiích

3.1 Rozvoj technik genového inženýrství

Budou klonovány, exprimovány a izolovány vybrané enzymy biodegradční dráhy v bakteriích *Rhodobacter capsulatus*, *Rhodopseudomonas palustris* případně v *Alcaligenes* sp. Pozornost se bude věnovat metabolismu chlorovaných bifenylů.

3.2 Funkční genomika vybraných genomů

Bude pokračovat výzkum v oblasti studia exprese retrovirových proteinů, zejména s cílem nalézt oblast minimální domény pro tvorbu částic s fluorescenční značkou pro ověření možnosti internalizace kapsid ve tkáňových kulturách. Bude ověřena lokalizace vybraných domén v lidských buňkách a jejich případný cytopatický efekt.

3.3 Mikrobiální kmeny pro potravinářské technologie

- a) DNA analýza geneticky modifikovaného kmene *Lactobacillus plantarum* produkujícího L(+) isomer mléčné kyseliny. Testování jeho genetické a produkční stability za laboratorních podmínek.
- b) Charakteristika vybraných kmenů termofilních bakterií (např. *Bacillus stearothermophilus* CCMI 237) metodami DNA analýzy a metodami fenotypové analýzy (aplikace fluorescenčních sond, průtoková cytometrie),
- c) Aplikace metod průtokové cytometrie ke sledování projevů stárnutí kvasinek *Saccharomyces cerevisiae* (wt, mutace RAS2val19, RAS2val19,ser33, RAS2ser33), hodnocení buněčného cyklu, obsahu DNA a analýza znaků buněčné smrti.

VZ MSM 223100007 – Reakčně-transportní chemicko-inženýrské systémy a jejich dynamické chování, modelování a řízení chemických a biotechnologických procesů

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

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

Experimentální práce v oblasti výzkumu dynamiky a metod řízení monolitických reaktorů budou zaměřeny na úpravu a využití vybudovaného experimentálního počítačem řízeného reaktoru k měření různých typů katalyzátorů (TWC – three – way catalyst, SCR – selective catalytic reduction katalyzátor, kombinovaných katalyzátorů, kombinace více typů katalyzátorů – katalyzátor s vysoko a nízkoteplotním ukládáním NOx). Bude navrženo experimentální zařízení pro měření transportních parametrů (efektivní difusní koeficient) ve vrstvě katalyzátoru („washcoat“) na kovovém nosiči. V rámci využití metod matematického modelování budou vyvinuty příslušné matematické modely a budou použity pro vyhodnocení parametrů na základě naměřených experimentálních dat a pro studium a návrh nestacionárního provozu reaktorů.

- Provoz zkonstruovaného katalytického reaktoru s recyklem, který umožňuje studovat kinetiku reakcí a transportní efekty v izotermních podmínkách při řízené intenzitě vnějšího přestupu hmoty bude ověřován pro TWC a SCR katalyzátory. Vyvinuté matematické modely budou použity k vyhodnocení kinetických a transportních parametrů.

1.2. 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: Bude prováděna výstavba nové míchací aparatury průměru 600 mm se 3 míchadly. Pokračování v proměřování lokálních intenzit disipace energie v okolí různých typů míchadel v disperzi kapalina - plyn. (Míchadlo Techmix 335, míchadla se šikmými lopatkami - Pitched Blade, míchadla Narcissus, Rushtonovy turbíny). Porovnání bude provedeno pro různé typy vsádek jako jsou vsádky koalescentní, nekoalescentní a viskózní.

1.3. 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: Zpřesnění metodiky měření zádrže plynu v disperzi jednak v probublávané koloně a jednak v mechanicky míchané nádobě. Budou dokončena měření mezifázové plochy a koeficientu přestupu hmoty ve vsádce s přídavkem odpeňovačů. Proměření fyzikálních vlastností, tj. hustota, povrchové napětí, viskozita modelových vsádek.
- Studium integrálních charakteristik toku fází a mezifázového transportu hmoty ve věžových výměnících hmoty (plněné absorpční a destilační kolony): Bude ověřována na pracovišti navržená metodika stanovení objemových koeficientů přestupu hmoty na straně plynu a kapaliny v destilační koloně. Metodika vychází z dříve naměřených absorpčních a destilačních dat na sypané výplni Pall kroužků a destilačních systémech metanol-etanol a etanol-voda.
- Vytvoření a ověření modelu vícesložkové destilace vycházejícího z naměřených dat dílčích koeficientů přestupu hmoty. Experimentální ověření modelu bude provedeno s destilačním systémem etanol-metanol-voda.

1.4. Modelování a simulace stupňových a spojitých separačních procesů.

- Budou založeny a systematicky rozšiřovány databanky fyzikálně chemických vlastností uhlovodíků tak, aby mohly být využívány pro výběr reálných složek charakterizujících mnohasložkové ropné směsi.
- Budou dále rozpracovávány metody netradiční charakterizace ropných frakcí pomocí vybraných reálných složek vycházející z matematického modelování získávání destilačních křivek tak, aby získaná složení náhradní charakterizační směsi mohla být použita při modelování separačních zařízení zpracovávajících tyto frakce a to nejen pro případ existence jediné ale i dvou kapalných fází.
- Bude rozpracován dynamický model nerovnovážného stupně typu V-L1-L2 vycházející při popisu rovnováhy L1-L2 a dějů přenosu hmoty na rozhraní V-L1 ze stavové rovnice (např. Pengovy - Robinsonovy) tak, aby mohl být standardně využíván ke stacionárnímu a dynamickému modelování rektifikačních kolon v průmyslu zpracování ropy.

1.5. Studium hydrodynamických charakteristik v jedno- a třífázových modelových reaktorech, makroinstabilitní chování.

- Výzkum a modelování průběhu homogenizace kapalně fáze. Experimentálně bude sledován průběh homogenizace kapalně vsádky v závislosti na různých provozních podmínkách: počet a typ míchadel, vlastnosti kapalně fáze (viskozita a povrchové napětí), průměr zrn a smáčecí úhel pevné fáze.
- Budou počítány parametry modelů popisujících průběh homogenizace kapalně fáze: buňkový model, disperzní model a stochastický model. Dále budou porovnány parametry spočtené metodou CFD s parametry získanými z experimentů.

- Studium suspendačních charakteristik při míchání dvoufázového systému kapalina-pevná fáze pro různé typy axiálních míchadel s rovnými a tvarovanými lopatkami (Lightnin A315, Techmix 335) v závislosti na velikosti částic, koncentraci a geometrickém uspořádání při míchání suspenzí v nádobě poloprovodního měřítka. Výsledky měření budou porovnány s charakteristikami vypočtenými pomocí CFD (program FLUENT, nadstavba MIXSIM).

- Experimentálně bude studována separace pevných částic flotační metodou. Bude sledován vliv fyzikálních vlastností rozhraní pevná fáze, kapalina a plyn. Tyto vlastnosti jsou charakterizovány povrchovým napětím a smáčecím úhlem. Pro měření povrchového napětí bude využita stávající aparatura a pro měření smáčecích úhlů je vyvinuta metodika s využitím videotechniky.

