



Aktualizace dlouhodobého záměru pro rok 2004

**Praha
31. května 2003**

Aktualizace dlouhodobého záměru pro rok 2004

Předkládá
prof. Ing. Vlastimil Růžička, CSc.
rektor

Schváleno Akademickým senátem VŠCHT Praha
6.5. 2003

Projednáno Vědeckou radou VŠCHT Praha
24.4. 2003

V Praze dne 12.5. 2003

OBSAH

vzdělávání	2
výzkum a vývoj	4
informační technologie	5
mezinárodní spolupráce ve vzdělávání	6
ubytovací a stravovací zařízení, péče o studenty	6
investice	7
příloha	9

Aktualizace dlouhodobého záměru VŠCHT Praha pro rok 2004

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 2003 aktualizaci svého dlouhodobého záměru pro rok 2004.

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

Předkládaná aktualizace VŠCHT Praha zohledňuje i zveřejněnou aktualizaci dlouhodobého záměru MŠMT pro rok 2004.

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) Přejde při přijímání studentů na nový systém strukturovaného studia založený na nově koncipovaných bakalářských studijních programech a navazujících magisterských programech pro všechny programy a obory studia uskutečňované fakultami VŠCHT Praha.
 - b) Bude pokračovat v přípravě a akreditaci nových profesně zaměřených bakalářských programů s cílem zvýšení nabídky studijních programů a oborů studovaných na VŠCHT Praha. Při přípravě studijních programů bude úzce spolupracovat s významnými zaměstnavateli, orgány veřejné správy a dalšími vysokými školami.
 - c) V programech bude plně implementovat kreditní systém kompatibilní s ECTS a zvýšení roli studentů při formování konkrétní podoby studijních plánů formou povinně volitelných a volitelných předmětů.
 - d) Bude usilovat o podchycení zájmu studentů zejména v regionech s významným zájmem potenciálních zaměstnavatelů o absolventy VŠCHT Praha.

- e) Připraví modernizovaný systém výuky v anglickém jazyce zaměřený zejména na zahraniční studenty přijíždějící v rámci programů Socrates - Erasmus, Leonardo da Vinci a bilaterálních smluv se zahraničními vysokými školami.
 - f) Bude podporovat mobilitu studentů i akademických pracovníků zvyšováním počtu smluv se zahraničními univerzitami a výjezdů v rámci programů EU.
- 2) V přijímání uchazečů o studium se bude snažit zvýšit počet přijatých studentů do 1. ročníku bakalářských studijních programů při zachování počtu studentů magisterských studijních programů. Pro doktorské studijní programy očekává postupný mírný nárůst počtu studentů.
 - 3) Vypracuje systém pro tvorbu a zveřejňování digitálních učebnic a dalších studijních materiálů dostupných na síti vysoké školy pro další podporu samostatného studia, celoživotního vzdělávání a kombinovaných forem studia.
 - 4) Bude modernizovat anketu hodnocení učitelů studenty a zavede nový systém vnitřního hodnocení jednotlivých předmětů s cílem optimalizace studijních plánů jednotlivých programů a oborů.
 - 5) V oblasti celoživotního vzdělávání bude navrhovat a poskytovat kvalitní vzdělání otevřené a diferencované obsahem i formou pro různé cílové skupiny široké veřejnosti i v rámci školy na základě aktuálních vzdělávacích potřeb. Zejména bude:
 - a) Pokračovat v realizaci úspěšných dlouhodobých programů, krátkodobých kurzů a seminářů rekvalifikačního, specializačního a inovačního charakteru.
 - b) Nadále nabízet programy univerzity třetího věku.
 - c) Systematicky vyhledávat nové příležitosti na trhu celoživotního vzdělávání.
 - d) Vytvářet nabídku programů celoživotního vzdělávání, koncipovanou a zaměřenou marketingově.
 - e) Vytvářet databázi konkurence, ostatních vysokých škol, vzdělávacích firem a institucí, jejich nabídky a trhu.
 - f) Vyhledávat a udržovat vazby se stávajícími i potenciálními zákazníky, oslovovat klíčové firmy v relevantních oborech a budovat jejich databázi.
 - g) Na základě analýz potřeb vytvářet pro velké zákazníky vzdělávací programy na míru.
 - h) Vyhledávat alternativní finanční zdroje v oblasti celoživotního učení, podpory ze strany MŠMT, Sociálního fondu EU, fondu Phare atp.
 - 6) Vytvoří další počítačové centrum pro samostatnou práci studentů za účelem zvýšení přístupnosti počítačové techniky studentům nižších ročníků s časově neomezeným přístupem pro jejich samostatnou práci.
 - 7) Bude dále rozvíjet informační systém ve vzdělávací činnosti pro učitele a studenty a zájemce o studium. Uvedeme do provozu nový systém založený na využití intranetu, který umožní realizaci nových studijních programů, přihlašování studentů na předměty a zkoušky.

V oblasti výzkumu a vývoje

Výzkum a vývoj na VŠCHT Praha bude i v roce 2004 pokračovat v souladu s dlouhodobým záměrem školy. K vytváření větších vědeckých týmů pod jednou střechou, které je v dlouhodobém záměru deklarováno, jsme přistoupili snahou o aktivní zapojení co největšího počtu pracovníků školy do mezinárodních výzkumných týmů vznikajících pro řešení prioritních výzkumných úkolů v rámci 6. RP VŠCHT Praha.

- 1) Bude usilovat o uvedení do plného provozu společného pracoviště VŠCHT Praha a Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR s názvem „Laboratoř molekulové spektroskopie vysokého rozlišení“, které v současné době vzniká na VŠCHT Praha za finanční účasti ÚFCH JH AV ČR.
- 2) Nadále bude podporovat činnost výzkumného centra LN 00B142 „Výzkumné centrum pro komplexní zpracování ropy“, jehož je nositelem, stejně jako činnosti dalších výzkumných center, na kterých se podílí jako spolunositel. Jedná se o následující výzkumná centra:
 - LN 00A032 „Struktura a dynamika komplexních molekulových systémů a biomolekul“
 - LN 00A079 „Centrum integrované genomiky“
 - LN 00B030 „Centrum pro molekulární a genovou biotechnologii“
- 3) V oblasti personálního zajištění výzkumu bude usilovat o zvýšení počtu vysoce kvalifikovaných pracovníků (zejména docentů a profesorů) na řešení výzkumných záměrů a grantových úkolů. Zváží možnosti změn rámcových požadavků pro habilitační řízení a řízení na jmenování profesorem tak, aby nově umožňovaly diferencovaný přístup podle jednotlivých oborů a také s přihlédnutím k věku uchazeče. Cílem tohoto opatření je snížení průměrného věku nově habilitovaných docentů a nově jmenovaných profesorů při udržení jejich vysoké odborné úrovně.
- 4) V oblasti mobility pracovníků ve výzkumu a vývoji podpoří zejména větší mobilitu studentů doktorských studijních programů. Jako povinnou součást jejich studijních plánů chceme zařadit studijní pobyt mimo VŠCHT Praha na partnerských pracovištích v zahraničí, na pracovištích AV ČR nebo v jiných výzkumných ústavech či průmyslových firmách.
- 5) Mezinárodní spolupráci ve výzkumu a vývoji chceme zintenzivnit účastí co největšího počtu pracovníků školy v mezinárodních výzkumných týmech a výzkumných projektech, řešených především v rámci 6. RP a dalších podobných programů. VŠCHT Praha přijme opatření, usnadňující pracovníkům školy podávání přihlášek do těchto programů a zpracování všech podkladů vyžadovaných jako součást přihlášek.
- 6) Při řešení výzkumných projektů pro průmyslové partnery zintenzivní spolupráci především s velkými průmyslovými firmami.
- 7) Bude pokračovat v řešení výzkumných záměrů, o jejichž prodloužení do konce roku 2004 požádala. Připraví vše pro úspěšné zahájení řešení nových výzkumných záměrů od ledna 2005. Konkretizace výzkumné náplně jednotlivých výzkumných záměrů na rok 2004 je uvedena v příloze.

V oblasti informačních technologií

VŠCHT Praha se v roce 2004 v oblasti informačních technologií zaměří na následující úkoly.

- 1) Pokračovat v zavádění integrovaného 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) Dokončí počítačovou síť na koleji Sázava v areálu kolejí na Jižním městě a tak umožnit studentům přístup k internetovým informačním zdrojům v této lokalitě. Vybuduje optickou páteř mezi objekty Sázava a Volha. Zprovozní v plném rozsahu telefonní služby navázané na novou telefonní ústřednu VŠCHT Praha v areálu na Jižním městě.
- 4) Rozšíří počítačové síť VŠCHT 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) Rozšiřovat a zdokonalovat novou verzi Internetových stránek školy, zvyšovat informační obsah stránek, zjednodušit distribuci vnitřních dokumentů.
- 8) Zvýší výkonnost některých serverů zajišťujících ekonomické (zpracování mezd) a pedagogické agendy (systém Student), rozšířit funkčnost systému Student do oblasti interaktivní práce studentů s tímto systémem.
- 9) Rozšíří možnosti stávajícího informačního systému (upgrade stávajících modulů, zvýšení komfortu uživatelů).
- 10) Zajistí provoz centrálních serverů v případě dlouhodobějších výpadků elektrického proudu pomocí vhodného náhradního zdroje (motor-generátor).
- 11) Obnoví HW i SW pro provoz knihovního systému pro evidenci knižních fondů VŠCHT Praha.
- 12) Zpřístupní široké odborné veřejnosti informace o publikační činnosti pracovníků školy za období posledních 10 let prostřednictvím centrálně spravované databáze OBD Pro.

V oblasti mezinárodní spolupráce ve vzdělávání

VŠCHT Praha se v roce 2004 v oblasti mezinárodní spolupráce ve vzdělávání zaměří na následující úkoly.

- 1) Realizovat co největší počet studentských mobilit v programu SOCRATES/ERASMUS zaměřit se zejména na realizaci delších studijních pobytů studentů (1-2 semestry) .
- 2) Rozšiřovat počet přijíždějících zahraničních studentů v programu SOCRATES /ERASMUS aktivním vyhledáváním a jednáním s vhodnými partnerskými univerzitami.
- 3) V rámci programu SOCRATES/ERASMUS rozšíří mobility učitelů o pedagogické pobyty studentů doktorských studijních programů, kteří se budou na partnerské univerzitě podílet na výuce studentů.
- 4) Rozšíří aktivní zapojení do evropského programu Leonardo da Vinci. Bude pokračovat v úspěšném zapojení do projektů zaměřených 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. Aktivně se zapojí i do dalších aktivit zahrnutých v tomto programu (pilotní projekty, projekty sítí).
- 5) Aktualizovat informace o studiu v anglickém jazyce zejména na Internetové stránce školy.
- 6) Pokračovat v rozvoji výuky v anglickém jazyce pro zahraniční studenty programu SOCRATES/ERASMUS, nabídnout možnost absolvovat předměty vyučované v anglickém jazyce také českým studentům.
- 7) Připravovat, inovovat a rozšiřovat kurzy pro zahraniční organizace nebo zahraniční studenty samoplátce.
- 8) Zapojí se do dalších programů nabízejících možnosti výměnných zahraničních pobytů studentů a pedagogů např. Transformační a rozvojové programy MŠMT, program Marie Curie a další.

V oblasti ubytovacích a stravovacích zařízení, péče o studenty

VŠCHT Praha se v roce 2004 v oblasti ubytovacích, stravovacích zařízení a péče o studenty zaměří na následující úkoly.

- 1) Pokračovat v rekonstrukci elektrorozvodů, zřízení počítačové a telefonní sítě na koleji Volha.
- 2) Realizovat telefonní připojení koleje Volha na digitální telefonní ústřednu na koleji Sázava a propojení kolejí Sázava a Volha optickým kabelem.
- 3) Provede nutné opravy střechy a oken na kolejích Sázava a Volha, pokračovat v rekonstrukci ubytovacích buněk na koleji Volha.
- 4) Pokračovat v obměně vybavení (nábytku) studentských pokojů na koleji Sázava.
- 5) Realizovat dostavbu topného kanálu propojujícího centrální teplárnu s kotelnou na koleji Volha.

- 6) 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.
- 7) Obnovit server a programové vybavení pro ubytování a stravování.

V oblasti investic, rozvoje a obnovy majetku

- 1) VŠCHT Praha předpokládá realizaci všech investičních akcí, které předložila do pětiletého (2003-2007) investičního programu 23334B „Rozvoj a obnova materiálně technické základny“ na rok 2004, a také realizaci těch akcí, které byly neočekávaně vyřazeny z financování v roce 2003. Většina investic je zaměřena do obnovy a pořízení strojů a zařízení, tedy do přístrojového vybavení pro vzdělávací a výzkumnou činnost. Jedná se zejména o

a) spektrometr pro nukleární magnetickou rezonanci 600MHz (plánováno a pro výrazné snížení dotace nerealizováno v r. 2003)	cca 30 mil. Kč
b) RTG monokrystalový difraktometr (plánováno a pro výrazné snížení dotace nerealizováno v r. 2003)	cca 12 mil. Kč
c) přístrojové vybavení ESCA pro chemickou analýzu povrchů	cca 35 mil. Kč
d) analyzátor CHN(S)	2,2 mil. Kč
e) průtokové procesní jednotky	3,0 mil. Kč
f) multikomponentní analyzátor plynů	2,5 mil. Kč
g) elektrochemické přístroje pro studium koroze kovů	3,0 mil. Kč
h) měřicí přístroj Instron pro měření mech. vlastností materiálů	4,5 mil. Kč

a další přístroje s nižšími pořizovacími náklady.

- 2) V roce 2004 bude VŠCHT Praha pokračovat v realizaci dlouhodobého plánu v oblasti neinvestiční postupné opravy střešního pláště na budovách A, B, C a opravy obvodových plášťů dvorů.
- 3) V roce 2004 budeme pokračovat v realizaci projektu zlepšení ekonomiky provozu budov v Dejvicích i v areálu kolejí s přihlédnutím k výsledkům energetického auditu z roku 2003. Cílem je obnova všech stávajících prostor v budovách A, B, C a v prostorách, které budou uvolněny ČVUT v budově B.

Obnova vyžaduje rekonstrukce a modernizace zejména u :

- a) Kanalizace a rozvodů vody v budově A, B, C.
- b) Rozvodů plynu v budově B.
- c) Ústředního vytápění v budově A, B, C.
- d) Vzduchotechniky.

- e) Elektroinstalace.
- f) Rozšíření počítačové sítě do nově získaných prostor.
- g) Stávajících i nově získaných prostor včetně zrušení provizorních přístaveb.
- h) Dokončení obnovy střešních plášťů a obnova obvodových plášťů budov.
- i) Zlepšení možností pro samostatnou práci studentů v budovách školy.

4) V dlouhodoběji realizovaných akcích bude i v roce 2004 VŠCHT Praha :

- a) Pokračovat ve spolupráci se smluvními partnery (TIMON Bauregie GmbH & Co. KG, MŠMT a ČVUT) v realizaci výstavby na Vítězném náměstí podle Rámcové smlouvy z roku 1999 s konečným cílem kolaudace 2005 až 2006.
- b) Pokračovat ve spolupráci s STK a ČVUT na projektové přípravě výstavby objektu Národní technické knihovny na pozemcích před budovou A, tak aby obě rozsáhlé stavební akce (Dejvice Center a Národní technická knihovna) proběhly pokud možno paralelně).
- c) Pokračovat v narovnávání majetkoprávních vztahů v areálu kolejí (stavby na pozemku cizího vlastníka, restituční spory, rozvojové plochy).
- d) Ve směřování značné části investičních prostředků z grantových a mimorozpočtových zdrojů do pořízení a obnovy přístrojového vybavení pro výzkum jako integrální součásti vysokoškolské výuky a podpory spolupráce s praxí.