- Budou studovány nestandardní průtočné míchané vícefázové systémy. Experimentální údaje budou zpracovány pomocí nově vytvořených modelů.

- Projevy makro-nestabilitního charakteru toku kapalných vsádek v mechanicky promíchávaných nádobách budou studovány prostřednictvím analýzy silových účinků kapaliny na radiální narážky v nádobě. Záznamy časového průběhu tangenciální složky síly působící na narážku budou analyzovány metodami nelineární analýzy časových řad s cílem dekomponovat měřený signál na složky odpovídající nestabilitám toku s různými charakteristickými časovými a prostorovými měřítky. Bude přitom využito technik uváděných v bodě 3.5 tohoto výzkumného záměru. Jednotlivé složky signálu budou pak využity k rekonstrukci chaotických atraktorů, pro které pak budou vyčísleny hodnoty jejich invariantů (např. dimenze a Ljapunovovy exponenty) v závislosti na provozních podmínkách míchadla a míchacího zařízení a v závislosti na poloze měřicího místa na narážce. Prostorové rozložení hodnot invariantů podél narážky bude využito k vyvození závěrů pro konstrukci a provoz míchacích nádob.

1.6. Modelování dynamiky polymeračních procesů v heterogenních reaktorech, využití mikroreaktorů.

- Budou studovány problémy růstu a morfologie částic polymeru v heterogenních katalytických reaktorech. Bude nadále zdokonalováno zařízení pro experimentální studium kinetiky heterogenně-katalytických polymerací a sorpci/desorpci v minireaktoru malého objemu s možností gravimetrického sledování rychlosti přírůstku hmotnosti částic polymeru při teplotách do 150°C a tlacích do 50 bar. Experimentální zařízení bude upraveno pro provádění experimentů v průtoku plynné fáze. Pozornost bude věnována především ranému stadiu vývoje částic polymeru včetně problému odpařování těkavého zředěvačů z porézních částic.

- Experimentálně získané mikroskopické obrázky (např. SEM a TEM mikroskopie) částic polymeru a katalyzátoru budou systematicky analyzovány prostředky matematické morfologie. Na základě již vyvinutých a nově vyvíjených metodik meso-skopického modelování bude probíhat ověřování prediktivního modelu pro popis morfogeneze částic polymeru. Tedy modelovací metodiky jsou založeny na konceptech rekonstruovaného porézního nebo vícefázového prostředí a na reprezentaci porézního prostředí aglomerátem mikro-elementů s visko-elastickými interakcemi.

- Bude testována potenciální aplikace mikro-technologií založených na skle FOTURAN pro výstavbu mikro-fluidního reaktoru, který by umožnil rychlé ověření kinetických vlastností heterogenních katalyzátorů. V mikro-kanálkových zařízeních lze studovat proces bobtnání a růstu polymerních částic, vliv obtoku částice na její růst, teplotu rostoucí částice bezkontaktním měřením a lze vizuálně zaznamenávat morfogenezi částic. Budou připraveny a analyzovány koncepty výstavby těchto zařízení a jejich

aplikace při teplotách do 100°C a za mírně zvýšených tlaků při hermetickém oddělení od okolí.

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

- Bude pokračovat experimentální studium vlivu intenzity elektrického pole na průběh enzymových reakcí se současnou separací složek při enzymových reakcích s průmyslově významnými enzymy imobilizovanými v přírodních nebo syntetických hydrofilních polymerních gelech. Současně bude probíhat vývoj a praktické ověřování experimentálních metod pro určování transportních (včetně elektro-transportních) charakteristik reakčních složek uvedených enzymových systémů, jejichž hodnoty jsou užívány při matematickém modelování enzymových reakčních systémů vystavených vnějšímu elektrickému poli. Studium vlivu elektrického pole na reakční režimy v enzymových systémech bude rozšířeno na systémy s periodicky proměnnou intenzitou elektrického pole a s periodicky proměnnou vstupní koncentrací substrátu, kdy lze v případě reakcí produkujících nebo spotřebovávajících vodíkové ionty dosáhnout zvýšení časově zprůměrněné hodnoty faktoru účinnosti reakce. Budou zahájeny experimentální studie s biotransformacemi využívajícími živé imobilizované mikrobiální buňky vystavené účinkům vnějšího elektrického pole v mikroreaktorových soustavách. Pozornost bude též věnována možnostem kombinace dvou nebo více (komplementárních) biotransformací v jednom reaktorovém systému.
- Výzkum bude zaměřen na vývoj mikroreaktoru umožňujícího vkládání definované intenzity elektrického pole na kultury mikroorganismů a pozorování jeho účinků na chování mikroorganismů jak na úrovni kultury (velikost zorného pole 10 x 10 mm) tak na úrovni buněk (zorné pole 0,3 x 0,3 mm).
- Experimentálně bude studován vznik koncentračních struktur a chemických vln v důsledku interakce autokatalytické reakce, difuze a konvekce, a vliv migrace iontových složek ve vloženém elektrickém poli na tyto struktury. Dále bude studován vliv vloženého elektrického pole na pohyb améby *Physarum polycephalum*.
- Popis reagujících systémů iontového charakteru tvoří základ popisu palivových článků a biologických systémů. Vyvinuté výpočetní postupy a software budou upraveny tak, aby kromě popisu migrace v elektrickém poli uvažovaly i vliv konvekce a povrchových jevů. Budou ověřeny pro návrh mikro-zařízení a pro systémy s membránami svázanými ionty. Bude pokračovat modelování vlivu elektroosmotických jevů. Experimentální práce s mikro-reaktory a studium separace v mikro-zařízeních budou pokračovat s důrazem na využití technologií s fotocitlivým sklem FOTURAN. Bude využívána jednotka na leptání skla, zařízení pro osvit fotocitlivého skla a postupy rovinného broušení a leštění desek fotocitlivého skla. Prototypy univerzálních mikro-zařízení (výměníky, elektrolytická dioda a tranzistor) budou testovány s ohledem na jejich použití ve specifických zařízeních. Bude dále rozvíjen software pro modelování elektrolytických prvků.

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

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

- V oblasti bezpečnosti a spolehlivosti je činnost zaměřena na výpočet množství hořlavé a toxické látky v oblacích typu puff a plume a na zpracování zkušeností z případových

studií výpočtu individuálního a společenského rizika při haváriích.

- V oblasti bezpečnosti a spolehlivosti budou studovány synergetické efekty v případě havárií.
- V oblasti procesního designu je tematika zaměřena na využití bilančních výpočtů a matematického modelování pro sledování fugitivních úniků VOC.

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

- Metody umělé inteligence lze aplikovat jako podpůrné metody v celé řadě významných oblastí chemického inženýrství. Budou využívány neuronové sítě 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 mimo jiné pro studium adaptivního řízení nestacionárně provozovaných katalytických reaktorů a bioreaktorů a pro apriorní určení počtu fází ve vícefázových systémech, viz. body 1.1., 2.4., 2.6.
- Studium diskrétních optimalizačních metod pro řešení úloh z oblasti umělé inteligence při učení hierarchických a samoorganizujících se neuronových sítí. Studium metod fraktálního modelování, konstrukce matematických modelů pro generování fraktální množiny, studium iteračních procesů, heuristický přístup k modelování fraktálů.

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

- Výzkum vývoje struktury dodavatelských řetězců chemických a potravinářských výrobků a jejich vliv na řízení nákupu, výroby a distribuce :
- Transformace logistických řetězců, výzkum vývoje dodavatelských řetězců v oblasti chemie a potravin
- Podmínky horizontální a vertikální integrace řízení hmotných toků
- Integrace marketingového, logistického a finančního řízení v Supply Chain managementu
- Implementace teorie omezení v řízení dodavatelských řetězců
- Metody identifikace úzkých míst v dodavatelských řetězcích
- Analýza vlivu integrace dodavatelských řetězců na řízení výroby
- Přenos informací pro integraci plánovacích činností v dodavatelském řetězci
- Implementace prognostických metod pro integrovaný odhad poptávky
- Analýza vlivu prostředí dodavatelských řetězců na hodnotovou stránku materiálových toků

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

- Studium a návrh nových metod analýzy a číslcového zpracování signálů a obrazů, aplikace diskrétní Fourierovy transformace a Wavelet transformace, číslcová filtrace a potlačování rušivých složek signálů a obrazů, metody dekompozice a rekonstrukce signálů a obrazů
- Studium vlastností Lukasiewiczovy algebry, aplikace v číslcové filtraci a zpracování obrazů

- Aplikace fuzzy logiky ke zpracování obrazů, vývoj fuzzy metod pro zvýšení vypovídací schopnosti obrazové informace
- Rozbor metod SVD a QR faktorizace pro konstrukci modelů časových řad, odhad intervalů spolehlivosti, návrh nových metod pro optimalizaci umělých neuronových sítí, algoritmy lineárních a nelineárních metod modelování signálů, užití navržených metod při segmentaci, klasifikaci a predikci časových řad
- Statistické metody číselového zpracování signálů pro analýzu, filtraci a dvourozměrnou interpolaci, analýza družicových snímků a časových řad znečištění životního prostředí
- Užití metod zpracování signálů a obrazů pro analýzu, dekompozici, zvýrazňování a klasifikaci biomedicínských signálů a obrazů, analýza dat spotřeby energie a jejich predikce, lokalizace zdrojů znečišťujících látek ovzduší metodami číselového zpracování signálů
- Aplikace informačních technologií a počítačové grafiky pro vzdálenou analýzu signálů a obrazů, užití Matlab Web serveru, implementace vybraných algoritmů, tvorba a rozšiřování databáze signálů a obrazů

2.5. Chemické senzory a aplikace senzorů pro monitorování a řízení procesů.

Výzkum principů, vlastností a aplikací vybraných typů senzorů:

- Polovodičové senzory
- Porovnání vlastností a aplikačních možností polovodičových senzorů s anorganickými polovodiči (oxidové senzory) se senzory na bázi organických polovodičů. - Další výzkum v oblasti organických polovodičů, a to jak ve formě vodivostních senzorů, tak ve formě tranzistorů řízených polem s řídicí elektrodou pokrytou organickým polovodičem.
- Pokračování výzkumu alternativních metod snímání a vyhodnocování signálu u vodivostních senzorů (např. citlivost definovaná podle posunu fázového rozdílu mezi napětím a proudem) při využití nových softwarových a technických prostředků. Využití UV-VIS spektroskopie s vláknovou optikou, absorpce, luminiscence, analýza a vyhodnocení spekter pro charakterizaci vrstev. - Příprava senzorů s nově koncipovanými substráty s efektivnějším uspořádáním soustavy elektrod. Depozice vybraných materiálů technikou MALDI (depozice ze silně podchlazeného substrátu), porovnání parametrů vrstev deponovaných pomocí L-CVD, klasické PLD a PLD vylepšené o MALDI. - Návrh nových materiálů pro aktivní vrstvy (např. na bázi phtalocyaninů), použití perspektivních dopantů, katalyzátorů. - Experimenty se selektivními membránami.
- Pelistorové senzory
- Studium teplotního režimu pelistorových senzorů; studium vlastností pelistorů v interakci s organickými halogenderiváty a s organokřemičitými látkami. - Měření s pelistorem v ekvitermním režimu s využitím signálového procesoru pro řízení měření a sběr naměřených dat. Realizace zařízení využívající dynamického směřování pro kontinuální přípravu kalibračních směsí pro dlouhodobé ověřování vlastností senzorů.
- Optické senzory
- Dovybavení pracoviště pro snímání a zpracování obrazu mikroskopických objektů snadno konfigurovatelnou technikou univerzálního charakteru, umožňující pružné přizpůsobení pracoviště pro požadovaný druh měření. Předpokládá se volba ručního nebo automatického procesu zpracování a analýzy obrazu ve spojení s PC vybaveným hardwarovým stykovým modulem a doplňkovým softwarem

v prostředí programového produktu LabView. - V oblasti detekce mikroskopických částic v laserovém paprsku je plánována realizace funkčního vzorku přenosného přístroje pro detekci znečištění atmosféry pevnými částicemi. - Aplikační výzkum v oblasti optických vláknových senzorů bude zaměřen na průzkum možností využití těchto senzorů v oblasti chemického a potravinářského průmyslu a případně v biologických a lékařských oborech.

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

- Při výzkumu metod umělé inteligence aplikovaných v oblasti řízení bioprocésů bude postupně převažovat jejich praktické ověřování v Laboratoři řízení bioprocésů. Budou dále rozvíjeny tzv. „soft computing“ metody a jejich aplikace při modelování a řízení uvedených procesů, chápaných jako nelineární systémy s proměnnou strukturou. Půjde o znalostní modelování a řízení různých typů procesů čištění potravinářských průmyslových odpadních vod a procesů zpracování potravinářských průmyslových odpadů termofilními směsnými populacemi mikroorganismů pomocí autotermní termofilní aerobní digestce. (Pokračuje řešení tohoto tématu v rámci mezinárodního grantu EU v 5. RP Enhanced, Intelligent processing of Food and Related Wastes using Thermophilic Populations.) Pokusy budou prováděny pro různé druhy odpadů a různé směsné kultury dodané z ostatních spolupracujících pracovišť.
- Bude dále pokračovat realizace a ověřování znalostního řídicího systému 2. generace, který využívá různé metody reprezentace znalostí pro optimální řízení bioprocésů. Systém je vytvářen jako multiagentní s real-time SQL databází. Bude využívat znalostí nejrůznějšího typu od matematických modelů přes umělé neuronové sítě pro odhad parametrů systému až k heuristickým a fuzzy pravidlům a obsahovat odpovídající metody odvozování..
- Aplikace on-line databázového řídicího a informačního systému čtvrtprovozní odpady pro řídicí algoritmy využívající informaci uložených v databázi (např. fyzikálně-chemická data, technologické reglementy, výsledky zpracování experimentálních dat, expertní znalosti). Aplikace výsledků v laboratorní výuce oboru.
- Vytváření matematických modelů vybraných potravinářských a biochemických procesů a jejich využití k návrhu a ověřování řídicích struktur a algoritmů.