Příloha

Plán výzkumných aktivit jednotlivých výzkumných záměrů

VZ MSM 223100001 – Katalytické procesy v chemii a chemické technologii

1. V oblasti nových možností získávání speciálních výrobků organické technologie bude započato se studiem metateze. Studovány budou především heterogenní katalyzátory na bázi oxidu rhenia, přičemž studované reakce budou orientovány do oblasti chemických specialit.

Budou dále rozvíjeny všechny dosud studované směry v oblasti selektivních katalytických hydrogenací, především pak v systémech nenasyčených karbonylových sloučenin. Studium enantioselektivních hydrogenací bude rozšířeno o heterogenizované homogenní katalyzátory a budou studovány další možnosti využití selektivních hydrogenací pro výrobu chemických specialit. Zvláštní pozornost bude věnována vlivu typu nosičového makroligandu na selektivitu reakce. Dále budou studovány možnosti zakotvování homogenních Ru-BINAP komplexů na heterogenních maticích pro enantioselektivní reakce. Tyto katalyzátory budou použity v modelových reakcích a bude sledován vliv typu katalyzátorů na hodnotu optického výtěžku.

2. V oblasti výzkumu nových katalyzátorů naváže výzkum na dosavadní poznatky, získané řešením výzkumného záměru. Bylo zjištěno, že metoda TPD dimethylpyridinů, doporučená k měření kyselosti silikátových sorbentů není univerzální. Experimentálně bude vymezen rozsah a hledány příčiny omezené použitelnosti metody pro zvolený typ nosiče měděného katalyzátoru. Byl navržen a teoreticky zdůvodněn postup eliminace vlivu obtížně redukovatelného ZnO na selektivitu rozkladné adsorpce N₂O. Bude studován vliv dalších vybraných oxidů (Cr₂O₃ a MnO₂) na přesnost a spolehlivost měření specifického povrchu Cu pomocí rozkladné sorpce N₂O. Byly optimalizovány reakční podmínky syntézy mezoporézních silikátů se strukturou typu MCM-41. Bude uskutečněn přenos výsledků laboratorního studia do většího měřítka a získány podklady pro fundovaný odhad nákladů na výrobu tohoto produktu. Navážeme také na dosud realizované studie katalytické aktivity modifikovaných zeolitů vzhledem k neoxidativní dehydrogenaci metanu se zaměřením na vznik aromatických látek, především benzenu. Pozornost se soustředí na deaktivaci katalyzátorů vlivem vylučování elementárního uhlíku a způsoby jejího potlačení.

3. V oblasti výzkumu chování vícefázových a víceučelových reaktorů, jejich modelování a optimalizace se naváže na řešení EU projektu „Cyclic operation of trickle bed reactor – CYCLOP“, jehož ukončení je předpokládáno k 1.9.2003. Pozornost se zaměří na optimalizaci podmínek periodického režimu při modulovaném nástřiku reakční směsi, tj. délka periody, její split (podíl doby zvýšeného nástřiku v periodě) a amplituda rychlosti nástřiku s ohledem na výkon reaktoru, případně selektivitu ve složitější soustavě reakcí. Současně se budou rozvíjet a řešit dynamické modely pro popis periodicky řízeného reaktoru. Zvláštní úsilí bude věnováno výzkumu dynamického chování reakčních soustav, ve kterých dochází k fázové změně reakční směsi a k případnému posunu chemické rovnováhy. Uvažuje se o

rozvinutí spolupráce s Ústavem chemického inženýrství Univerzity ve Waterloo, Kanada.

Bude také pokračovat studie matematického modelování mikroreaktorů s katalyticky aktivní stěnou z 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. Tento model bude využit při návrhu jednotky pro produkci paliva pro palivové články v mobilních aplikacích.

4. V oblasti výzkumu kinetiky heterogenně katalyzovaných reakcí bude přistoupeno ke studiu kinetiky reakcí v mikropulzním reaktoru, které naváže na výsledky studia pyrolýzy uhlovodíků v tomto typu reaktoru. Důkladné zpracování naměřených dat bude dalším rozšířením aplikací regresní analýzy a umělých neuronových sítí v této oblasti. Výsledky studie by měly poskytnout efektivní metodu pro získávání kinetických parametrů heterogenně katalyzovaných reakcí v plynné fázi.

5. Ve výzkumu ethylenové pyrolýzy uhlovodíků bude rozšířeno matematické modelování do oblasti pyrolýzy výševroucích surovin. Laboratorní experimenty budou v rámci spolupráce s VUAnCh Ústí n. L. zaměřeny na podrobnou studii možností zpracování zbytkových uhlovodíkových frakcí C₅ a C₉.

6. Hlavním úkolem v oblasti výzkumu procesu mokré granulace léčiv bude uplatnění výsledků předchozího výzkumu v poloprovozních podmínkách při optimalizaci řízení provozních granulátorů a při zavádění nových preparátů do výroby.

7. V oblasti modelování přenosových jevů v pórovitých látkách byl vývoj modelu sítí pórů spjat s modelováním vtlačování a vytlačování rtuti. Při modelování bylo dosaženo dobré shody s experimentálními daty, což dovozuje předpokládat, že užitá síť pórů zachycuje v rozumné míře topologii a morfologii skutečných pórů. V dalším stupni vývoje modelu bude přikročeno k modelování přenosu hmoty (ustálená permeace inertních plynů) pomocí takto získané sítě pórů.

8. Výzkum v preparativní kapalinové chromatografii bude zaměřen na lepší porozumění adsorpčním rovnováhám, které jsou zejména při práci s proměnným složením mobilní fáze (gradientová eluce) stále obtížně popsitelné. V minulém roce byl navržen postup, který spočíval v oddělení výpočtu chemických potenciálů (fugacit) jednotlivých složek v mobilní fázi od výpočtu fugacit složek adsorbované fáze. Jelikož tento postup byl úspěšný při aplikaci na vybrané adsorpční systémy, bude tento postup dále rozvíjen. Bude pokračovat spolupráce s Ústavem chemického inženýrství Univerzity Otto-von-Guericke v Magdeburku.

9. V oblasti technologických procesů nezbytných pro trvale udržitelný rozvoj, tedy nezatěžujících životní prostředí, a procesů pro zpracování odpadních a toxických látek výzkum naváže na dosavadní poznatky v katalýze, chemii syntéz i reaktorovém inženýrství.

Problematika katalytických oxidací organických látek ve vodném prostředí se nově zaměří na vliv řízených změn vstupních podmínek oxidace na střední rychlost rozkladu

nečistot, její selektivitu a výkon reaktoru. Bude studována interakce mezi chemickým procesem, reaktorovým uspořádáním a pokusnými podmínkami z pohledu transportu reakčních složek, tepla a působení katalyzátorů.

Metodicky byla vyřešena periodická modulace nástřiku vodného roztoku fenolu do katalytického zkrápěného reaktoru. Nově budou sledovány zejména selektivita a rychlosti oxidace složek i celková rychlost vyjádřená jako změna parametru CHSK. Dále se práce zaměří na propracování on-line řízení a snímání dat z pokusného zkrápěného reaktoru a analýzu dat z hlediska vlivu neustálených podmínek a omezení transportem hmoty a tepla při kontinuálním testování oxidací. Konečně v oblasti matematického modelování oxidací bude propracován dynamický model mokré oxidace.

10. 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.

11. 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 aminokarbenových komplexů chromu v Pd- katalyzované allylové substituci. Tato reakce umožňuje přípravu řady nových nenasycených karbenových komplexů, které mají obecné využití v organické syntéze a zvláště při syntéze biologicky zajímavých látek, například β -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.

12. 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 psychoterapeutických, 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 kyselé a bazické

katalýzy. Jelikož fluorované butenolidy představují rovněž nové reaktivní systémy, budou studovány i z tohoto hlediska se záměrem následného využití poznanych reakcí v syntézách cílových sloučenin.

13. 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 metodik 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 přenašeče kyslíku, tj. emulzí perfluorovaných sloučenin. Jako strukturní typy budou zkoumány: fluoralkylované deriváty sacharidů, fluoralkylderiváty fosfocolinu 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 porfyriu budou rovněž zkoumány na protirakovinné vlastnosti v aplikaci fotodynamické terapie..

14. 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. Cílem rámcového záměru je výzkum a vývoj nových hydrofilních/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.

15. 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.

16. 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 báze nebo kyselých katalýz stabilní atropoisomery substituovaných meso-porfyrinových derivátů.

17. 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 silylovou nebo borylovou skupinou. Získané fluorované stavební bloky budou aplikovány na syntézu vybraných skupin biologicky aktivních látek.

18. 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.

19. 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 organolithných a organohorečnatých sloučenin, která vede k náročným separacím směsi 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 enantiosektivní hydroboraci, enantiosektivní 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.

20. 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.

21. V oblasti chemie calixarenů:

- Bude studována metodika přechodovými kovy katalyzované tvorby C-N vazby aplikovaná na syntézu polymakrocyclických systémů na bázi calixarenů a polyazamakrocyclů, dovolující získat a studovat konformačně rigidní makrocyclické struktury.

- Na syntézu podobných polymakrocyclických sloučenin bude využita Zn-katalyzovaná McMurry reakce, vedoucí k nenasyceným 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.

22. V oblasti aplikace membránových separačních procesů v perspektivních chemických technologiích a při separaci odpadních a toxických látek naváže výzkum v oblasti elektromembránových separačních procesů na dosud dosažené výsledky a zaměří se především na prohloubení teoretických i praktických znalostí o procesech elektrodialýzy a elektrodeionizace s cílem vypracovat obecný popis těchto procesů pro tzv. hluboké odsolení málo vodivých systémů. Zde se jedním z limitujících dějů stává přenos hmoty z objemu elektrolytu k povrchu membrány. Dochází k tzv. koncentrační polarizaci, která představuje v praktických systémech nežádoucí jev. Práce se zaměří na obecný popis závislosti limitní hustoty toku hmoty na hydrodynamice toku elektrolytu a koncentraci elektroaktivní látky. Jednou z možných aplikací je např. odsolování roztoků organických látek a biochemických systémů.

Zvláštní případ odsolení málo vodivých systémů představuje příprava vysoce čisté vody. Z důvodu snížení elektrického odporu systému a omezení limitace přenosem hmoty je v tomto případě v prostoru mezi membránami umístěna vrstva iontoměniče. Jedná se o proces známý jako elektrodeionizace. Zde bude cílem studia navázat na dosud získané poznatky a optimalizovat pracovní režim sériově zapojeného elektrodialyzačního a elektrodeionizačního modulu.

V oblasti anorganických membrán bude pokračovat vývoj technik přípravy a způsobů charakterizace zeolitických a SiO₂ mikroporézních vrstev. Pozornost bude věnována i membránám na bázi polymerní matrice s anorganickými plnivy. Sledován bude vztah mezi jejich strukturou a sorpčními a transportními vlastnostmi s využitím mikroskopických a spektroskopických technik. Dosud získané poznatky umožní rozvinout teoretický popis těchto dějů na základě fenomenologických matematických modelů a metod molekulové dynamiky. Studované membránové materiály budou uplatněny v katalytických procesech a při separaci plynů a par.

Pokračovat bude rovněž vývoj strukturovaných nosičů pro anorganické nanoporézní membrány. Použit bude oxid hlinitý o různé zrnitosti. Cílem bude připravit podložky s úzkou distribucí pórů a větší propustností. Rovněž budou pokračovat práce na přípravě mikroporézních skleněných nosičů na bázi boritokřemičitého skla (Vycor). V tomto směru bude cílem vybrat vhodné složení výchozího boritokřemičitého skla a pokračovat v testování teplot a doby tepelného zpracování (fázová separace) a podmínek vyluhování rozpustné fáze.

23. V oblasti elektrochemického inženýrství budeme sledovat následující oblasti: Jedním ze základních dějů sledovaných na tomto poli je přestup hmoty v oblasti přirozené a nucené

konvekce. V oblasti přirozené konvekce bude studium zaměřeno na další typy elektrod, jako jsou různě nakloněné disky a trojúhelníky. Budou stanoveny dílčí a celkové koeficienty přestupu hmoty a provedena korelace přestupu hmoty pro tyto geometrie. Jelikož měření přestupu hmoty poskytuje dobrou simulaci přestupu tepla, získané korelační rovnice mohou být použity pro odhad koeficientů přestupu tepla v prakticky významných systémech. V oblasti nucené konvekce se pozornost zaměří na vliv hydrodynamiky toku a s ní spojené intenzity přenosu hmoty na odezvy elektrochemických senzorů pro kapilární celou s divergentním tokem a pro obtékanou mikroelektrodu v oblasti laminárního proudění. Významné rozšíření již stávajících znalostí představuje zahrnutí chemické reakce probíhající v mezni difúzní vrstvě. Pokračovat bude rovněž aktivita na poli matematické simulace rozložení potenciálů a proudových hustot v elektrochemických celách se zaměřením na systémy určené pro elektrochemickou desinfekci pitné vody.

24. V oblasti procesů pro snížení zátěže životního prostředí budou předmětem naší pozornosti následující otázky:

Studium reakce oxidu vápenatého se sulfanem: problematika spadá do oblasti horkého odsiřování generátorového plynu pomocí pevných sorbentů. Studie navazuje na výsledky dosažené při studiu regenerativních sorbentů na bázi oxidu zinečnatého. Použití oxidu vápenatého, který by po odsiřování nebyl regenerován, ale dále využit například k výrobě průmyslových hnojiv a síry, se jeví oproti regenerativním postupům jako výhodnější a aplikačně schůdnější. Pro použití konkrétní výchozí vápenaté suroviny je třeba získat údaje o průběhu reakce v závislosti na reakčních podmínkách, což bude náplní navržené studie.

Vliv produktů na reakci apatitu Kola s kyselinou dusičnou: při studiu této velmi důležité průmyslové reakce pro výrobu kombinovaných hnojiv byl zjištěn významný vliv produktů, zejména kyseliny trihydrogenfosforečné, na její průběh. Tato problematika bude další náplní výzkumné činnosti. Jejím cílem je zahrnout tento vliv do kinetických rovnic umožňujících výpočet průmyslových reaktorů. To ve svém důsledku povede k návrhu efektivnějších parametrů procesu výhodnějšího jak z hlediska ekonomického, tak z hlediska ochrany životního prostředí.

Způsob přípravy a separace železanů: soli kyseliny železové představují skupinu látek s extrémně silnými oxidačními účinky. Její uplatnění je předpokládáno především v oblasti úpravy pitných a odpadních vod. V poslední době se však stále více dostává do popředí i její aplikace v oblasti zdrojů proudu. Zcela nový aspekt získal pohled na tuto látku v posledních dvou letech z bezpečnostního hlediska, neboť se jedná o velmi účinný prostředek k likvidaci chemických a biologických zbraní hromadného ničení. Pozornost se zaměří především na oblast elektrochemické syntézy a separace železanu v silně alkalickém prostředí.

Separace solí kovů extrakčními metodami: na práce zabývající se převážně extrakcí primárními aminy bude v roce 2004 navazovat studium při použití směsných extrakčních činidel, studium vlivu rozpouštědel a modifikátorů se zaměřením na kovy VI. A skupiny a kovy platinové. Právě v oblasti zpracování odpadních roztoků obsahujících platinové kovy použití kapalinové extrakce nachází uplatnění i v České republice.