2.7. Metody plánování, rozvrhování a řízení vsádkových chemických výroby.

- Vzhledem k tomu, že v roce 2003 budou hlavním předmětem výzkumu vsádkové výroby se složitější topologií, bude cílem práce zejména vývoj nového algoritmu, který umožní efektivně rozvrhovat i takovou výrobu. Algoritmus bude založen na metodách diskrétní optimalizace jako jsou metody tabu search a genetické algoritmy. Získají se tak výrobní plány pro jednotlivá střediska, nároky na zařízení a jeho využití v čase a obsazení zásobníků v čase. Tvorba složitějších modelů vsádkových výroby v prostředí simulátoru programu Witness umožní vytvářet rozvrhy s cílem minimalizace celkové doby výroby.
- V oblasti plánování a řízení odbytu ve vsádkových výrobních se budou řešit složitější problémy lokalizace distribučních skladů s využitím různých modelů vzdáleností a optimalizace přepravních tras pro heterogenní dopravní park. Dílčí přepravní vzdálenosti budou generovány z databáze geografického systému MapInfo.
- Využití informačního systému ARIS při řízení vsádkových výroby. Analýza uplatnění informačních systémů v řízení vsádkových výroby, integrace systémů typu ERP s metodami řízení výroby MRPII, JIT, KANBAN, aj., a dále integrace se systémy pro řízení dodavatelských řetězců SCM a se systémy pro řízení vztahů se zákazníky CRM.

3. Nelineární dynamika chemických a biologických systémů

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

- Matematické modely chemicko-inženýrských úloh popisujících složité vícefázové chemické a biologické systémy v obecné geometrii, se složitými okrajovými podmínkami (rovnovážné a nerovnovážné chemické povrchové reakce, elektricky aktivní povrchy) a se zahrnutím vlivu elektromagnetického pole tvoří velmi různorodý soubor matematických rovnic, které lze jen s obtížemi prezentovat v jednotném „kanonickém“ tvaru. Proto musí existovat více nezávislých programových balíků a s nimi spojená zkušenostní databáze k tomu, abychom mohli efektivně uvedené problémy řešit. Zčásti lze použít i komerční software, ale převážná část aplikací vyžaduje vlastní vývoj numerických metod a vytváření odpovídajících programových nástrojů k řešení problémů vykazujících časoprostorové struktury.
- Nadále bude pokračováno ve vytváření zkušenostní databáze k existujícímu software tak, aby bylo možné volit optimální strategii při řešení daného problému matematického modelování prostorových polí chemických a fyzikálních veličin popisujících dynamiku systému. Z této znalostní databáze se pak odvíjí potřeba vytváření nových numerických metod a příslušného software. Zejména plánujeme vytváření aplikačního software vyhovujícího požadavkům na zavádění nanotechnologií.

3.2. Obecné analytické a počítačově-numerické metody analýzy komplexních nelineárních dynamických systémů.

- Studium stability v mřížkových dynamických systémech. Stínování v mřížkových DS v souvislosti s numerickým řešením parciálních diferenciálních rovnic reakčně-difúzního typu.
- Studium šíření křivočarých vln v reakčně difúzních systémech a numerické zpracování.
- V systémech obyčejných diferenciálních rovnic se symetrií budou vyšetřovány aposteriori odhady bifurkačních bodů.
- V souvislosti s řešením velkých soustav lineárních i nelineárních rovnic budou nadále zkoumány možnosti využití hyperbolických transformací při zpracování experimentálně naměřených dat.
- Studium souvislostí mezi soustavami aritmetických posloupností a sumačními funkcemi, resp. diferenčními rovnicemi. Dále budou studovány vlastnosti aritmetických funkcí s hustým oborem hodnot.
- Další rozvoj adaptace kontinuálních metod na systémy ODR vzniklých diskretizací parciálních rovnic s využitím algoritmů pro řešení lineárních systémů s řídkou maticí pro a) řešení závislosti ustáleného stavu na parametru, b) řešení okrajové úlohy v závislosti na parametru.
- Numerické určení stability vlnových řešení typu puls nebo fronta v reakčně-transportních systémech pro použití při kontinuaci těchto řešení v závislosti na parametru.

3.3. Vývoj efektivních numerických metod pro simulaci a analýzu dynamických modelů popsaných zejména soustavami parciálních diferenciálních rovnic.

- Budou vyvíjeny efektivní algoritmy jak v prostředí jazyků FORTRAN a C, tak v prostředí vyšších jazyků typu MATLAB, za využití komerčních numerických knihoven. Byl zakoupen systém FEMLAB švédské firmy COMSOL, což je nadstavba výpočetního prostředí MATLAB určená pro modelování a analýzu fyzikálních jevů (přenos tepla, hmoty, proudění, chemické reakce, elektromagnetismus, akustika, ...) založený na efektivních algoritmech řešení soustav parciálních diferenciálních rovnic. Těsná interakce

FEMLABu s MATLABem poskytuje výkonnou a uživatelsky přívětivou, otevřenou a srozumitelnou platformu pro širokou množinu úloh v prostředí, které se stává jedním z celosvětově uznávaných standardů. Výsledky dosažené pomocí FEMLABu byly publikovány. Algoritmy pro kontinuaci řešení soustavy nelineárních algebraických rovnic typu DERPAP a CONT budou implementovány do prostředí MATLABu. Cílem je umožnit konstrukci bifurkačních diagramů pro řešení soustav parciálních diferenciálních rovnic.

- Budou vyvíjeny speciální algoritmy využívající adaptivní prostorové sítě k matematickému modelování systémů s extrémně vysokými hodnotami gradientů některých veličin lokalizovaných v relativně velmi malé části studovaného systému. Tento úkol byl do značné míry vyřešen pro prostorově jednorozměrné systémy v návaznosti na experimentální studium elektrochemických systémů typu „elektrolytická dioda a transistor“. Aktuální úkol je vývoj vhodných postupů pro prostorově dvou- a tří-rozměrné problémy. Bude dále rozvíjena hardwarová základna pracoviště, jak ve formě sítí pracovních stanic UNIX, tak ve formě sítí Windows98/NT.
- Budou zdokonalovány numerické metody pro dynamickou simulaci problémů popsanych soustavou eliptických a parabolických parciálních diferenciálních a algebraických rovnic, kde je nutno nalézt řešení eliptických a algebraických rovnic v každém kroku dynamické simulace. Bude vyvíjen software pro dynamickou simulaci složitých problémů, kde je potřeba současně řešit Navier-Stokesovy rovnice pro konvektivní tok, rovnici kontinuity, Poissonovu rovnici, bilanci entalpie a bilance iontových složek, neboť dochází k vzájemnému ovlivňování rychlostních, tlakových, elektrických, teplotních a koncentračních polí. Budou používány a zdokonalovány vyvinuté algoritmy pro simulaci rostoucí částice polymeru se zahrnutím visko-elastických (paměťových) efektů polymerního materiálu v částicích s dynamicky se vyvíjející morfologií, kde dochází k fragmentacím a slepování polymerní fáze a fáze nosiče katalyzátoru.