25. V oblasti vývoje procesů pro dekontaminaci pitné a odpadní vody budou sledovány následující oblasti.

Fotokatalytická degradace: studium degradace polutantů na vrstvě TiO_2 bude pokračovat v několika směrech. Bude studován vliv pH na rychlost fotodegradace a dále možnost zvýšení rychlosti odbourávání kombinací heterogenní (TiO_2) a homogenní (Fe(III)) fotokatalýzy. Dalším směrem výzkumu je potom příprava vrstvy fotokatalyzátoru s vysokým povrchem a zároveň dobrou vodivostí, což umožňuje využít pozitivní účinek vložení vnějšího napětí. Elektrochemické odbourávání znečištění vod: elektrochemie představuje jeden z klasických způsobů odstraňování iontů těžkých kovů. Jak ukázaly již realizované studie, její přímé uplatnění naráží často na problém nízké účinnosti a selektivity a to zejména v oblasti nízkých koncentrací vyžadovaných hygienickými normami. Jako vhodná se ukázala být kombinace iontové výměny a elektrochemického zpracování regeneračních roztoků. Tato kombinace se osvědčila při odstraňování dusičnanů z pitné vody. Na tento výzkum bude navázáno při výzkumu detoxifikace důlních vod s komplexním složením.

26. Na poli alternativních zdrojů energie se pozornost zaměřuje na výzkum nízkoteplotních palivových článků typu PEM. Studována je možnost náhrady perfluorované sulfonované membrány používané v současnosti jako elektrolyt membránami nesulfonovanými. Tyto experimenty dokázaly, že polymery na bázi monomerů s aromatickým charakterem vykazují v dosud prostudovaném krátkodobém horizontu zajímavé vlastnosti a naznačily směr dalšího vývoje. Paralelně probíhá výzkum vhodného katalyzátoru anodové reakce a jeho nosiče. V roce 2004 se hodláme zaměřit na vývoj metodiky přípravy tzv. Membrane Electrode Assembly (MEA), nebo-li vlastního palivového článku, a to na bázi stávajících perfluorovaných i nově vyvinutých membrán.

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

Výzkumný záměr bude v roce 2004 navazovat na dosud získané výsledky a dále rozvíjet řešení z předchozích let. Hlavním nosným vědeckým problémem VZ zůstává studium 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. Z hlediska aplikačního bude VZ opět zahrnovat tři hlavní oblasti, určující základní orientaci výzkumu na FCHT:

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

V roce 2004 se v souladu s rámcovými programy EU výzkum více posunuje do oblasti nanomateriálů. Oproti prvním rokům řešení je rovněž posíleno aplikační zaměření výzkumu.

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

- nalezení a 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

Podrobnější specifikace výzkumu v jednotlivých oblastech:

ad 1) Materiály pro technické aplikace

Materiály na bázi směsných oxidů: V rámci systematického studia přípravy a charakterizace vysokoteplotních oxidových supravodičů bude pozornost zaměřena na perspektivní systém Bi-Sr-Ca-Cu-O a na vliv částečné substituce přechodnými a alkalickými kovy. Budou studovány směsné oxidy na bázi manganitů $\text{Bi}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ a kobaltitů $\text{Bi}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CoO}_3$. Cílem je příprava a charakterizace monokrystalů, měření a interpretace transportních, magnetických a tepelných vlastností, zejména s ohledem na vysokoteplotní termoelektrický jev a modelování termodynamické stability na základě měření a odhadu termodynamických dat.

Optické vlnovody: Pro uvažované použití aktivních vlnovodných struktur bude studována příprava a vlastnosti dielektrických krystalických a nekystalických materiálů, obsahujících ionty přechodných kovů. Dále bude hledán vhodný matematický popis procesu iontové výměny směřující k optimalizaci přípravy vlnovodů daných vlastností

Příprava tenkých vrstev: Depozicí metodou MOCVD budou připravovány tenké vrstvy ternárních pevných roztoků nitridů podskupiny gallia, patřící mezi nejdůležitější moderní polovodičové materiály. Budou studovány podmínky chemické a elektrochemické přípravy tenkých a mechanicky pevných krystalických a amorfních vrstev na bázi Ni-P pro rentgenovou optiku v rámci kosmického programu XEUS. Bude pokračovat studium přípravy mikrometrických a nanometrických vrstev boridů, karbidů a nitridů přechodných a nepřechodných kovů plazmochemickými metodami. Dále budou studovány dynamické vlastnosti a stability senzorových vrstev připravených pulzní laserovou depozicí (In_2O_3 , InAcAc) a tenké kovové vrstvy na polymerním filmu a feroelektrické materiály na bázi polymerních kompozitů. V oblasti nedestruktivní diagnostiky (NDT) materiálů bude hlavní pozornost soustředěna na aplikace magneto-optických vrstev typu $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$, umožňující indikovat magnetické fáze vznikající v nemagnetickém materiálu (např. austenitu) v důsledku mechanického a tepelného namáhání. Budou studovány vlastnosti vrstev na bázi TiO_2 (chemická odolnost, světelná absorbce, reflexe) a budou syntetizovány nové typy anorganicko-organických vrstev kopolymerací alkoxydů křemíku a titanu s vybranými organickými polymery.

Příprava mikrovlnných struktur: Budou připraveny mikrovlnné struktury s využitím technologického postupu side-by-side se zaměřením na minimalizaci sériového odporu těchto prvků. Studována bude i optimalizace vlastností Schottkyho přechodů a jejich tepelná stabilita.

Iontově vodivá skla, skleněné elektrody: Cílem je vývoj nových protonových vodičů na bázi anorganicko-organických skel vhodných pro palivové články. V oblasti skleněných elektrod bude hlavním cílem nalézt možnosti ovlivnit jejich iontovou selektivitu složením membrán.

Modelování struktury skel: Bude pokračovat vývoj pomocných počítačových programů k analýze struktury skel modelovaných pomocí molekulové dynamiky. Pozornost bude dále věnována transportním vlastnostem na nano-úrovni, korelačním efektům a konektivitě strukturních jednotek. Budou sledovány i změny povrchové struktury alkalicko-křemičitých skel při tepelné expozici.

Konstrukční materiály: V oblasti polymerních materiálů bude výzkum zaměřen na fyzikální modifikace plastů elastomery s cílem sledovat vliv sesíťování jednotlivých polymerních složek na výsledné vlastnosti, na chemickou modifikaci plastů elastomery, v obou případech s cílem získat materiály s vysokou houževnatostí, na přípravu polymerních nanokompozitů s využitím vrstevnatých silikátů, na přípravu polyimidů s definovanou strukturou a modifikaci jejich vlastností kombinací s dalšími polymery a mikroporézními částicemi. Kapalně polybutadieny budou zkoumány jako multifunkční přísada do kaučukových směsí, a to z hlediska zlepšení jejich zpracovatelnosti a zvýšení elasticity výsledné pryže.

V oblasti kovových materiálů bude výzkum orientován na strukturu a vlastnosti ultrarychle ztuhlých amorfních popřípadě nanokrystalických slitin hliníku s přechodnými kovy (Ni, Cr, Fe, Ti, Zr a další), které budou vyrobeny metodou rovinného lití (planar flow casting). Tyto slitiny se vyznačují vysokými pevnostními vlastnostmi a tepelnou stabilitou. Dalším cílem je nalezení optimálního postupu tepelného zpracování vysoce pevných slitin Al se zlepšenými slévarenskými vlastnostmi, jejichž vývoj a optimalizace jejich chemického složení byly završeny již v minulém roce. Pozornost bude věnována procesu iontové nitridace nástrojové oceli se zvýšeným obsahem niobu vyrobené technologií práškové metalurgie. Budou zkoumány metody vedoucí ke zlepšení odolnosti titanu proti vysokoteplotní oxidaci, zejména tvorba ochranných povrchových vrstev silicidů. Bude hodnocena mikrostruktura a ochranný účinek vrstev připravených různými metodami.

Výzkum koroze a protikorozi ochrany kovů je zaměřen na alternativní kovové materiály pro výztuže betonu, s cílem stanovit hraniční podmínky použití ve vztahu stimulatorům koroze a ověřit elektrochemické metody monitorování. U legovaných / pasivovatelných materiálů bude sledován vliv přestupu tepla na možné dopady tohoto děje vedoucí jak ke snížení korozní odolnosti materiálu, tak ke zvýšení agresivity na straně prostředí. Pro studium vlastností oxidických vrstev, vznikajících ve vodném prostředí za zvýšených teplot, budou vyvinuty metody lokálního elektrochemického hodnocení. U materiálu na bázi mědi, které jsou ve styku s pitnou vodou, bude sledován vliv podmínek (proudění, teploty, složení pitné vody apod.) na množství uvolňované mědi. Pozornost bude věnována aktivitě různých typů prostředí z hlediska interakce atomárního vodíku se strukturními součástmi matrice kovů.

V oblasti anorganických pojiv a žáromateriálů bude výzkum zaměřen na alkalicky aktivované materiály, tzv. geopolymery. Cílem je příprava materiálů s vysokou pevností. U vybraných typů materiálů budou studovány jejich užité vlastnosti z hlediska využití jako materiálů stavebních. Pokračovat bude studium termomechanických vlastností žárobetonů. Budou vyvíjeny nové tepelně izolační materiály z vláken se zvýšenou rozpustností ve fyziologických kapalinách.

Výzkum keramických materiálů bude nadále zaměřen na oxidové systémy, především Al_2O_3 a ZrO_2 . 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: Dosud byly získány popisy základních procesů při tavení skel v neizotermních tavicích prostorech s prouděním a příslušné metody pro experimentální zkoumání těchto procesů a pro získávání dat do popisů reprezentovaných modely. Cílem v období prodlouženého výzkumného záměru je hledat a definovat pokročilé nebo nové principy tavicího procesu skel. Základem výzkumného postupu bude definice dílčích cílů, sestavení modelu pro daný účel z modulárních modelů procesu, získání příslušných experimentálních dat a provedení parametrické studie procesu nejprve za zjednodušených a u optimálních případů za co nejreálnějších podmínek. Výsledky převážně kinetických studií homogenizačních procesů budou vzaty za základ pro získání základních technologických veličin, kterými je měrná spotřeba energie na proces, výkon tavicího prostoru, případně jeho rozměr (miniaturizace tavicích prostorů) a kvalita produktu vyjádřená podmínkou ukončení homogenizačních procesů v prostoru. V příznivých případech bude navrženo optimalizované či nové uspořádání procesu. Kombinace fyzikálního a matematického modelování bude využita pro nalezení vhodných kombinací jednotlivých intenzifikačních prostředků tavicího procesu se zaměřením na jejich optimální polohu v bazénu sklářské tavicí pece.

Bude pokračovat studium reaktivního vypařování modelových tavenin v atmosféře $\text{Na}_2\text{O-SiO}_2$, $\text{Na}_2\text{O-CaO-SiO}_2$ a tavenin s obsahem B_2O_3 v atmosféře inaktivní (dusík) a v reaktivních plynech (kyslík, oxid uhličitý, vodní pára). Dále bude pokračovat sledování vlivu oxidů vzácných zemin na vlastnosti křišťálových sklovin.

ad 2) Materiály pro zdraví člověka

Biomateriály: Hlavním cílem zůstává vývoj materiálů pro kostní a dentální implantáty, pro cévní protězy a náhrady kožního krytu. Zároveň bude simulována interakce připravených materiálů s lidským organismem. Na rozdíl od předchozích let bude při této simulaci sledována interakce biomateriálů nejen s roztoky simulujícími anorganickou část krevní plazmy, ale i vliv jednotlivých organických složek na tuto interakci. Ve spolupráci s dalšími pracovišti bude sledován i vliv interakce a její kinetiky na živé buňky. Výstupem pak kromě nových materiálů či modifikovaných materiálů budou i testovací metody „in vitro“, umožňující rychlý předběžný odhad vhodnosti nových materiálů pro medicínské aplikace. Výzkum by měl 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 materiály z hydrofilní silikonové pryže na bázi syntetických hydrogelů připravovaných „in situ“ srážecí polymerací a současným síťováním. Nově budou pro přípravu biomateriálů použity i biomimetické metody.

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 jev polymorfie farmaceutických substancí v jejich lékové formě. Budou vyvíjeny nové metody stanovení fázových nečistot v polymerní směsi s detekčním limitem do 1%. Budou studovány především statiny (atorvastatin a simvastatin), cyklosporiny a jiná imunosupresiva a námelové alkaloidy. Výstupem bude strukturní popis jednotlivých polymorfů a solvatomorfů z hlediska jejich patentové ochrany, zpracování „drug master file“ dokumentů a kontrola fázové čistoty při výrobě.

ad 3) Materiály a ochrana prostředí a kulturních památek

Recyklace odpadů: V oblasti kovonosných odpadů je cílem vývoj a laboratorní ověření hydro- a pyro- metalurgických postupů pro získávání neželezných a ušlechtilých kovů. Výstupem bude návrh technologií pro přípravu katodového zinku z odpadních zinkových galvanických kalů se zvýšeným obsahem mědi a niklu a ze stěrů s obsahem chloridů po žárovém zinkování. Dále návrh technologie pro zpracování elektrošrotu, produkty budou elektrolyticky rafinovaná měď a anodový kal s obsahem Ag, Au, Pt a Pd.

V oblasti polymerních odpadů se bude výzkum týkat jednak mechanické regenerace pryže a recyklace plastů se zaměřením na kompatibilizaci směsí odpadních plastů, jednak biologicky odbouratelných polymerních materiálů na základě odpadního polyethylentereftalátu (PET), z chemického hlediska alifaticko-aromatických kopolymerů a dále polyesteramidů, jejichž biologická rozložitelnost bude ověřována kompostovacími testy a použitím vybraných kmenů ligninolytických hub.

K využití odpadních látek (především popílků a sádrovce) směřují i studie vlastností a syntézy nových alkalicky aktivovaných hydratovaných anorganických pojiv. Očekávaným výstupem je návrh optimálního složení z hlediska mechanických vlastností a korozní odolnosti. *Materiály pro likvidaci toxických látek a odpadů:* Bude hledána možnost modifikace membrán na bázi silikonového kaučuku a polyolefinových dutých vláken halogenalkyl(meth)akrylátů s cílem zlepšení pervaporačních charakteristik membrán při izolaci halogenovaných uhlovodíků ze zředěných vodných roztoků. U membrán na základě polyimidů budou studovány jejich separační vlastnosti pro plyny a páry organických rozpouštědel.

Dalším cílem je příprava katalyzátorů na bázi kovových oxidů, které budou využitelné pro likvidaci plyných polutantů (těkavých organických látek a oxidu dusného). Jako prekurzory pro přípravu takových katalyzátorů budou použity sloučeniny typu hydrotalcitu. Výstupem by mělo být poloprovodní odzkoušení výroby katalyzátorů a otestování připravených katalyzátorů v podmínkách blízkých reálnému procesu likvidace uvedených polutantů.

Dále bude studováno i využití kamence hlinito-amonného vznikajícího při likvidaci těžby uranu ve Stráži pod Ralskem pro přípravu sorbentů využitelných při odstraňování arsenu z odpadních a důlních vod. Očekávaným výstupem je návrh technologického postupu likvidace As z důlních vod na Kaňku. V souvislosti s tímto úkolem budou provedeny zkoušky přidavků použitého sorbentu v kompozitech speciálního složení s cílem fixace As.

Vitrifikace nebezpečných odpadů 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, především zdokonalení termodynamického modelu krystalizace spinelu, umožňujícího ze složení výchozí taveniny předpovídat složení, koncentraci a velikost krystalů spinelu v závislosti na teplotě. Výstupem budou dílčí matematické modely, které budou dále využity i při tvorbě komplexního modelu tavicího procesu anorganických skel.

Monitorování životního prostředí: Moderní metody charakterizace materiálů budou využity při pokračování dlouhodobého sledování vývoje morfologické kvality stomatálních vosků smrku ztepilého na šesti vybraných lokalitách České republiky.

Ochrana kulturních památek: Cílem výzkumu v této oblasti je zkoumání zákonitostí dějů podílejících se na korozi materiálů památkových objektů, objektivizace empirických zkušeností z praxe restaurátorů a konzervátorů a vývoj nových metod a postupů s využitím především čištění a zpevňování těchto materiálů s využitím speciálních i průmyslově dostupných prostředků a technologií.

Bude pokračovat výzkum možností modifikace organokřemičitých konsolidantů sledováním vlivu anorganických solí na jejich účinnost, vlivu zpracování na vlastnosti vápenné kaše a možnosti jejich modifikace a vlivu polymerních konsolidantů na vlastnosti dřeva.

Bude pokračovat studium degradačních procesů historických kovových materiálů umožňující nalézt nejenom jejich vhodné modifikace, ale rovněž technologie pro šetrné odstranění korozních produktů a účinné postupy jejich konzervace, při respektování požadavku na maximální zachování původní hmoty památek. Výzkum preparačních technik, umožňujících aplikaci moderních metalografických metod při identifikaci historických kovových materiálů umožní dokonaleji stanovit původně použité způsoby uměleckého a řemeslného zpracování kovů. Výstupem pak jsou návrhy optimálních technik restaurování, konzervace a konsolidace kovových památkových objektů či sbírkových předmětů.

Nově bude započat vývoj metodiky ke stanovení obsahu organického podílu v modifikovaných vápenných barvách, výzkum interakce opuky se stavebními pojivky, výzkum degradace a možností preventivní konzervace sbírkových objektů vyrobených z plastů a pryže a výzkum možnosti použití enzymů při čištění kamene, závěsných obrazů apod.

VZ MSM 223200003 – Studium chemicko-technologických procesů pro ochranu životního prostředí a zpracování paliv

Analýza a hodnocení rop

Pozornost bude zaměřena na možnosti detailní analýzy výsevroucích podílů ropy s ohledem na obsah a charakter parafinických látek a asfaltenů, látek způsobujících problémy při dopravě ropy a ovlivňujících tvorbu a charakter ropných úsad, vznikajících při dopravě a skladování ropy.

Reologické vlastnosti rop z hlediska čerpatelnosti

Budou pokračovat práce zaměřené na studium problémů spojených s dopravou rop. Pozornost bude zaměřena na

hodnocení nízkoteplotních tokových vlastností rop a jejich směsí a faktory, které tyto vlastnosti ovlivňují.

Diagnostika kvality motorových olejů při prodloužených výměnných intervalech

Bude se pokračovat s odběrem vzorků opotřebovaných motorových olejů z automobilů s prodlouženými servisními prohlídkami tak, aby byly získány reprezentativní údaje o kvalitě a použitelnosti motorových olejů se specifikacemi VW 503.00/506.00 pro prodloužené výměnné lhůty. U těchto olejů bude po době jejich použitelnosti určené výrobcem motorů (30 tis. či 50 tis km pro benzinové či dieselové motory) stanovena většina parametrů motorových olejů, které mají vztah k jejich užitém hodnotám. Výsledky budou porovnány s parametry čerstvých motorových olejů a bude posouzena velikost změny ve vlastnostech opotřebovaných olejů.

Příprava nových syntetických ekologických maziv a hodnocení jejich vlastností

Trialkylcitráty představují podle dosavadního výzkumu nová potenciální ekologická maziva s velmi nízkou ekotoxicitou a velmi dobrou biologickou odbouratelností. Budou ověřeny užité vlastnosti nového syntetického ekologického maziva (tri (2-ethylhexyl) citrátu) v reálných podmínkách zemědělské výroby a bude provedeno vyhodnocení jeho chování při dlouhodobém nasazení.

Fyzikálně-chemické vlastnosti zemních plynů a zkvalitněných uhlovodíkových plynů

Měření parametrů a ověřování výpočetních vztahů využívaných při studiu chování reálných plynů prostřednictvím modelových směsí plynů. Modelování havarijních situací při rozvodu zemního plynu. Optimalizace metod sušení zemního plynu. Odorizace zemního plynu bezsirnými látkami. Studium koroze pod napětím kovových materiálů používaných v plynárenství.

Nové selektivní adsorbenty pro technologické a analytické aplikace

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

Optimalizace zplyňování a pyrolýza biomasy a odpadních plastů

Úprava složení a čištění plynů získávaných z různých technologických procesů. Zvyšování účinnosti odsíření spalin aditivací vypírácích kapalin a koncentrace penetrantů v odpadních plynech. Aditivace pevných paliv za účelem snížení tvorby nežádoucích látek a nežádoucích polutantů při jejich spalování. Analýza VOC v ovzduší.

Eliminace pění v aerobních i anaerobních čistírenských procesech

Na základě výsledků studia příčin vzniku pěn v zařízeních pro biologické čištění odpadních vod a zpracování kalů bude aktivita zaměřena na provozní ověření postupů vedoucích k eliminaci pěn nebo potlačení intenzity pění a stability pěn.

Provozní aplikace úprav technologie směřujících k intenzifikaci procesu anaerobní stabilizace čistírenských kalů

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

Optimalizace postupů odstraňování těžkých kovů z vod srážecími postupy

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

Zavádění moderních instrumentálních metod pro analýzu vod

Jde o metody pro analýzu vod, analýzu organických látek ve vodách (aplikovatelnost i pro ovzduší, tuhé odpady, poživatiny a potraviny) pomocí GC-MS a HPLC, aplikace extrakce tekutinou v nadkritickém stavu a aplikace mikroextrakce tuhrou fází.

Aplikace mikroskopických metod ve vodárenství

Pozornost bude věnována zejména posuzování účinnosti procesu filtrace a dále kontrole jakosti vody v distribučních sítích. Výsledky budou podklady pro vypracování nové oborových norem.

Koroze a protikorozi ochrana kovů

- studium geneze a morfologie oxidických vrstev
- aplikace elektrochemického šumu pro studium korozních dějů
- použití plazmově nanášených vrstev (PVD) v ochraně materiálů proti korozi
- výzkum vlastností ocelí pro lopatky parních turbin
- rozvoj metodik k určování náchylnosti materiálů ke koroznímu praskání a jejich aplikace
- studium korozních dějů pomocí akustické emise
- studium povrchů kovů pomocí Mössbauerovy spektroskopie a ESCA
- využití metod molekulové spektrometrie, především Ramanovy mikroskopie při studiu korozních procesů, distribuční analýza oxidických vrstev

Selektivní sorbenty a postupy v úpravě vody

- studium sorpce oxoaniontů na kompozitních biosorbentech a polymerních sorbentech s polyetylenovým skeletem
- využití neionogenních sorbentů v ochraně životního prostředí
- studium sorpčních procesů při úpravě vody, korelace struktury materiálů s jejich sorpčními schopnostmi

Spalovací a zplyňovací procesy

- zplyňování biomasy
- chemické vázání vody do kapalných paliv

Stabilizace/solidifikace odpadů

Výzkum bude zaměřen na využití různých typů pojiv a aditiv pro solidifikaci nebezpečných odpadů a na sledování

vyluhovatelnosti solidifikátů v závislosti na charakteru kontaminantů.

Fytoremediace

Výzkum bude zaměřen na sledování schopnosti některých rostlin akumulovat těžké kovy bez zásadního vlivu na jejich růst a vývoj s cílem využití fytoremediace jako remediační technologie k odstranění těžkých kovů z kontaminovaných půd.

Korigovaný head-space

Ověření návratnosti pro korigované modely analýz head-space pomocí referenčních analytických metod.

Modelování distribuce kontaminantů při atmogeochemických měřeních

Ověření a zpřesnění modelů a vztahů platných pro distribuci těkavých organických kontaminantů v reálných a pseudoreálných zeminách, následované jejich rozšířením pro odhady a kvantifikaci atmogeochemických měření na reálných kontaminovaných lokalitách.

Laboratorní ventovací zkoušky

Zobecnění modelů ověřených na atmogeochemických měřeních VOC v zeminách a jejich zahrnutí do výpočtů a měření prováděných na reálných vzorcích v rámci laboratorních ventovacích zkoušek.

Elektrokinetická dekontaminace

Ve spolupráci s TU v Lyngby (Dánsko) bude pokračovat výzkum zaměřený na aplikace dané metody při čištění netypických tuhých kontaminovaných materiálů.

Promývání kontaminovaných zemín

Technika promývání bude studována v kombinaci s jinými sanačními postupy, zejména s biodegradací a biosorpcí.

Zavedení terestriálních systémů hodnocení ekotoxicity pevných vzorků

Kontaktní tzv. direct testy budou použity pro hodnocení toxických vlastností kontaminovaných zemín, pevných odpadů a pro hodnocení účinnosti dekontaminačních procesů.

Toxicita POP určovaná pomocí SPMD

SPMD jako jedna z hlavních metodik vzorkování POP v životním prostředí používáná na FTOP bude využita pro stanovení toxických účinků látek v životním prostředí a to především v recipientech odpadních vod po procesu čištění, podzemních vod, povrchových vod i vodních zdrojů.

Testování toxicity na vyšších rostlinách

Budou studovány možnosti aplikace vyšších rostlin (jednoděložných i dvouděložných) pro hodnocení toxických a mutagenních účinků pevných odpadů a kontaminovaných zemín. Bude navržena ucelená metodika testování ekotoxicity půd.

VZ MSM 223300004 – Zlepšování kvality potravin a zajištění optimální výživy obyvatelstva

Cíle řešení výzkumného záměru v roce 2004 a předpokládané výsledky jsou uspořádány podle oblastí řešených v letech 1999-2002. Předpokládá se, že výsledkem řešení bude získání nových poznatků vedoucích ke zlepšení kvality potravin a výživy člověka obecně. Realizace bude zejména formou publikací, přednášek a informováním odborné i laické veřejnosti.

Výživová a senzorká jakost potravin

Výzkum Maillardovy reakce bude pokračovat izolací a identifikací významných melanoidinů z modelový roztoků imulujících potraviny a studiem jejich antioxidačních vlastností.

Pokračovat budou práce zabývající se rozkladem významných sacharidů, identifikací produktů rozkladu (oxidačních a dalších produktů, včetně vývoje vhodných metod) s cílem objasnění hlavních mechanismů vzniku těchto látek.

Ve studiích oxidačních a hydrolytických reakcí lipidů budou sledovány další antioxidanty a voleny další podmínky oxidace. Pozornost bude také věnována monitoringu příjmu degradačních produktů lipidů u vybrané skupiny populace a stanovení rostlinných sterolů a jejich degradačních produktů. Sledován bude vliv emulgátorů, lipofilních a hydrofilních antioxidantů na omezení rozsahu autooxidace lipidů margarínové emulze při konstantním složení tukové náklady a typu balení.

Pokračovat bude výběr konzervačních systémů vhodných v potravinářství na bázi kombinace monoacylglycerolů a acylsacharidů vůči gramnegativním bakteriím a vůči plísním.

Speciálně minerálních látek bude pokračovat aplikací stávající metodiky na cereální materiály a identifikací ligandů esenciálních prvků v luštěninách a cereáliích.

Budou studovány senzorky významné chuťové látky, zvláště hořké, sladké a kyselé. Výzkum bude soustředěn především na sledování organoleptických vlastností vybraných látek a jejich vzájemné ovlivňování. U sladké chuti se pozornost zaměří na nové náhradní sladidlo Neotem (NTM), sladší než Aspartam. Bude sledována možnost jeho použití a jeho případný synergismus a antagonismus ve vztahu k ostatním látkám. U hořké chuti bude pozornost věnována sloučenině 6-propyl-2-thiouracil (PROP), jejíž vnímání se u populace výrazně liší.

Pokračovat bude studium *S*-derivátů cysteinu v rostlinných materiálech, identifikace a stanovení jejich rozkladných produktů a mechanismů jejich vzniku.

Výzkum orientovaný na následné reakce glukosinolátů a jejich rozkladných produktů bude pokračovat studiem barevných produktů allylisothiokyanátu s aminokyselinami s cílem určení jejich struktury.

Syntetizovány budou analogy resveratrolu a pokračovat se bude v testování vlastností a účinků resveratrolu a jeho analogů na mikrobiální buňky (antioxidační a antimikrobiální účinky), sledovat se budou změny metabolismu kvasinek a možné protektivní účinky.

Stávající metodika sledování antioxidačních účinků rostlinných fenolů se bude modifikovat s cílem nahrazení levnějším postupem. Pokračovat se bude ve studiu vlivu zpracování na antioxidační vlastnosti potravin, zhodnocení souvislosti

antioxidační aktivity s redox potenciálem, údržností, rychlostí oxidačních změn.

Technologická jakost potravin

Posuzovat se budou možnosti prodloužení údržnosti masa a masných výrobků, pokračovat bude vývoj objektivních metod hodnocení masa a masných výrobků.

Vyvinuté ELISA postupy ke stanovení mléčných proteinů budou využity ke zjišťování změn těchto bílkovin po tepelném nebo proteolytickém zásahu na reálné vzorky a dále k testování a rozlišování různých druhů mléka a mléčných výrobků.

V rámci studia mikroorganismů mléčných výrobků se využije impedanční metoda pro sledování účinku antibakteriálních látek, např. bakteriocinů produkovaných mléčnými bakteriemi (samotných a v kombinaci s lysozymem).

Odkouší se antibakteriální účinnost nisinu u produkčních transkonjugovaných kmenů *Lactococcus lactis* v modelově připraveném termizovaném tvarohovém dezertu. Sledovat se bude využití organických kyselin a jejich solí k potlačení nežádoucího růstu laktobacilů v majonézových a dalších lahůdkářských výrobcích. Izolovány budou laktokoky a laktobacily s technologicky zajímavými metabolickými vlastnostmi z různých zdrojů (včetně identifikace).

U mléčných výrobků se budou sledovat reologické vlastnosti gelů vybraných druhů hydrokoloidů v závislosti na obsahu a typu mléčných bílkovin získaných ultrafiltrací, při zachování složení mléčného séra. Současně budou charakterizovány typy interakcí bílkovin s hydrokoloidy.

Budou ověřeny možnosti použití KJO₃ pro zlepšování kvality a obohacování výrobků jemného pečiva s vysokým obsahem tuku a cukru.

Pokračovat bude identifikace náhrad kakaového másla. Výzkum bude spočívat ve sběru většího souboru dat a rozšíření metod o nukleární magnetickou resonanci. Výsledky budou vyhodnoceny chemometricky.

Bude pokračovat identifikace polysacharidů a jejich derivátů v cereálních a dalších potravinách pomocí kapalinové chromatografie a infračervené spektroskopie. Výsledky budou vyhodnoceny chemometricky a budou složité ke kontrole jakosti doplňků stravy, které jsou polysacharidy cíleně obohacovány nebo kde jsou součástí deklarovaného složení výrobku nebo nahrazují tradiční suroviny.

Bude pokračovat vývoj technik, zejména s využitím elektromigračních postupů (stanovení lysozymu, optimalizace technik stanovení markerů pro posuzování autenticity výrobků z ovoce a zeleniny a masných výrobků). Pokračovat bude udržování a rozšiřování databází k posuzování autenticity potravin. Budou studovány faktory ovlivňující tvorbu zákalů v nápojích. Pokračovat se bude ve studiu vlivu metod minimálního zpracování na vlastnosti ovoce a zeleniny.