3.4. Studium excitabilních chemických a biochemických systémů.

- Bude rozvíjeno experimentální studium excitability systému peroxid vodíku-thiosíran-Cu²⁺ (HPTCu) v promíchávaném průtočném reaktoru započaté v tomto roce. Předběžné výsledky naznačují, že uvedený systém vykazuje některé dosud experimentálně nezjištěné rysy excitabilní dynamiky, jako je bistabilita excitabilního a neexcitabilního ustáleného stavu, excitabilita daného ustáleného stavu vzhledem k přídávku jak aktivní tak inhibiční složky. Tyto vlastnosti se nepochybně projeví ve specifickém dynamickém chování systému v přítomnosti periodických perturbací. V relaci k biochemickým a biologickým systémům je studium takové dynamiky důležité, protože vzhledem k početnosti a různorodosti biologických excitabilních systémů je pravděpodobné, že výše popsané rysy specifické pro pH oscilace jsou charakteristické pro určité biochemické a biologické excitabilní systémy a přispívají k funkčnosti živých organismů. Takové systémy také budou hledány a jejich excitabilní dynamika zkoumána prostřednictvím modelování s využitím teorie nelineárních dynamických systémů a bifurkací. Zejména bude věnována pozornost systémům, kde zprostředkující roli při přenosu informací pomocí excitací hrají vápníkové ionty, jako např. v modelech nervosvalového zakončení.
- Budou rozvíjeny metody studia a analýzy modelů popisujících excitabilní systémy, ať už v promíchávaných reaktorech, kde dominantní roli hraje chemická reakce, tak i v trubkových a plošných reaktorech kde reakce a transportní procesy se kombinují a dávají vzniknout časoprostorovým strukturám. K těmto metodám patří sledování závislosti řešení na parametru (kontinuace), při tom řešení mohou

představovat pohybující se reakčně-difuzní vlny, periodické odezvy na vnější periodické perturbace a další. Tyto metody jsou formulovány jako okrajové úlohy, pro které sice máme vyvinut aplikační software, avšak vzhledem k neustále rostoucí složitosti řešených modelů je třeba vyvíjet a používat numericky více robustní metody, které jsou úspornější jak na požadovanou paměť, tak i na výpočetní čas (a to i přes neustále rostoucí výkonnost počítačů).

- Bude studován vliv elektrického pole na dynamické režimy v soustavách dvou či více dynamických jednotek - promíchávaných reakčních cel, ve kterých probíhá enzymová reakce nebo jiný biochemický proces, vzájemně propojených způsobem, umožňujícím vzájemnou symetrickou či asymetrickou výměnu hmoty (reakčních složek). Asymetrie transportu hmoty mezi jednotkami bude dosaženo vložением elektrického pole. Experimentálně bude takový systém realizován s enzymovou reakcí štěpení penicilinu V enzymem penicilin V acylázou, kde bude studován vliv intenzity vložení elektrického pole na oscilační a excitabilní režimy.
- V excitabilním systému, představovaném matematickým modelem agregující vrstvy buněk hlenky *Dictyostelium discoideum*, bude zkoumána závislost dynamických charakteristik na hustotě buněk, zejména přechody mezi excitabilní a oscilační dynamikou, která ovlivňuje agregaci buněk a následnou morfogenezi organismu. Dynamické charakteristiky budou studovány ve dvou matematických modelech, uvažujících rozdílný počet proměnných systému, a srovnáním s experimentálně dostupnými daty budou zhodnoceny dopady zjednodušujících předpokladů na dynamické chování modelů. Experimentálně budou studovány možnosti řízení iniciace koncentračních pulsů cAMP ve vrstvě agregujících buněk *Dictyostelium discoideum*, která by umožnila studovat excitabilní chování systému v závislosti na různých parametrech (hustota buněk, teplota, stáří, atd.).

3.5. Vývoj a aplikace technik pro charakterizaci chaotických časových a časoprostorových dat.

- Techniky nelineární analýzy chaotických časových a časovo-prostorových dat budou dále rozpracovány, zejména pak s ohledem na jejich implementaci v programovém prostředí systému MATLAB, kde bude využita jeho maticově orientovaná koncepce a možnosti grafických výstupů.
- Bude dále rozpracována aplikace Karhunenovy – Loévy dekompozice na prostorově dvou- a třírozměrná data (jak experimentální tak i numericky simulovaná) s následující rekonstrukcí chaotických atraktorů a výpočtem jejich invariantů, (např. dimenze, entropie a Ljapunovových exponentů).

VZ MSM 223100008 – Metody a prostředky chemické a fyzikálně-chemické analýzy vlastností a chování bioinženýrských a chemicko-inženýrských systémů

laboratoř fyzikálně-chemických vlastností (LMV)

- a. Bude ověřena funkčnost počítačem řízené automatizované dávkovací linky v sestavě hustoměru s vibrační trubicí.
- b. Bude navrženo a realizováno měření na druhé generaci statické aparatury pro stanovení tlaku nasycených par v rozsahu teplot od -35 do 250 °C a tlaků od 1 Pa do 100 kPa. Předpokládá se, že v první etapě budou proměřeny vybrané polyaromatické látky, vyšší estery kyseliny ftalové, *n*-alkany s více než dvaceti uhlíkovými atomy.

Laboratoř fázových rovnováh (LFR)

- a. Bude pokračovat vývoj a aplikace metody nestacionární plynové chromatografie a nové techniky na bázi EPICS („Equilibrium Partitioning in Closed System“) k měření rozdělovacích koeficientů voda-vzduch pro těžké organické sloučeniny. Výzkum soustředí na konstrukční dořešení příslušných aparatur a optimalizaci přesnosti měření.
- b. Bude ověřena nová titrační aparatura a nové rovnovážné cely pro studium rovnováhy kapalina-kapalina (LLE) ternárních systémů za vyšších teplot. Předpokládá se studium systému methanol + methylcyklohexan + cyklohexan, methanol + N,N-dimethylformamid + uhlovodík.
- c. Bude pokračovat studium metodiky pro měření povrchového napětí roztoků v závislosti na teplotě. Hlavním cílem bude studium zředěných vodných roztoků organických látek, u kterých budou zároveň studovány fázové rovnováhy.
- d. Bude dokončeno vybudování laboratoře povrchových jevů zaměřené mj. na oblasti spojené s problematikou biologických systémů. Do provozu bude uveden nový přístroj pro měření povrchového napětí (pořízený z investičních prostředků roku 2002) a bude upraven pro měření zředěných vodných roztoků.
- e. Bude pokračovat studium rovnováh kapalina-pevná látka asociujících systémů. Předpokládá se studium systému kyselina octová-cyklohexan,
- f. Měření kritických micelárních koncentrací roztoků surfaktantů.

Laboratoř matematického modelování a simulací (LMM)

- a. Rozvoj simulačních metod a teoretických postupů ve statistické termodynamice čistých plynů a kapalin a jejich směsí s důrazem na stavové chování, termodynamické vlastnosti a fázové rovnováhy.
- b. Rozvoj metod nevratné racionální termodynamiky chemicky reagujících směsí většinou tekutin (plynů nebo kapalin), ale také látek netekutých (tuhých, kapalných krystalů ap.), kdy se k vyjádření napětí nepoužívá jen tlak, ale též tenzor napětí (tj. deformace nejsou způsobeny jen změnou objemu, ale např. i stříhem)
- c. Vývoj metod pro popis termodynamických rovnováh v širším teplotním rozsahu, zejména v soustavách výrazně kineticky determinovaných a významných pro aplikace v materiálovém inženýrství ($A^{III}B^V$ polovodiče a supravodivé systémy Bi-Ca-Sr-Cu-O).
- d. Využití matematických modelů se soustředěnými parametry k predikci a řízení teplotních časových profilů v laboratorních a jiných speciálních aparaturách. Jde např. o selektivní termosterilizaci, bioreaktory a procesy kultivace mikroorganismů.

Laboratoř separačních technik (LST)

- a. Dokončení vývoje metodiky přípravy a preparativního chromatografického dělení systémů pro radionuklid-ligand na bázi např. derivátů kyseliny fosfonové, porfyrinů a chitosanu.
- b. Vývoj extrakční separace $^{90}\text{Sr}/^{90}\text{Y}$ pro generátor $^{90}\text{Sr}/^{90}\text{Y}$ a ověření funkčnosti modelového extrakčního generátoru $^{90}\text{Sr}/^{90}\text{Y}$.
- c. Konstrukce aparatury pro měření sorpce směsi par organických látek v polymerech. Dokončení propojení diferenciálního permeamtru s hmotnostním spektrometrem.

Laboratoř molekulové spektroskopie (LMS)

FTIR a Ramanova spektroskopie

- a. Vývoj metodiky měření FT Ramanových spekter pro elektropolymerované, adsorbované a sebeskladné vrstvy na povrchu zlata a stříbra.

- b. Vývoj metodiky měření povrchové plasmonové rezonance (SPR) a simultánního měření SPR a FT Ramanových spekter pro testování vyvíjených receptorů.

VCD spektroskopie

- c. Pokračování vývoje metodiky pro měření vodných roztoků v kyvetách s extrémně tenkými distančními foliemi. Ověřena bude možnost použití piezoelektricky řízené kyvety vlastní konstrukce.
- d. Vývoj metodiky pro měření teplotní závislosti, aplikace na peptidy tvořené rigidní a flexibilní částí, glykoproteiny a teplotně a rozpouštědlově citlivé interakce (sol-gel).
- e. Studium nekovalentních interakcí a rovnováh v roztoku, strukturní problémy samoskladby (self-assembly).
- f. Studium komplexace přechodových kovů s chirálními ligandy. Úvodní studie budou provedeny s kyselinou vinnou.

NMR spektroskopie

- g. Bude studována struktura a funkce ligandů s několika peptidickými řetězci na (semi)rigidním skeletu na bázi calix[n]arenu a 1,1'-binaftalenu. Tento výzkum směřuje k pochopení zákonitostí interakcí mezi proteiny a malými syntetickými molekulami stejně jako mezi proteiny samotnými. V souvislosti s touto problematikou budou optimalizovány parametry pro měření jader ^{19}F , jader v rozsahu ^{15}N - ^{31}P a využity sofistikovanější 1D a 2D experimenty založené zejména na gradientech magnetického pole, „spin-locku“, tvarovaných pulzech a měření za nízkých teplot.
- h. Vypracování metodiky pro měření jádra ^{27}Al v zeolitech.

Laboratoř prvkové analýzy (LPA)

Výzkumné cíle laboratoře

- a. Vývoj elektrodepozice jako prekoncentrační techniky pro metodu atomové absorpční spektroskopie. Po úspěšné aplikaci metody pro stanovení kadmia bude výzkum zaměřen na stopovou analýzu kovů v takových matricích, které při analýze metodou ICP/MS způsobují těžce odstranitelné spektrální interference. Jedná se např. o stanovení niklu či železa ve vzorcích obsahujících přebytek vápníku, analýzu krevního séra apod.
- b. Vývoj radioanalytických metod pro stanovení stopových množství radionuklidů v radiofarmaceutických preparátech a jejich validace.
- c. Vypracování metod pro sledování migrace a retardace radionuklidů na přírodních sorbentech a jejich validace.
- d. Rozvoj spojení metody ICP/MS a elektrotermického odpařování. Budou zkoumány další možnosti zkonstruovaného převodníku mezi ICP/MS a jednotkou elektrotermického odpařování, původně určené pro atomovou absorpční spektroskopii. Výzkum bude zaměřen na odstranění spektrálních interferencí a analýzu suspenzí vzorku. V této souvislosti budou řešeny otázky stability plasmatu a stability přenosu hmoty. Další úspěšný rozvoj této techniky je podmíněn zakoupením profesionální jednotky elektrotermického odpařování Perkin Elmer HGA 600 MS, která je konstruována pro spojení s ICP/MS. V této části projektu budou zkoumány a validovány metody pro stanovení drahých kovů jako je např. Pt, Pd, Ag a to především technikou izotopového zředňování.

Laboratoř molekulárního rozpoznávání (LMR)

Cíle ve vývoji receptorů

- a. Vývoj nových receptorů pro anionické a kationické oligosacharidy

- b. Design a příprava receptorů pro anionty významné z hlediska ochrany životního prostředí (např. nitráty, fosfáty) za použití metod kombinatoriální chemie.

- c. Studium sebeskladných makrocyclických systémů, vedoucích k přesnému prostorovému uspořádání stavebních bloků díky komplexaci kationtů, aniontů nebo sacharidů. Výzkum směřuje k vývoji nových stavebních bloků s možností využití pro nanotechnologii a molekulární elektroniku (na bázi fenantrolinových derivátů). Naším záměrem je sledovat Pd katalyzované reakce, které by probíhaly ve vytvořených nanoreaktorech nebo na fázovém rozhraní po vytvoření LB vrstvy nebo SAM.

- d. Vývoj multitopických receptorů vytvořených pomocí prostorově přesně orientovaných systémů bis- a tris-Trögerových bazí. Analýza struktury pomocí spektrálních metod a rentgenostrukturní analýzy, studium komplexačních vlastností těchto nových systémů. Testování těchto nových receptorů pro komplexaci významných analytů a inhibici virálních proteáz a dále jednotlivých isoformů enzymu NOS.

- e. Příprava fluorescenčních receptorů se specifickou vazbou na vybrané sekvence DNA, nová analoga distamycinů a jejich testování pro specifickou interakci se sekvencemi DNA.