Studovat se budou antioxidační účinky chmelových a sladových polyfenolů, skladba polyfenolů piva a vína a jejich vliv na jeho senzorkou a koloidní stabilitu (aplikace rozdílných metodik hodnocení antioxidačních vlastností chmele, chmelových výrobků, porovnání výsledků získaných metodami s odlišným principem hodnocení a nalezení vztahu technologických zásahů k aktuálnímu antioxidačnímu stavu, podrobné sledování polyfenolových látek piva a složek vína ve vztahu k jeho stabilitě, nové metodiky stanovení a charakterizace těchto látek v pivu na základě jejich elektrochemických vlastností).

Práce zaměřené na stanovení anorganických kontaminantů se budou zabývat stanovením Cu, Pb, Cd a vybraných anorganických aniontů metodou průtokové coulometrie. Pozornost bude věnována zejména bilanci a osudu těžkých kovů během pivovarského a obecně technologického procesu v nápojovém průmyslu. U aniontů bude hlavní pozornost věnována elektrochemickému stanovení jodidů.

Hygienicko-toxikologická jakost potravin

Pokračování výzkumu antinutričních látek se bude zabývat sledováním změn α -galaktosidů během klíčení luštěnin (cizrny, čočky, případně některých dalších).

Bude sledován obsah fytoestrogenů v produktech obsahujících sóju; hodnocen bude vliv podmínek při výrobě masných výrobků s přidavkem sojových izolátů či koncentrátů na hladiny ve finálním produktu. Získaná data poslouží k odhadu dietárního příjmu těchto biologicky aktivních sloučenin. Zavádět se bude stanovení isoflavonů a kumestrolu v rostlinném materiálu a potravinách pomocí RIA a ELISA metod a pomocí kapilární elektroforezy. Zvláštní pozornost bude věnována převedení stávajících metod v RIA formátu na metody ELISA, které nevyžadují zacházení s radioaktivně značenými látkami. Součástí bude i příprava příslušných hapténů pro tvorbu polyklonálních antisér.

Na základě vyšetření produktů konvenčního a organického zemědělství bude hodnocen vliv produkčních systémů na hygienicko-toxikologickou jakost. Pozornost se zaměří na přírodní toxiny vybraných druhů zelenin. Posuzovány budou produkty z polních experimentů i výrobky z tržní sítě.

Bude uzavřeno hodnocení vlivu agrotechnických technik (předplodiny, aplikované fungicidní přípravky) na hladiny fusariových mykotoxinů v cereáliích s cílem formulovat doporučení pro zemědělskou praxi, která budou využita při ochraně potravního řetězce. Ve spolupráci s průmyslovým partnerem budou realizovány technologické experimenty s cílem charakterizovat osud alternariových mykotoxinů při zpracování rajčat napadených plísními rodu *Alternarium*.

Expozice populace polybromovaným difenyletherům (PBDE) a příbuzným sloučeninám- novým v ČR dosud nesledovaným kontaminantům-bude provedena na základě vyšetření vzorků mateřského mléka (bioindikátor).

Pozornost se zaměří sledování hladin karcinogenního akrylamidu při tepelném zpracování potravin. Posuzován bude jak vztah mezi obsahem prekurzorů v používaných surovinách a hladinami této škodliviny parametru tak i vliv parametrů technologických operací používaných při jejich zpracování.

Výzkum aditivních látek se bude zabývat vývojem potravinářských obalů s antimikrobiální funkcí, budou pokračovat podpůrné aktivity mimo rozsah plánu uvedeného projektu (alternativní metody imobilizace, ověření dalších antimikrobiálních látek atd.).

Studium endogenních kontaminantů bude pokračovat analýzou 4-methylimidazolu a 2-acetyl-4-(1,2,3,4-tetra-*O*-hydroxy-butyl)imidazolu kapilární elektroforézou s využitím předseparačních technik vyvinutých dříve, včetně mapování ostatních bázeických složek kulůru s cílem identifikovat přídavky kulůrů různých tříd do potravin.

Bude dále optimalizován postup stanovení patulinu, bude provedena analýza obsahu v surovinách, polotovarech a výrobcích v různých fázích výroby polotovarů pro kojeneckou výživu a kojenecké výživy. Bude provedena bilance predikce změn jeho obsahu.

Budou pokračovat výzkumné aktivity zaměřené zejména na podporu uplatňování Zákona č. 258/2001 Sb. (zavádění HACCP v podnicích stravovacích služeb), budou provedeny studie pro analýzu rizik při výrobě pokrmů a lahůdek.

Potravinářská analytika

V rámci hodnocení výživové, senzorické a technologické jakosti se bude pokračovat v aplikacích metod obrazové analýzy v analýze potravinářských materiálů (zejména barevné změny a strukturní charakteristiky) a rozvoji internetových obrazových databází zabývajících se kvalitou potravin a potravinářských materiálů. Pokračovat budou hodnocení senzorické a výživové hodnoty luštěninových pokrmů a příjmu mastných kyselin z vybraných potravin, např. pečiva.

Pozornost se zaměří na vývoj a validaci analytických postupů významné skupiny potravinových kontaminantů s využitím nových netradičních instrumentálních technik jako je dvourozměrná orthogonální plynová chromatografie (GCxGC) pro separaci komplexních směsí a hmotnostní spektrometrie s analyzátozem typu time-of-flight (MS-TOF) pro identifikaci/kvantifikaci analytů.

Kromě dříve studovaných migrantů bude pozornost věnována migrantům z epoxidových laků a budou sledovány faktory, které migraci ovlivňují. Metody i studium migrace bude zaměřeno na potravinové simulanty, standardně používané k hodnocení obalových materiálů.

Plánuje se standardizace detekcí hlavních pathogenních mikroorganismů v systému Real-on Time PCR (kvantitativní analýza). Kromě tohoto hlavního úkolu se výzkum soustředí na detekci determinant rezistence k antibiotikům v populacích *Salmonella* spp. Metody detekce budou založeny jak na fenotypovém, tak na genotypovém principu.

Detekce a kvantitativní hodnocení GM plodin pomocí Real-on Time PCR bude hlavním úkolem. Kromě kukuřice a sóji budou testovány GM pšenice, brambory a řepka.

Ve vegetační sezoně 2004 budou testovány další patogeny brambor, houbového i nehoubového charakteru, s cílem pokusit se vytypovat morfologické charakteristiky vedoucí ke zvýšení odolnosti rostlin ve skleníkových, případně i polních podmínkách.

VZ MSM 223300005 – Uplatnění progresivních inženýrských procesů v potravinářských technologiích s cílem vyššího zhodnocení surovin a odpadů

Cíle řešení na rok 2004 jsou uvedeny opět v pěti tematických okruzích, jež plynule navazují na předcházející kroky řešení výzkumného záměru.

Tematický okruh 1 - Separační procesy

Ve výzkumu aplikací membránových procesů v biotechnologiích bude navržena a ověřena strategie membránových separací při zpracování odpadních produktů (lihovarských obilných výpalků) s využitím zejména mikro-, ultra- a nano-filtrace a elektrodialýzy. Budou testovány a ověřeny vhodné markery popisující a charakterizující separační kroky včetně vytvoření matematického modelu.

Aplikace membránových separačních procesů bude dále rozšířena do oblasti škrobářství při rafinaci škrobových sirupů, úpravách škrobových hydrolyzátů nanofiltrací s cílem

identifikovat vhodné membrány a ověřit jejich vliv na efekt odsolovací a zahušťovací.

Vyvinutá stanice na kontinuální preparativní chromatografická separace SMB (Simulated moving bed) bude využita pro další separace směsí sacharidů, solí, cukerných alkoholů a betainu s cílem zvýšit výtěžnost procesu (např. oddělení sacharosy od solí nebo sorbitolu od monosacharidů) a izolovat cenné látky z odpadů (např. betain z melasy) a z dalších přírodních extraktů. Pro další zlepšení separace bude navržena a zkonstruována úprava stanice, jež variantně umožní pracovat s recyklem.

V oblasti adsorpčních procesů bude dále pokračovat vývoj metod na odstraňování plynných polutantů z kondenzátů brydových par vzniklých při chmelovaru a dále budou rozvíjeny metody přirozeného mechanismu odstraňování těžkých kovů pomocí přírodních materiálů v pivovarsko-sladařském průmyslu.

Tématický okruh 2 - Tepelné procesy a vysoký tlak

Mikrovlnný ohřev při hydrotermické úpravě potravin.

Vakuové mikrovlnné sušení nabízí alternativní cestu rychlého a šetrného sušení při zachování původního složení produktu, jeho barvy a textury. Cílem této rozšiřující etapy bude porovnat mikrovlnné sušení naklíčených semen luštěnin za normálního tlaku a za sníženého tlaku s horkovzdušným sušením, včetně chemického a senzorického hodnocení pokrmů připravených z naklíčených usušených semen. Dále bude hodnocen vliv fyzikálního ošetření uvedených rostlinných surovin na obsah, zastoupení a případnou degradaci proteinů.

Vysoký tlak při ošetření potravin.

Při studiu vlivu vysokého isostatického tlaku na aktivitu a stabilitu enzymů bude pozornost zaměřena vedle sledování vlivu přidávaných stabilizátorů na možnost zvýšení stability a enzymové aktivity „vysokotlakým refoldingem“ - chemickou modifikací tlakově ošetřených enzymů. Dále bude studován vliv aplikace vysokého isostatického tlaku na vlastnosti potravin, zejména enzymovou aktivitu. V kombinaci s balením potravin bude studován vliv teploty a složení atmosféry na skladované rostlinné produkty.

Tepelné procesy v potravinářství.

Budou řešeny dílčí studie zaměřené na optimalizaci tepelných procesů, na predikci vlivu zpracování na vlastnosti potraviny zejména s ohledem na udržování systému kritických bodů ve výrobě potravin a gastronomii. Na podporu zavádění systému kritických bodů ve stravovacích službách bude pokračovat sběr a vyhodnocení teplotní historie v reálných podmínkách přípravy pokrmů s cílem shromáždit podklady pro analýzu rizik a pro přípravu novely legislativního předpisu (vyhl. 107/2001 Sb.).

V dalším výzkumu extruzních technologií bude provedeno srovnání vlivu různých živočišných i rostlinných proteinů na aroma extrudátů pšeničné krupice s glukosou.

Tématický okruh 3 - Řízení procesů

V oblasti modelování a simulace procesů budou vybrané pivovarské procesy matematicky popsány a budou vytvořeny jejich počítačové modely a ověřeny na praktických datech z provozu. Tímto bude vytvořen teoretický základ pro vyšší stupeň řízení pivovarských procesů. Na základě znalostního

modelu bude provedena optimalizace a ověřena možnost řízení aerobních kultivací s termofilními mikroorganismy využívaných pro biodegradaci lihovarských obilných výpalků. Bude rozšířen model procesu elektrodiálýzy na aplikace odsolování odpadů - lihovarských obilných výpalků apod. Další rozšíření úkolu Senzorická a koloidní stabilita piva bude orientováno na řízení a optimalizaci podmínek kvašení, výběru kmene kvasinek a technologického postupu. Pozornost bude soustředěna na látky ovlivňující organoleptický charakter, senzorickou stabilitu a pěnivost piva. Studium řízení a optimalizace propagace kvasnic v pivovarství bude rozšířeno o optimalizaci procesu vzdušnění a živení, jež bude vyhodnocena pomocí matematické modelování bioproduktu.

Bude dále doplňována databáze fyzikálně chemických vlastností potravin Nelfood, se zaměřením na vlastnosti sacharidů. Bude připraven materiál pro nové vydání Tabulek vlastností (1.vydání v roce 1995, Bartens, Berlin). Data budou zpracována též ve formě podprogramů pro využití v řídicích a regulačních programech. Jedním z hlavních výstupů v této oblasti bude program pro výpočet vlastností sacharidů, jejich roztoků a dalších látek.

Pomocí vyvinutého systému počítačového řízení filmové odparky ARMFIELD budou studovány různé režimy odpařování technických rostlinných extraktů s ohledem na změnu jejich složení při odpařování (např. surová řepná šťáva, extrakt inulinu z čekanky a pod.). Bude prováděna kompletní hmotnostní a enthalpická bilance zkoumaných odpařovacích procesů s cílem získat podklady pro možný návrh průmyslového zařízení.

Pomocí vyvinuté metody využívající nízkovýkonný ultrazvuk dále bude zkoumán vliv různých podmínek na šířku metastabilní oblasti rychlosti míchání (teplota, rychlost míchání atd.). Experimenty budou orientovány na měření koncentrace a metastabilní oblasti různých druhů technických cukerných roztoků i dalších roztoků sacharidů (např. inulin).

Tématický okruh 4 - Metody na kontrolu technologické jakosti

Vzhledem k rozsáhlosti tématu, budou uvedeny jen hlavní nosné směry výzkumu.

Počítačová analýza obrazu – Image analysis.

Metoda analýzy obrazu bude ověřována při charakterizaci vinařských kultur, při rychlé detekci mikrobiální kontaminace a zastoupení jednotlivých kmenů ve směsných kulturách a dále i jako možnost třídění buněk (buněčný třídící - sorter).

Dále bude pokračovat aplikace metody analýzy obrazu na hodnocení křehkosti a lámavosti krystalů s ohledem na podmínky v reálném průmyslovém procesu.

V analytice určené pro kontrolu masného průmyslu bude pokračováno ve zpřesňování této metody, budou hledány optimální parametry snímkování. Bude věnována pozornost i na rozšíření metody na složitější objekty. Metoda bude využita ke sledování barevných změn trvanlivých salámů během skladování – k odlišení barevně změněných ploch.

Další kontrolní metody pro potravinářské technologie.

Metoda NIR spektroskopie bude dále zkoumána v oblasti cereální technologie jako možnost predikce jakostních znaků fermentovaného pšeničného těsta analýzou NIR spekter mouky.

Budou zkoumány mechanické a fyzikálně-chemické vlastnosti cukrovinkářských hmot vzhledem k jejich skladovacím vlastnostem. Hlavními metodami bude kapalinová

chromatografie, polarizační mikroskopie a rentgenová difrakce. Výsledky budou určeny především pro výrobu cukrovinek při sledování technologické a senzorické jakosti výrobků.

Budou sledovány reologické charakteristiky fermentovaného těsta a posuzován vliv podmínek měření a jednotlivých recepturních složek.

Metoda aniontové chromatografie v alkalickém prostředí s pulzní amperometrickou detekcí (HPAEC – PAD) bude testována pro navrzení metodiky při kontrole falšování potravin (med, masné výrobky, ovocné šťávy apod.) a dále pro porovnání sacharidických profilů dalších potravinářských komodit, např. ovocných šťáv, džusů, kečupů apod., a dále porovnání sacharidických profilů DIA výrobků slazených umělými sladidly.

Budou ověřovány metody stanovení lysozymu ve výrobcích (těstoviny, majonézy, ...) s cílem detekce obsahu vajec použitých pro výrobu těstovin, případně dalších výrobků. Dále bude sledován obsah organických kyselin (mléčná, jantarová, beta-hydroxymáslečná) v čerstvých vejcích po dobu jejich skladování nově vyvinutou metodou kapilární isotachoforesy.

V návaznosti na problematiku analýzy rizik a zlepšování preventivních postupů ve výrobě potravin bude stávající optimalizace použití čidel pokračovat studiem vlastností vybraných time-temperature indikátorů.

HACCP (kritické body)

Ve vybraných podnicích masného průmyslu bude konzultováno vyhodnocování veličin v kontrolních bodech. Zvláštní pozornost bude zaměřena na objektivizaci hodnocení pasteračního účinku při tepelném opracování masných výrobků a predikci aktivity vody při výrobě trvanlivých salámů.

Tématický okruh 5 - Vyšší zhodnocení odpadů a meziproduktů potravinářských technologií a využití surovin potravinářského průmyslu pro nepotravinářské aplikace

Vyšší zhodnocení odpadů potravinářských technologií.

V návaznosti na membránové separace lihovarských výpalků budou upřesněny kvalitativní znaky jednotlivých frakcí a možnost jejich využití pro krmné účely, příp. pro recyklaci v lihovaru.

Využití bílkovin syrovátky.

Rozšíření možností využití bílkovin syrovátky spočívá v jejich modifikaci, např. enzymovou hydrolýzou, nebo frakcionací jednotlivých složek. Tímto směrem bude zaměřen další výzkum s cílem využít jedinečných funkčních vlastností modifikovaných nebo separovaných bílkovin. Budou pokračovat práce na separaci kaseinomakropeptidu. Práce bude rozšířena na získání frakcí α -laktalbuminu a β -laktoglobulinu, které budou dále využity pro studium interakcí s kaseinem při tvorbě gelu. K separacím bude využita membránová jednotka.

Využití nadbytečné produkce řepkového oleje.

Pokračování vývoje strukturních tuků se základním nositelem kyseliny stearové bude plně ztužený řepkový olej a následně řepkový olej jako hlavní složka tukové násady. Dále bude pokračovat studium vlastností ternárních (a vyšších) směsí modelových směsí definovaných strukturovaných triacylglycerolů v tukových násadách z hledisek struktury a textury.

V nepotravinářské využití řepkového oleje bude pokračovat a dokončen výzkum využití odpadních řepkových olejů

s vysokým obsahem volných mastných kyselin (odpady z výroby bionafty; silně kyselé řepkové oleje; mastné kyseliny z rafinace oleje aj.) cestou kyselé katalyzované interesterifikace a esterifikace v jednom reakčním stupni. Bude ověřováno využití řepkového oleje a oxidačně stabilizovaného řepkového oleje parciální katalytickou hydrogenací pro přípravu monoethanolamidů řepkových mastných kyselin a jejich uplatnění v detergentech.

Biodegradabilní a aktivní obaly.

Budou dále testovány různé možnosti využití odpadů z potravinářských technologií jako druhotných surovin při přípravě hydrofobizovaných biologicky odbouratelných obalů a aktivních obalů. Výzkum navazuje na předchozí práce a bude zaměřen na uplatnění monoglyceridů mastných kyselin včetně jejich přípravy, ať již pomocí klasických anorganických katalyzátorů, nebo pomocí biokatalýzy.

Vývoj derivátů pektinů a komplexu chitinu s dalšími polysacharidy.

Budou připraveny hydrofobní deriváty řepného pektinu - alkylamidy a alkylestery. Deriváty budou charakterizovány pomocí organické analýzy, vibrační spektroskopii a NMR spektroskopii. Modifikací řepného pektinů lze značně rozšířit použití tohoto vedlejšího produktu cukrovarnického průmyslu, např. pro stabilizace emulzí, vázání žlučových kyselin nebo čištění odpadních vod.

Budou vypracovány izolační postupy a charakterizace chitínových komplexů s dalšími polysacharidy z různých biologických zdrojů. Účelem je nalezení nových zdrojů chitinu, který je surovinou pro výrobu chitosanu, jenž se používá jako účinná látka ve funkčních potravinách.

VZ MSM 223300006 – Biochemické, mikrobiologické a molekulárně genetické studie vytvářející teoretický základ pro moderní biotechnologie

Studium struktury a funkce biomolekul

Vliv sacharidové části glykoproteinů na funkci glykoproteinu

V roce 2004 chceme pokračovat ve studiu vlivu sacharidové složky na konformaci peptidové části glykoproteinů nově zavedenými metodikami založenými na hmotnostní spektrometrii na principu MALDI-TOF. Tyto postupy by měly umožnit odhalit i relativně malé změny přístupnosti jednotlivých, přímo detegovatelných aminokyselinových zbytků.

Studium glykosylace a transglykosylace

Na základě studií prováděných v minulých letech budou testovány možnosti imobilizace β -galaktosidasy z psychrotrofního kmene *Arthrobacter* sp. C2-2 a využití takto imobilizovaného biokatalyzátoru pro transglykosylace. Jako akceptory galaktosy budou testovány jak látky cukerné povahy, tak i látky necukerné povahy. Jako látky necukerné povahy budou testovány analoga nukleotidů, u nichž existuje předpoklad biologické aktivity. Glykosylací těchto látek by mohlo být dosaženo jejich lepší rozpustnosti, stability a také by mohl být usnadněn jejich transport v organismu. Transglykosylace s necukernými akceptory budou testovány také na neimobilizovaném enzymu a výsledky budou porovnány.

Posttranslační fosforylace proteinů a peptidů

Budeme se věnovat studiu změn fosforylace proteinů lidských tkání s malým metabolickým obratem (kolagenní proteiny chrupavky a kosti, zubní dentin) s předpokladem potenciálního využití těchto změn jako markru stárnutí organismu. Tyto změny budou porovnány s jinými posttranslačními modifikacemi (racemizací L forem kyseliny asparagové a glutamové, glykosylace a glykace těchto tkání).

Enzymoimunoanalýza

Příprava polyklonálních protilátek proti karbamátovým pesticidům (carbofuran, carbaryl, methiocarb) a proti organochlorovaným pesticidům (endosulfan, DDT) a jejich charakterisace. Získané protilátky budou využity pro vývoj analytických postupů ELISA a piezoelektrického biosenzoru. Vyvinuté metody budou ověřovány analýzou reálných vzorků známého složení.

Pomocí dodaných protilátek budou vyvinuty ELISA postupy pro stanovení isoflavonoidů (daidzein, genistein, coumestrol), které mohou mít potenciální hormonální účinek. Vyvinuté postupy budou použity ke stanovení obsahu isoflavonoidů v různých hospodářských plodinách.

Vypracovaný postup ELISA k detekci *Listeria monocytogenes* bude ověřován na reálných vzorcích potravin.

Fosfolipasy v rostlinném metabolismu lipidů a fosfolipidů

Studium regulace aktivity fosfolipasy D ze suspenzních tabákových kultur BY-2 se zaměřením na objasnění mechanismu a funkce fosforylace.

Vliv vybraných vnějších faktorů na aktivitu technologicky zajímavých enzymů

Při studiu vlivu vysokého isostatického tlaku na aktivitu a stabilitu enzymů bude sledován vliv přidávaných stabilizátorů a „vysokotlakého refoldingu“ (chemické modifikace tlakově ošetřených enzymů) na možnost zvýšení stability a enzymové aktivity.

Biologicky aktivní deriváty sacharidů a studium interakcí na molekulové úrovni

Při hledání perspektivních biologicky aktivních látek se zaměříme na inhibitory glykosyltransferas odvozených od struktury přirozeného substrátu, glykosyl nukleotidu, a dále na analogy nojirimycinu. Stereoselektivitu studovaných cykloadičních reakcí budeme modifikovat pomocí chirálních enoletherů a katalyzátorů tak, aby byl vyřešen problém separace směsi diastereoisomerů, která je obvykle neschůdná. Přírodní látky (sacharidy, steroidy, terpeny) budou použity jako induktory chiralit a modifikátory lipofilit biologicky a supramolekulárně aktivních látek. Bude řešena simulace vodného prostředí pomocí hybridních QM/MM metod a jako modelové látky budou použity již dříve studované deriváty tetrosidů.

Využití biologického potenciálu mikroorganismů a rostlin v průmyslových a environmentálních technologiích

Mikrobiální degradace organických polutantů

Budeme pokračovat ve studiu vlastností mikroorganismů degradujících organická xenobiotika, kdy okruh modelových xenobiotik bude vedle PCB rozšířen i na další látky – polyaromatické uhlovodíky, BTEX (benzen toluen, xylén), MTBE (methyl-tert-butylether) s cílem využít tyto mikroorganismy při praktické aplikaci biologické dekontaminace. Pozornost bude věnována změnám v

mikrobiálních populacích během degradačního procesu, bude sledována schopnost kmenů s různou specifitou spolu s již izolovanými druhy přežít v reálném kontaminovaném prostředí a degradovat organická xenobiotika. Bude zkonstruován a využit PCB-degradující kmen obsahující GFP (green fluorescent protein), umožňující detekci mikroorganismu v reálných podmínkách. Budou navrženy sekvence DNA které umožní identifikaci bakterií degradujících PCB. Bude navržen technologický postup používající rostliny a konsortia s bakteriemi pro dekontaminaci půdy znečištěné PCB.

Kolonizace povrchů modelových nosičů populacemi vybraných taxonů prokaryot a nižších eukaryot, schopných odbourat konkrétní xenobiotika, bude studována z hlediska požadavků návrhu přípravy náplní permeačních bariér a reaktorů pro velkoobjemové bio-dekontaminace vody a přípravy náplní biofiltrů pro bio-dekontaminace vzduchu.

Mikrobiální biomasa pro sorpci těžkých kovů

Bude pokračovat výzkum zaměřený na přípravu geneticky modifikované biomasy pro akumulaci těžkých kovů.

Bude testována afinita vazby peptidů ze série navržené novým počítačovým přístupem vycházejícím z modelování ab initio. V případě zjištění uspokojivé vazby a očekávaného poměru peptidu ke kovu bude vyhodnocena selektivita jednotlivých peptidů pro kovy, pro něž byly příslušné sekvence navrženy. Vybrané peptidy budou poté testovány ve směsi kovů aby byla potvrzena selektivní vazba. Nejlepší peptidy budou přeloženy do genetického kódu a exprimovány v bakteriích. Bude testována vazebná kapacita vzniklé biomasy.

Kvasničná biomasa bude kultivována v limitu živin a bude studován jak dopad na skladbu buněčné stěny a tak i na sorpční vlastnosti buněčných stěn pro Ag⁺, Cu²⁺, Cd²⁺, Zn²⁺, Pb²⁺ z roztoku. Pro tytéž pokusy budou použity také Pir-mutanty kvasničných buněk, které mají defekt v buněčné stěně. Budou studovány změny stěny, které budou vyvolány a jejich vliv na sorpční vlastnosti buněčných stěn pro Ag⁺, Cu²⁺, Cd²⁺, Zn²⁺, Pb²⁺ z roztoku

Mikroorganismy v biodegradčních a dekontaminačních procesech

Optimalizace dekontaminačních procesů při čištění odsávaného vzduchu z lakoven v provozních biofiltrech bude mimo jiné zaměřena na studium podmínek využití modifikované odpadní pryže získané z ojetých pneumatik ve vnitřní náplni biofiltrů. Očekává se zlepšení sorpce zejména aromatických uhlovodíků.

Mikroorganismy v potravinářských technologiích

Indukce biosyntézy nisinu u kmenů *Lactococcus lactis* neprodukcujících nisin, např. u kmenů, které během konjugace transpozice ztratily schopnost produkce nisinu.

Indukce biosyntézy acidocinu CH5 u kmene *Lactococcus acidophilus* ztrácejícího schopnost produkce zmíněného bakteriocinu spontánně.

Studium toxicity látek pomocí buněk

Bude pokračovat studium toxicity xenobiotik a látek získaných jejich biodegradací, jakožto pokles intracelulárního ATP/ADP v lidských HeLa buňkách ve tkáňové kultuře.

Genové inženýrství v biotechnologiích

Rozvoj technik genového inženýrství

Bude pokračovat studium biodegradace dráhy v bakteriích rodu *Alcaligenes*, zejména metabolismu polyhydroxyalkanoátů. Produkty genů mocpABCD budou exprimovány v *E. coli* BL21(DE3) ve velkém množství a u všech exprimovaných enzymů budou sledovány produkty reakcí s příslušnými substráty.

Funkční genomika vybraných genomů

Bude pokračovat výzkum v oblasti studia exprese retrovirových proteinů, zejména s cílem charakterizovat inkorporaci nukleových kyselin do kapsid vzniklých in vitro. Bude sledována schopnost tvorby částic mutanty u nichž jsou jednotlivé geny umístěny do stejného čtecího rámce tak, aby byl ovlivněn vzájemný poměr jednotlivých prekursorů.

Bude pokračovat výzkum vlivu myristylace a biologicky relevantních bodových mutací na konformaci a stabilitu strukturních proteinů retrovirů. Bude studována struktura mutantu matrixového proteinu (MA), u nějž bylo dosaženo zvýšení hydrofobicity jádra molekuly a který není schopen opustit hostitelskou buňku. Tento mutant bude myristylován, neboť lze předpokládat, že myristová kyselina bude zachycena uvnitř molekuly MA.

Mikrobiální kmeny pro potravinářské technologie

Budou studovány možnosti aplikace průtokové cytometrie ke sledování projevů stárnutí kvasinek *Saccharomyces cerevisiae* (wt, mutace RAS2val19, RAS2val19,ser33, RAS2ser33), hodnocení buněčného cyklu, obsahu DNA a analýza znaků řízené buněčné smrti. Využití buněčného třídíče (sorteru) a metody elutriační centrifugace pro studium jednotlivých buněčných frakcí (dle stáří buněk a obsahu intracelulárních složek buňky) a následná analýza znaků apoptosy.

Metody PCR budou aplikovány k identifikaci a charakterizování a) průmyslově důležitých mikroorganismů, b) mikroorganismů používaných v environmentálních technologiích (např. termofilní bakterie *Bacillus stearothermophilus*) a c) mikroorganismů ohrožujících zdraví člověka (např. *Legionella* sp).

VZ MSM 223400007 – Reakčně-transportní chemicko-inženýrské systémy a jejich dynamické chování, modelování a řízení chemických a biotechnologických procesů

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

1a) Výzkum bude zaměřen na studium vlivu interakce transportních procesů v porézních strukturách katalyzátoru na dynamiku, nestacionární provozování a možnosti řízení reaktorů. Budou přitom sledovány možnosti efektivního využití vzácných kovů (Pt, Rh) na základě jejich optimálního umístění v porézní struktuře. Matematický popis nelineární dynamiky interakce velké soustavy reakcí a transportních procesů je tvořen rozsáhlou soustavou nelineárních parciálních diferenciálních rovnic a představuje numericky náročný problém. Vývoj software bude tvořit významnou část výzkumné práce. Souběžně bude probíhat experimentální výzkum na nově vyvinutém reaktoru.

1b) Budou prováděny simulace toku kapaliny v míchané nádobě pomocí CFD a simulační výpočty budou porovnány s dosud získanými experimentálními daty. Budou využita data z měření jedno a vícefázových systémů v jednomíchanlovém uspořádání i ve věžovitých nádobách s více míchadly. Budou testovány různé modely turbulentního toku a bude ověřována jejich vhodnost použití při simulacích promíchávaných nádob. Bude provedena simulace rozložení pevné zrnité fáze v promíchávané vsádce. Výsledky budou porovnány s experimenty, které budou využívat vodivostní měření místních koncentrací pevné fáze. Bude zahájena výstavba míchané nádoby průměru 60 cm se třemi míchadly na společné hřídeli. Porovnání experimentálních dat z tohoto zařízení s daty získanými dříve v rámci VZ na nádobách menšího průměru umožní studovat pravidla pro scaling-up míchaných nádob.