- f. Příprava nové generace oligopyrrolových makrocyclů, především kalixfyrinů, založená na strategii periferní substituce makrocyclů pomocí Trögerových bazí a vybraných alkaloidů, steroidních látek a terpenů. Aplikace těchto systémů pro vývoj fluorescenčních senzorů.

- g. Vývoj nových metallokomplexů pro vytváření matice sensorových elementů směřujících ke konstrukci elektronických nosů a jazyků, se specifickým zájmem o stanovení NO v biologických materiálech a plynných směsích.

Cíle ve vývoji sorbentů

- h. Za použití amidové vazby, či močovinnové a uretanové kovalentně modifikovat spojky výše uvedené sorbenty některým z následujících substituentů: bipyridyl, fenanthrol, polyazacrowny, calix(4)fyrin, porfyrin a ftalocyanin. Další zvýšení selektivity komplexace pro sledovaný kation, především lantanoidy a aktinoidy, se pokusíme dosáhnout periferní substitucí výše uvedených ligandů zavedením karboxylátových a fosfonátových funkčních skupin. Separace aniontů bude dosažena pomocí monocyclických a bicyclických guanidinových ligandů kovalentně vázaných na sorbent, dále cyklických derivátů močoviny, oligopyrrolových makrocyclů jako calix(n)pyrolů, calix(n)fyrinů, metalloporyrinů, safyrinových a rubyrinových derivátů. Pro izolaci uvedených analytů bude využito výrazné pH závislosti stability komplexů, kdy v kyselém prostředí budou zachyceny analyty uvolněny a eluovány z kolony.

Cíle ve vývoji senzorů

- i. Výzkum PVC membránových ISE pro stanovení organických látek na bázi makrocyclických látek (porfyrinů, safyrinů, calixpyrolů, calixfyrinů, crown-etherů, binaftolových derivátů aj.) a zlepšení jejich parametrů, především optimalizací složení komponent membrány, příp. chemickou modifikací jejich povrchů.

- j. Vývoj membránových elektrod s povrchem modifikovaným oligonukleotidy a CW-ISE na bázi elektropolymerizovaných, pyrrolem substituovaných oligonukleotidů pro potenciometrickou detekci tvorby duplexu s komplementárními oligonukleotidy a fragmenty DNA.

- k. Výzkum a vývoj receptorů, měřících systémů a softwaru pro elektronické jazyky a nosy, testy se soustředí na směsi aniontů anorganických a organických kyselin. Náš zájem bude soustředěn na možnosti použití pole

oligopyrrolových receptorů a jejich metalokomplexů a na vývoj membranových (PVC) mikroelektrod.

- l. Výzkum možnosti využití vyvinutých receptorů ke konstrukci senzorů na bázi vláknové optiky. Jako první bude testována možnost detekce jednoduchých sacharidů.
- m. Výzkum možnosti využití techniky SPR pro sledování interakce připravených safyřinů s nukleotidy, porfyrinových derivátů se sacharidy a dále inhibitorů virálního proteázy s NOS a anionických sacharidů a oligosacharidů s kationty, a to jak organickými a anorganickými.

Program 1 - Získávání údajů o fyzikálně-chemických vlastnostech a chování chemických látek a jejich definovaných směsí

1. Stavové chování a termodynamické vlastnosti

Popis stavového chování a termodynamických vlastností plynů a kapalin pomocí teoretických a fenomenologických postupů

- a. Vývoj integrálních rovnic založených na distribuční funkci (studium uzávěrů Ornsteinovy-Zernikovy rovnice). Použití metody diagramových rozvoje můstkové funkce pro čisté plyny a kapaliny a jejich binární a ternární směsi (LMM).
- b. Výpočty a teoreticky podložené odhady vyšších viriálních koeficientů plynných směsí na základě mezimolekulárních potenciálů (LMM).
- c. Studium stavového chování a termodynamických vlastností plynárných směsí. Dokončení monografie *Technické plyny* (LMM).

Stavové chování kapalin a kapalných směsí

- d. Dokončení experimentálního studia parciálních molárních objemů mono- a disubstituovaných derivátů benzenu ve zředěných vodných roztocích. Vyhodnocení příspěvků jednotlivých substituentů k parciálnímu molárnímu objemu a návrh strukturně-příspěvkové metody umožňující odhad parciálních molárních objemů derivátů benzenu ve vodných roztocích v širokých intervalech teploty a tlaku (LMV).
- e. Systematické měření zředěných vodných roztoků derivátů alifatické řady uhlovodíků v širokém intervalu teploty a tlaku s cílem vyvinout strukturně-příspěvkovou metodu pro odhad parciálních molárních objemů těchto látek při nekonečném zředění (LMV).
- f. Aktualizace databáze stavového chování kapalin nově publikovanými daty pro látky zpracované v předchozích obdobích (spolupráce s pracovištěm na Kyoto Institute of Technology, Japonsko) (LMV).

Tepelné kapacity kapalných a pevných látek

- g. Měření tepelných kapacit v kapalně a pevné fázi, případně i entalpie fázových přechodů na spolupracujících pracovištích (katedra makromolekulární fyziky MF UK, Berg Akademie Freiberg, SRN). Kritické zhodnocení vlastních a z literatury převzatých dat a vytvoření souborů doporučených dat v co nejširším intervalu teplot pokrývajícím i oblast environmentálně zajímavých teplot (zhruba od -40 do 50 °C) (LMV).
- h. Využití databáze tepelných kapacit kapalin pro aktualizaci strukturně-příspěvkové odhadové metody pro tepelnou kapacitu v závislosti na teplotě. Úprava programového vybavení pro výpočet strukturních příspěvků tak, aby umožňovalo zpracování rozsáhlých souborů dat. Výpočet parametrů odhadové metody a její vyhodnocení (LMV).
- k. Pokračování ve sběru a vyhodnocování dat tepelných kapacit čistých kapalin a rozšiřování stávající databáze (LMV).

Tlak nasycených par vysokovroucích organických látek

- i. Pokračování měření tlaku nasycených par látek řazených mezi organické kontaminanty, polyaromatických látek, vyšších esterů kyseliny ftalové, substituovaných derivátů benzenu, větvených alifatických alkanolů se čtyřmi a pěti uhlíky a vybraných 1-alkanolů s více než čtrnácti a *n*-alkanů s více než dvaceti uhlíkovými atomy. (LMV).
- j. Simultánní korelace tlaku nasycených par a termálních veličin (tepelné kapacity) (LMV).
- k. Rozšíření databáze původních dat o tlaku nasycených par, zejména zahrnutím údajů pro experimentálně studované skupiny látek. Úprava a modernizace programového vybavení databáze. Využití dat z databáze při zpracování výsledků vlastních měření (LMV).