1c) Absorpce a destilace mají společný fyzikální základ – mezifázový průstup hmoty mezi plynem a kapalinou charakterizovaný objemovými koeficienty přestupu hmoty v plynné (kGa) a kapalně (kLa) fázi. Dosud provedené výzkumy vedou k závěru, že přenos dat mezi destilací a absorpcí na základě dostupných korelací je riskantní v obou směrech. Hlavním důvodem neúspěchu je, že tyto korelace nevystihují vliv fyzikálních vlastností fázi dostatečně přesně aby bylo možné použít v tak širokém rozmezí teplot, jaké vyžaduje přenos dat na destilace. Pro vytvoření společné databáze transportních koeficientů pro oba procesy je podstatné abychom byli schopni měřit tyto koeficienty za podmínek v destilační koloně. Zahájení experimentálního ověření na počítačem řízené destilační koloně průměru 150 mm vybudované v rámci stávajícího VZ bude naplní výzkumu v roce 2004. Jedná se o originální metodu, jejíž ověření by umožnilo značně prohloubit naše znalosti o přestupu hmoty v destilačních kolonách. Data získaná pomocí této metody by rozšířila použitelnost korelací fundamentálních transportních koeficientů do oblasti vyšších teplot. Znalost těchto koeficientů by značně usnadnila návrhy kolon pro reaktivní destilaci jejichž společlivý návrh je prozatím značně empirickou záležitostí.

1d) Cílem plánovaným pro rok 2004 je vypracování efektivních modelů pro separační zařízení v průmyslu zpracování ropy, v nichž se zpracovávají mnohasložkové směsi a může docházet vlivem používané vodní páry ke vzniku druhé kapalně fáze.

1e) Studium makro-nestabilitních složek proudění v promíchávaných nádobách bude rozšířeno o vývoj modifikovaných technik umožňujících analyzovat data vykazující složitou vnitřní strukturu makro-nestabilitní komponenty toku, doprovázenou vysokým stupněm variability jejich dílčích složek při přechodu od laminárního k turbulentnímu proudění. Budou analyzována především data získaná měřením silových účinků kapalně vsádky na vnořené povrchy, např. narážky nebo usměrňovače toku. Výsledky studia budou využity při konstrukci míchacích zařízení s vyšším stupněm odolnosti proti haváriím v důsledku únavy částí namáhaných proudící kapalinou. Bude pokračovat výzkum výskytu makrovířů a jejich vliv na dynamické chování volné hladiny. Dále bude probíhat výzkum flotace s aplikací na selektivní separaci plastů. Bude testován vliv flotačních činidel a hydrodynamických podmínek na účinnost procesu.

1f) V oblasti katalytických polymerací olefinů se budeme zabývat matematickým modelováním problému růstu částice polymeru s přítomností kapalně fáze (rozpuštěná/zředěná) v porézní struktuře částice katalyzátoru/polymeru. Jedná se o důležitý problém ve fluidních polymeračních reaktorech provozovaných v tzv. kondenzačních režimech a v plynně-disperzních reaktorech se

zkrápěním. Provedeme přímé srovnání efektivních transportních vlastností v porézních katalyzátorech získané přímými měřeními s vlastnostmi vypočtenými z rekonstruovaného porézního prostředí, kde rekonstrukce vychází ze SEM snímků z elektronového mikroskopu. V experimentech bude provedeno ověření popisu termodynamiky soustav polymer – zředěvadlo/rozpuštědlo. V roce 2004 budou na vyvinutém mikroreaktoru probíhat experimenty s elektrolytickou diodou a tranzistorem. Budou vyvíjeny složitější typy mikroreaktorů se současnou separací složek s aplikacemi v oblasti biologických microarray-reaktorů. Budou vyvíjeny metody modelování procesů reakce a separace v elektrickém poli v mikrokanálcích. Teoreticky i experimentálně budou studovány neizotermní mnohasložkové iontové chemicky reagující systémy, ve kterých probíhá transport hybnosti, hmoty a tepla kondukcí i konvekcí a ve kterých mají velký význam elektrostatické interakce. Jedná se o základní výzkum týkající se membránových procesů, kombinovaných reaktorů a mikroreaktorů se současnou separací složek. Experimentální zařízení budou konstruována na bázi fotocitlivého skla litografickým postupem a hlubokým přesným leptáním. Ig) Budou studovány aplikace multifunkčních elektro-membránových enzymových reaktorů a mikro-reaktorů při procesech vyžadujících komplexní, multi-enzymové biotransformace uskutečňované např. pomocí živých buněk mikroorganismů, kdy často vznikají specifické problémy spojené s dávkováním a transportem málo rozpustných, růst inhibujících nebo až toxických substrátů, nebo s potřebou zajistit vysokou rychlost transportu rozpuštěného kyslíku a dalších elektro-neutrálních komponent k buňkám. K dosažení těchto transportních rychlostí bude využit elektro-osmotický transport, proto budou studovány možnosti jeho integrace a řízení prostřednictvím modifikací fyzikálně-chemických vlastností reakčního prostředí nebo prostorového uspořádání systému, především jeho miniaturizací a rozdělením na mnohočetné paralelní podjednotky. Jako modelové biotransformace budou uvažovány biodegradace procesy alifatických, aromatických nebo polyaromatických uhlovodíků, které představují časté a velmi závažné znečištění životního prostředí. Teoreticky i experimentálně budou studovány nerovnovážné chemicky reagující prostorově distribuované systémy tvořené vodnými roztoky elektrolytů, které se vyznačují významnými lokálními odchylkami od rovnovážného iontového součinu vody a lokální elektroneutrality. Jedná se o základní výzkum za účelem pochopení experimentálních pozorování velmi složitého chování velmi jednoduchých systémů několika složek (např. roztok kyseliny chlorovodíkové, hydroxidu a chloridu draselného ve vodě) pod vlivem elektrického pole (např. „elektrolytická dioda“), které doposud nemají dostatečné teoretické vysvětlení, a které mají potenciál praktického využití, např. v oblasti mikrotechnologií. Budeme se zabývat dynamikou bio-senzorů s imobilizovanými receptory, kde transport analyzovaných bio-molekul je řízen elektrickým polem. Dalším předmětem výzkumu bude zkoumání vlivu perfusního toku na separaci složek v kapilární elektrochromatografii. Zaměříme se na studium dlouhodobých účinků vloženého pole na vývoj organismu hlenky *Dictyostelium discoideum*, především na dobu tvorby plodnice, její velikost, trvání jednotlivých vývojových stadií, apod. Bude pokračovat experimentální studium vlivu vloženého elektrického pole na nestabilitu reakčně-difúzních vln vznikajících v důsledku lokální konvekce vyvolané rozdílnými hustotami nezreagované a zreagované reakční směsi.

Oblast 2. Modelování, simulace a řízení chemicko-technologických a biotechnologických procesů a systémů,

informační technologie a inženýrské informační systémy v chemii a potravinářství

2a) Budou studovány metody pro vyhodnocení míry rizika pro ekologické havárie i v prostoru mimo areál průmyslového podniku a ohrožení z více procesů včetně vlivu lidského faktoru. Bude rozpracována metodika sledování dynamického chování procesů, ať už při kombinaci periodických a kontinuálních jednotkových operací anebo tzv. kvazistacionárních kontinuálních procesů s predikcí s ohledem na úspory surovin, energií a užití.

2c) Na základě výsledků dosažených řešením cílů výzkumu pro rok 2003, jehož hlavní orientací je analýza vlivu transformace logistických řetězců na dodavatelské řetězce v oblasti chemie a potravin a podmínek nevyhnutné horizontální a vertikální integrace řízení hmotných toků stejně jako integrace marketingového, logistického a finančního řízení v tzv. Supply Chain management, je třeba završit výzkumný záměr návrhem organizačních struktur, systému delegace pravomocí, dělby práce, toku informací v dodavatelských řetězcích tak, aby bylo možno využít synergických efektů, zejména dalšího snižování nákladů a dalšího růstu úrovně služeb. Typové modely budou ověřeny na simulačních modelech. Pozornost bude věnována i stále významnější problematice řízení hmotných toků recyklací, zejména plastů a barevných kovů. Navrhovaná řešení budou ověřena na dvou reálných příkladech z průmyslové praxe podniků chemického a potravinářského průmyslu.

2d) Výzkum bude zahrnovat následující body:-Vývoj metod pro vizualizaci a zpracování dvourozměrných a třírozměrných obrazů pro zvýraznění kontur, potlačování šumu, rekonstrukci a klasifikaci dílčích složek-Aplikace statistických metod číslicového zpracování signálů a obrazů na biomedicínská data a obrazy magnetické resonance, rekonstrukce chybějících nebo poškozených částí obrazů, užití gradientních metod pro zvýrazňování hran, aplikace metody analýzy hlavních komponent pro detekci složek obrazů-Rozbor dat z oblasti životního prostředí včetně analýzy znečištění ovzduší, dvorozměrná interpolace pozemních měření na vybrané regiony, lokalizace zdrojů znečišťujících látek-Užití lineárních autoregresních metod a rekurentních modelů umělých neuronových sítí pro predikci časových řad s aplikací na předpověď spotřeby energie včetně příslušných intervalů spolehlivosti-Užití fuzzy logiky ke zpracování biomedicínských signálů a obrazů a obrazů turbulentního proudění kapalin; vývoj metod analýzy fraktálních struktur, rozvoj statistických metod stanovení fraktální dimenze-Výzkum diskrétních optimalizačních metod pro řešení úloh z oblasti umělé inteligence při učení hierarchických a samoorganizujících se neuronových sítí-Nelineární prediktory časových řad ve zpětné vazbě, návrh metod predikce, stabilita diskrétního řídicího systému, rozbor nových metod sběru dat pro vzdálenou analýzu signálů a obrazů

2e) Bude realizováno propojení pelistorového senzoru se signálovým procesorem s cílem využití signálového procesoru pro řízení měření a sběr naměřených dat a využití digitálních filtrů k potlačení rušivých složek signálu. Budou prováděny depozice a měření aktivních vrstev chemických a vodivostních senzorů; se zaměřením na aktivní vrstvy ze směsných organicko-anorganických materiálů. Budou ověřovány další organické polovodiče na bázi ftalocyaninů k detekci plynů a par. Dosažení optimální selektivity a dlouhodobé stability pro konkrétní aplikaci, což souvisí s technikou přípravy vrstev (naprašování v klasické podobě je zde nepoužitelné). Výzkum bude proto zaměřen na hledání nových technologií přípravy aktivních vrstev senzorů. Hlavní pozornost bude převážně

soustředěna na problematiku obrazové analýzy drobných částic rozptýlených v opticky homogenním prostředí (např. v čiré vodě nebo v plynech) s cílem umožnit tak realizaci jednoduchých kontrolních zařízení určených pro sledování kvality produktu. Budou využity metody digitálního zpracování jejich 2D, příp. 3D obrazů. Vypracování studie o biosenzorech s cílem rozšiřování jejich aplikací pro monitorování toxických látek zejména v oblasti ochrany životního prostředí.

2f) I nadále budou vytvářeny matematické modely biotechnologických procesů ve spolupráci s ústavu Fakulty potravinářské a biochemické technologie. Cílem je podchytit tímto způsobem základní průmyslové biotechnologické procesy a procesy související s ochranou životního prostředí. V tomto směru se jedná o dlouhodobou perspektivu. Řídicí systém fermentoru BIOGENES II bude rozšířen o průmyslovou relační databázi InSQL pro uchovávání všech dostupných údajů o řízených procesech. Tato databáze bude tvořit jádro znalostní řídicí úrovně. Systém bude využíván pro pokračující výzkum řízení různých produkčních bioprocésů a procesů biodegradace odpadů. Ve vývoji řídicích systémů fermentoru i odparks budou rozvíjeny zejména metody umělé inteligence. Půjde o pravidlové znalostní systémy, umělé neuronové sítě a fuzzy logiku, ale i o řadu dalších metod, jako např. případové usuzování, induktivní učení, fuzzy-neuronové sítě včetně hybridních metod. Dále budou studovány i možnosti aplikace těchto metod v prediktivním řízení s cílem dosažení optimálního řízení procesů.

2g) Důležitou součástí výzkumu budou další práce v oblasti vývoje a aplikace metod diskrétní optimalizace a umělé inteligence vhodných pro použití v integrovaných řídicích systémech. Pro řešení problémů z oblasti řízení vsádkových procesů, které nelze řešit klasickými algoritmickými postupy, bude analyzována aplikace multiagentních systémů, tj. řešení pomocí prostředků distribuované umělé inteligence. Jedná se o řešení problémů týkajících se reakcí na nepredikovatelné změny ve vsádkové výrobě, reakcí na poruchy ve výrobě, reakcí na obtížně predikovatelné výkyvy trhu a na okamžité změny požadavků zákazníků. Bude provedena přípravná studie pro přechod modelování vsádkových procesů z diskrétních simulacních elementů na spojité.

Oblast 3. Nelineární dynamika chemických a biologických systémů

3a) Podrobně budou studovány časoprostorové-struktury vznikající v reakčně-transportních systémech s využitím stabilitní a bifurkační analýzy. Zejména zajímavé jsou konvektivní nestability a vznik stacionárních struktur v systémech s konvekcí; tento jev bude srovnán se zavedenou představou o vzniku struktur v důsledku současné reakce a difuze, tzv. Turingových struktur. Budou studovány souvislosti mezi jevy, které se vyskytují v Coupled Map Lattices (CML) a reakčně difúzních PDR s aplikacemi na šíření křivočarých chemických vln typu fronty a pulzu. Budeme se zabývat i otázkami stability a "shadowing" vlastnostmi v CML i v PDR.

3b) Bude dále rozvíjen programový soubor CONTLAB for kontinuaci a bifurkační analýzu v prostředí MATLAB. Aplikace tohoto software by postupně měly zahrnout zejména analýzu prostorově distribuovaných systémů (řešení typu vlna, chaotické struktury apod.), které bude třeba vhodně diskretizovat tak, aby na jedné straně nevznikala parazitní řešení, ale aby na straně druhé byl výpočet efektivní a dostatečně rychlý. K tomu budou využity algoritmy na řešení řídkých systémů.

3c) Bude vytvořen program pro dynamické simulace iontových systémů ve 2D s bio-molekulami, popsaných soustavou parabolických PDR, jedné eliptické PDR a algebraických rovnic, kde program bude zahrnovat adaptivní řízení prostorové sítě a případně elektrodové reakce na skutečných elektrodách nebo na povrchu bio-membrán. Vývoj a aplikace nových algoritmů pro numerické řešení soustav rovnic smíšeného typu (algebraické, obyčejné diferenciální, hyperbolické, parabolické a eliptické parciální diferenciální rovnice) s vlastnostmi, které znemožňují jejich řešení za použití současně dostupných algoritmů a programů (např. systémy, ve kterých dochází k velkým změnám prostorových polí fyzikálních a chemických veličin na lokalizovaných předem neznámých místech, které svým objemem představují extrémně malou relativní část objemu celého systému). Diskretizace okrajových úloh pro parciální diferenciální rovnice vede na opakované řešení velkých řídkých soustav lineárních rovnic. V této souvislosti budeme zkoumat moderní algoritmy řešení, eventuálně nové techniky pro nalezení vlastních čísel a singulárních hodnot velkých řídkých matic.

3d) Excitabilita pH-oscilačních reakcí bude zkoumána experimentálně i teoreticky jednak v souvislosti s přechodem na oscilace či bistabilitu, jednak v souvislosti s přenosem excitací v soustavě dvou či více propojených reaktorů. Zkoumané experimentální systémy zahrnou anorganické pH-oscilátory (thiosíran-peroxid vodíku-Cu²⁺) a biochemické pH-oscilátory (papainový systém). Bude též dále rozpracována teorie prahových excitací. Bude pokračovat experimentální a teoretické studium biologického excitabilního systému buněk hlenky *Dictyostelium discoideum*.