2. Fázové rovnováhy a separační procesy

Fázové rovnováhy ve vysoce zředěných roztocích organických látek

- a. Studium limitních aktivitních koeficientů v environmentálně relevantním či širším intervalu u vodných roztoků vykazujících vesměs nemonotónní průběh závislosti limitního aktivitního koeficientu. Kombinace různých experimentálních technik a simultánní zpracování spolu s kalorimetrickými daty o rozpouštěcích teplech a tepelných kapacitách. Výzkum se soustředí na alkanoly a industriální dusíkatá a sírná rozpouštědla (LFR).
- b. Studium limitních aktivitních koeficientů v nevodných systémech ve směsích aromatických uhlovodíků a alkoholů (LFR).
- c. Rozvoj stávající databáze limitních aktivitních koeficientů (PLACID), a to jak v oblasti nárůstu velikosti databáze nově kompilovanými údaji, tak v oblasti vývoje programového vybavení. Vedle průběžného doplňování dat do databáze budou vyvinuty moduly exportu a tisku dat z databáze (LFR).

Rovnováha kapalina-kapalina (LLE)

- d. Experimentální studium teplotní závislosti charakteru rovnováhy kapalina - kapalina. Systematické měření LLE a směšovací entalpií (H^E) s průmyslově významnými látkami (DMF, methanol, uhlovodíky C₆, C₇, C₈). Studium systémů vhodných pro rozvoj teoretických poznatků. Analýza závislosti tvaru kritické křivky (ternární systém kapalina-kapalina) na teplotním charakteru heterogenní oblasti (LFR).
- e. Teoretické studium rovnováhy kapalina – kapalina se zaměřením na její kvalitativní a kvantitativní popis v ternárních systémech. Odvození vlivu neideality jednotlivých binárních subsystémů na průběh teplotní závislosti kritických bodů (LFR).
- f. Korelace dostupných termodynamických dat binárních systémů. Příprava procedur pro zahrnutí rovnovážných dat kapalina – pevná látka (SLE) a dodatkových tepelných kapacit (C_p^E). Příprava programů pro predikci LLE v ternárních systémech pomocí příspěvkové metody UNIFAC a porovnání s predikcí LLE získané na podkladě korelace binárních dat. Zpracování naměřených dat v ternárních systémech, vyhodnocení ternárních korekcí, případně jejich teplotních závislostí (LFR).

Jevy na fázových rozhraních

- g. Studium vzájemného ovlivňování vlastností v objemové a povrchové fázi roztoku (simultánní zpracování dat o aktivitě složek roztoku v objemové fázi, pěnivosti, povrchovém napětí, tloušťce povrchového filmu) mj. s cílem vypracovat model popisující chování binárních systémů v blízkosti oblasti omezené mísitelnosti.

Na základě výsledků pro systémy alkanů s glymy; bude provedeno rozšíření na další systémy (LFR).

Membránové separace

- h. Stanovení koeficientů propustnosti a difúze par organických látek v polymerních membránách v intervalu 25 - 40°C a výpočet aktivačních energií propustnosti a difúze. Měření sorpce par organických látek v polymerech. Studium vlivu teploty na pervaporační dělení kapalných směsí organických látek pomocí polymerních membrán. Studium transportních vlastností perfluorovaných polymerů s velkým volným objemem pro páry organických látek (spolupráce s Institutem petrochemických syntéz, Moskva, LST).

3. Chemické a asociační rovnováhy

- a. Studium topologie potenciálových diagramů u polootevřených systémů (LMM).
- b. Aplikace výpočetních metod chemické rovnováhy v materiálovém inženýrství: pokračování termodynamické analýzy přípravy $A^{III}B^V$ polovodičů a orientace na termodynamickou analýzu Bi-Sr-Ca-Cu-O supravodičů. V roce 2003 bude pozornost věnována supravodičům (LMM).
- c. Modelování fázové a chemické rovnováhy v procesu přípravy nových materiálů. Rozbor vlivu kvality vstupních dat na spolehlivost termodynamického popisu složitých vícefázových systémů. Rozvoj databázového aplikačního systému (LMM).
- d. Rozšíření programového vybavení a doplňování datové základny aplikace pro termodynamický popis složitých systémů s pevnými látkami (LMM).
- e. Studium systémů s vodíkovými vazbami (proton donor (chloroform, halothan, dichlormethan) s proton-akceptorem (kyslíkatá a dusíkatá rozpouštědla)). Kombinace termodynamických metod a NMR spektroskopie, studium vztahu mezi údaji z NMR spektroskopie a termodynamickými vlastnostmi (směšovací enthalpie, rovnováha kapalina – pára). Výzkum se soustředí na směsi halogenovaných látek s vybranými kyslíkatými rozpouštědly (LFR, LMS).
- f. Studium rovnováhy kapalina – pevná látka pro směsi karboxylových kyselin. Analýza výsledků z hlediska tvorby a stability vznikajícího heteroasociátu. Výzkum se soustředí na systém kyselina octová – cyklohexan (LFR).
- g. Studium tvorby nekovalentních komplexů biologicky významných oligomerů a polymerů bude zahrnovat studium interakce nových, ve vodě rozpustných

porfyrinových a safyirinových derivátů se sekvenčními oligonukleotidy, nových derivátů analogických distamicinovu pro selektivní vazbu do žlábků DNA. Cílem bude detailní popis termodynamiky a stereochemie vzniklého komplexu za použití moderních metod NMR spektrometrie a ITC (LMR, LMS, LMV).

- h. NMR metodou hodláme také studovat interakce oligo- a polysacharidů (neutrálních, kationických a anionických) a jejich interakce s protiionty, sledování stereochemických změn přírodního polymeru po komplexaci anorganických a organických iontů. Dále se budeme zabývat studiem modelové interakce sacharid – protein, vzor pro nekovalentní komplexace odpovědné za imunitní odpověď organismu (LMS).
- i. Studium systémů kov(^{90}Y a ^{166}Ho)-ligand-protilátka jednak s jednoduchými ligandy (DTPA a DOTA), jednak s deriváty DOTA, které jsou z hlediska radiofarmaceutických vlastností nejslibnější. Tyto experimenty budou provedeny s využitím radioanalytických a elektromigračních metod (LST).
- j. Studium dehalogenace chlorovaných bifenyly, odhady termochemických veličin zúčastněných látek, porovnání predikce s experimentem (LMM).

Program 2 - Získávání údajů o chemických a fyzikálně-chemických vlastnostech a chování živých organismů a materiálů biologického původu

Konkrétní cíle programu

- a. Spojení on-line kapalinového chromatografu a ICP/MS pro speciaci biologických vzorků. V minulosti bylo úspěšně použito spojení ICP/MS a gelové permeační chromatografie na speciaci rostlinných extraktů a krevního séra. Další pokusy budou zaměřeny také na další chromatografické metody, především iontoměničovou chromatografii a chromatografii s reverzní fází. Budou zkoumány možnosti využití této kombinované analytické techniky pro stanovení některých důležitých biogenních prvků v živočišných matricích (LPA, LST).
- b. Vývoj metodiky pro spektroskopické sledování distribuce porfyrinových derivátů na kuřecích embryích *in vivo* s pomocí resonanční Ramanovy spektroskopie a konfokální mikroskopie (LMS).
- c. Optimalizace metod klastrové analýzy pro biospektroskopii (LMM).
- d. Stochastické chování živých organismů a materiálů biologického původu při tepelných změnách (LMM).