3e) Algoritmy pro analýzu a zpracování chaotických časových a časoprostorových řad budou aplikovány na dynamiku hydrodynamických systémů s makronestabilitami a také na dynamiku chemických vln v modelech reaktorů s křížovým tokem, kde konvektivní nestability lze klasifikovat pomocí dynamických charakteristik jako jsou např. Ljapunovovy exponenty. Předpokládanými výstupy jsou převážně publikace v recenzovaných časopisech a příspěvky na konferencích včetně plných textů ve sbornících

VZ MSM 223400008 – Metody a prostředky chemické a fyzikálně-chemické analýzy vlastností a chování bioinženýrských a chemicko-inženýrských systémů

Laboratoř fyzikálně-chemických vlastností (LMV)

Cíle ve vývoji nových metodik, technik a přístrojů. Konstrukce další statické aparatury pro velmi přesná měření tlaků nasycených par v teplotním rozsahu, významném z hlediska životního prostředí (ca -30 až +30 °C).

Laboratoř fázových rovnováh (LFR)

Cíle ve vývoji nových metodik, technik a přístrojů. V rámci zdokonalování a vývoje technik využívajících plynové a kapalinové chromatografie a UV spektrometrie k měření limitních aktivních koeficientů, rozdělovacích koeficientů voda-vzduch a rozpustností organických látek ve vodě se předpokládá testování a aplikace nové aparatury, vybudované v roce 2003 na bázi EPICS (potenciálně vhodné pro vysoké hodnoty rozdělovacího koeficientu), a zahájení práce na vývoji diferenciální destilační metody (potenciálně vhodné pro velmi nízké hodnoty rozdělovacího koeficientu). Konstrukce

aparatury pro měření vzájemné rozpustnosti kapalin (LLE data) objemovou metodou. Nová aparatura bude budována se záměrem vylepšení experimentální techniky tak, aby bylo možno měřit LLE data v systémech s vyšší viskozitou nebo s nepříznivým mezifázovým napětím. Úprava přístroje pro měření roztažnosti polymerních membrán postaveného vlastními silami. Je třeba rozsáhlejší rekonstrukce (změny v mechanické i elektronické části, realizace propojení s počítačem), která bude provedena ve spolupráci s Ústavem fyziky a měřicí techniky VŠCHT Praha. Přístroj bude využit mimo jiné i k měření vzorků membrán a iontových rozpouštědel, dodaných laboratoři portugalské univerzity Universidade Nova de Lisboa.

Laboratoř matematického modelování a simulací (LMM)

Bude pokračovat program výpočtu termodynamických veličin plynů, kapalin a jejich směsí na základě znalostí mezimolekulárních sil. Nově bude provedena simulace dodatkových termodynamických veličin nekonečně zředěných směsí ve vodě. Výběr látek, teplotní a tlakové intervaly budou voleny tak, aby výsledky mohly být porovnány s experimentálními daty (přednost budou mít systémy měřené na našem pracovišti). Chceme dále pokračovat ve studiu termochemických vlastností a chemické rovnováhy AlIBV polovodičů typu AlGaInN a nově též ve vývoji systémů Bi-Sr-Mn-O či Bi-Sr-Ta-O, které mají z aplikačního hlediska zajímavé elektrické, magnetické a optické vlastnosti. Chceme pokračovat v dalším testování a vylepšování naší predikční metody pro stanovení slučovací tepel směsných oxidů, doplňovat databázi experimentálních údajů o entalpiích směsných oxidů a výsledky též využívat k řešení shora uvedených úkolů. Výzkum uvedený v tomto bodě se realizuje v rámci spolupráce s Ústavem inženýrství pevných látek a Ústavem anorganické chemie VŠCHT Praha. Matematický model ve formě lineární diferenciální rovnice s jedním parametrem se ukázal vyhovující pro popis procesů zahrnujících teplotní dynamické změny. Souvislosti mezi tímto parametrem a fyzikálně-chemickými charakteristikami biologického materiálu jsou klíčovým krokem pro praktickou aplikaci modelu. Umožňují totiž předpovědět chování živých systémů na základě fluktuací exaktně definovaných veličin jako je hustota, viskozita, teplotní vodivost, jež lze přesně měřit, pakliže nejsou již dobře známy. Odvození těchto souvislostí řeší kritický prvek modelu, jestliže předpokládáme znalost kinetiky růstu či mortality (resp. jiných dějů, koagulace bílkovin, deaktivace enzymů). Jeho vyřešení a simulační ověření pro limitní případy (konstantní nebo teplotně a časově závislé fyzikální veličiny) předpokládáme v roce 2004. V rámci matematického modelování fázových rovnováh se chceme zabývat návrhem, studiem a testováním nové stavové rovnice, založené na mřížkových modelech. Testování nové stavové rovnice bude prováděno nejprve pro čisté látky, posléze i na binárních systémech typu uhlovodík(y) - voda při nadkritických i podkritických teplotách a tlacích do ca 50 MPa. Zavedeme pojem zobecněného parciálního tlaku v libovolných směsí tekutin (plynů a kapalin i chemicky reagujících), pro který platí Daltonův zákon. Tento pojem chceme zobecnit na směsi netekutin (např. tuhých látek). Hlavní potíž spočívá v tom, že zatímco u tekutin lze chemický potenciál získat Legendrovou transformací, Eshelbyho tenzor nikoli, a to zatím komplikuje formulaci parciálních termodynamických vlastností u netekutin. g. Ve spolupráci s ÚFCH AV ČR dokončíme termodynamickou a kinetickou studii dehalogenace polychlorovaných bifenylů a výsledky publikovat. Rozšířit dosavadní oblast studovaných látek na kyslíkaté polutanty, tj. chloro- a bromoderiváty bifenyletheru a dioxinu. Provést kompletaci termochemických veličin uvedených skupin látek.

Doplnit používaný program pro výpočet chemické rovnováhy o on-line napojení na databázi termochemických vlastností látek. h. Budou zkoumány pravděpodobnostní a geometrické metody stanovení validity výsledků klastrovacích metod v analýze spekter, popis jejich předností a nedostatků, specifikace situací, ve kterých je jejich použití vhodné či nevhodné.

Laboratoř separačních technik (LST)

Cíle ve vývoji nových metodik, technik a přístrojů. Propojení diferenciálního permeamtru s hmotnostním spektrometrem pro analýzu permeátu při měření propustnosti polymerních membrán pro binární směsi par organických látek či směsí organická látka – plyn. Dokončení nové sorpční aparatury, která umožní vedle měření sorpce par čistých organických látek v polymerech i měření sorpce jejich směsí.

Vypracování metodiky extrakce 90Sr a 90Y trifluoronitrotoluenem a fenyltri-fluoromethylsulfonem.

Posledně jmenovaná látka bude syntetizována, neboť není dostupná komerčně.

Laboratoř molekulové spektroskopie (LMS) FTIR a Ramanova spektroskopie

Další vývoj experimentálního uspořádání pro simultánní měření FT Ramanových spekter a povrchové plazmonové rezonance.

Vývoj metodiky sledování průběhu reakcí na povrchu polymerních nosičů pomocí FT Ramanovy spektroskopie a mikroskopie. Vývoj postupů chemometrického zpracování dat pro kvantitativní vyhodnocení reakčních kroků.

Vývoj metodiky charakterizace supramolekulárních systémů metodami vibrační spektroskopie.

Využití metodiky mapování povrchu FT Ramanovou spektroskopií pro studium povrchových vrstev.

VCD spektroskopie. 1

Ab initio kvantově mechanické metody použít na simulaci VCD spekter. Zaměřit se na interpretaci VCD spekter vodných roztoků chirálních kyselin a jejich závislosti na pH, koncentraci a teplotě.

Rozvinout metodiku VCD pro studium samoskladných systémů, najít vhodné podmínky (koncentrace, směsná rozpouštědla, antiaglomerační činidla apod.), které umožní sledovat rozdílné strukturní vlastnosti izolovaných molekul a agregovaných chirálních útvarů.

Metodika studia peptidů, obsahujících rigidní a flexibilní část, rozvinout na studium hinge-proteinu, který má imunologický význam (materiál bude připraven na spolupracujícím pracovišti, Oddělení peptidů, Ústav organické chemie a biochemie, Ing. P. Maloň.

Sledování teplotně a rozpouštědlově závislé interakce, vedoucí k chirálním agreagátům a asociátům NMR spektroskopie. V oblasti kapalné fáze bude otestováno měření dalších jader, zejména 31P, 15N, 29Si. Dále budou optimalizovány parametry pro měření zejména 2D inverzních experimentů a to jak v případě 13C, tak rovněž 15N. V oblasti tuhé fáze budou optimalizovány podmínky pro měření jader 13C, 31P a 29Si, a to jak metodou MAS tak metodou CP/MAS.

Laboratoř prvkové analýzy (LPA)

Cíle ve vývoji nových metodik, technik a přístrojů

Vývoj elektrodepozice jako prekoncentrační techniky pro metodu atomové absorpční spektroskopie bude zaměřen na stanovení některých biogenních prvků v tělních tekutinách (Cu, Cr, Fe, Ni v moči a krevním seru).

Vypracování metodiky analytické kontroly přípravy radiofarmaka, které by mělo být vhodné pro ablaci kostní dřeně. Na monoklonální protilátku (imunoglobulin třídy G; IgG), se schopností vazby na granulocyty tvořící se v kostní dřeni, bude navázán isothiokyanát derivátu 1,4,8,11-tetraazacyclotetradekan-N,N',N'',N'''-tetraoctové kyseliny (DOTA).

Vypracování metodiky pro modelové sorpční experimenty a s tím související studium kinetiky sorpce různých chemických forem radionuklidů jodu za anaerobních podmínek a přítomnosti modifikátorů v pevné fázi.

Vypracování a validace metody pro stanovení elementární rtuti v pracovním a životním prostředí. Na základě experimentálních dat bude vypracován model šíření rtuti v životním prostředí.

Laboratoř molekulárního rozpoznávání (LMR)

Vývoj receptorů

Příprava receptorů pro senzorové aplikace pomocí metodiky dynamických knihoven. Sledovaný analyt, především biologicky významné anionty, bude použit jako templát při vlastní kombinatoriální syntéze. Očekáváme od tohoto nového přístupu efektivní cestu k přípravě selektivních receptorů.

Metodika kombinatoriálních knihoven bude využita také pro přípravu specifických inhibitorů isoformy enzymu virálních proteáz a NOS, kdy sledovaný enzym bude sám vybírat ze směsi nejvhodnější inhibitor na základě sterické a vazebné komplementarity aktivního místa.

Využití SAM pro chirální rozpoznávání s dlouhodobým cílem vyvinout optický senzor pro významné analyty, např. ATP a detektor enantiomerní čistoty. V této souvislosti budou využity thiolovou funkcí substituované alkaloidové N-kvarternizované sloučeniny a dále porfyrin-brucinové bis- a tris-deriváty s thiolovou periferní substitucí.

Vývoj nových receptorů pro aplikaci na vláknové optice, především pro sacharidy environ- metálně důležité analyty, především PAH a aromatických aminolátek.

Příprava nových HPLC sorbentů

Využití kombinatoriálních přístupů přípravy nových selektorů na bázi knihoven alkaloidů, příprava enantioselektivních selektorů pomocí paralelních syntéz, testování pro vysokoúčinnou chromatografii a elektrochromatografii. Vývoj senzorů, multikomponentní sensorová analýza.

Optimalizace metody fixace receptoru na vlákno pro stanovení vybraných analytů. Zde především chceme sledovat optickou detekci vybraných nukleotidů a aminokyselin.

Budou provedeny pokusy aplikovat vyvinutá zařízení elektronických nosů a jazyků k multikomponentní analýze reálných vzorků. V plánu je identifikace plísní, hub a zjišťování stárí jejich plodnic, identifikace produktů, některých surovin a meziproduktů pivovarského průmyslu, především pro kontrolu biochemických procesů probíhajících při výrobě a skladování výrobků pivovarského průmyslu. Zvýšená pozornost bude věnována možnosti posuzování aktivity pivovarských kvasnic, vlivu pasteračního pochodu a fotooxidačním procesům, stárnutí spojené se změnou chemického složení bude porovnáváno se vzorem čerstvé

potraviny. Základní testování bude prováděno na mléčných výrobcích.

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

Stavové chování a termodynamické vlastnosti Stavové chování kapalin a kapalných směsí

Systematická měření parciálních molárních objemů hydroxylových derivátů alifatické řady uhlovodíků (s jednou i více hydroxylovými skupinami) při nekonečném zředění ve vodě.

Vypracování strukturně-příspěvkové metody pro odhad parciálních molárních objemů derivátů aromatické i alifatické řady při nekonečném zředění ve vodě.

Kompilace a kritické zpracování nově publikovaných literárních dat o stavovém chování 1-alkanolů a n-alkanů. Zahájení systematické kompilace dat o rychlosti zvuku v organických kapalinách. Tepelné kapacity kapalných a pevných látek.

Měření tepelných kapacit a tepel fázových přechodů látek významných z hlediska životního prostředí. Využití těchto údajů k termodynamicky podložené extrapolaci tlaku nasycených par směrem k nižším teplotám.

Aktualizace databáze kriticky zhodnocených tepelných kapacit kapalin a další vývoj a zpřesnění strukturně-příspěvkové odhadové metody.

Tlak nasycených par vysokovroucích organických látek. Měření tlaku nasycených par vysokovroucích látek významných z hlediska životního prostředí (zejména deriváty benzenu, průmyslová rozpouštědla). Měření tlaku nasycených par látek, které jsou používány ke kalibraci tenzních aparatur. Spolupráce: Universita Porto, Portugalsko; Universita Utrecht, Nizozemí; Universita Minsk, Bělorusko; Universita Turín, Itálie.

Termodynamické vlastnosti tuhých látek

Rozvoj metod predikce termodynamických vlastností směsných tuhých oxidů Ca, Ba, Cu a dalších kovů.

2. Fázové rovnováhy a separační procesy

Fázové rovnováhy ve vysoce zředěných roztocích organických látek

Studium teplotní závislosti limitních aktivitních koeficientů ve vodných roztocích 1-alkanolů bude rozšířeno na isomerní větvené alkanoly C3 a C4. Ke spolehlivému určení těchto vesměs nemonotónních závislostí budou opět kombinovány různé experimentální techniky a užito simultánního zpracovávání spolu s kalorimetrickými daty o rozpouštěcích teplech a tepelných kapacitách.

V rámci zkoumání limitních aktivitních koeficientů v nevodných systémech se v návaznosti na ucelenou studii směsí alkoholů s toluenem plánuje studie směsí alkoholů s ethylbenzenem.

Rozvoj stávající databáze limitních aktivitních koeficientů (PLACID) bude i v roce 2004 pokračovat průběžným doplňováním dat do databáze. Vzhledem ke skluzu prací na vývoji programového vybavení předpokládáme realizaci modulu exportu a tisku dat z databáze, která byla původně plánovaná na rok 2003, až v roce 2004.

Rovnováha kapalina-kapalina (LLE)

Experimentální studium teplotní závislosti charakteru rovnováhy kapalina – kapalina v ternárních systémech určování průběhů kritických křivek (např. systémy methanol + 2-methylpentan + N,N-dimethylformamid, methanol + methylcyklohexan + cyklohexan). Vývoj experimentální metody pro měření LLE v systémech obsahujících viskózní kapalinu (např. ethylenglykol, glycerin). Měření dat LLE užitečných pro projektování rozpouštědel ve farmaceutickém průmyslu (např. ethylenglykol + chlorobenzen).

Budou nadále zkoumány možnosti popisu neideálních systémů pomocí regulárního roztoku a Wilsonovy modifikované rovnice pro predikci a modelování LLE. Zvláštní pozornost bude věnována odvození vlastností kritické křivky.

Pokračovat v navázané spolupráci se zahraničním partnerem měřeními dat LLE a HE v průmyslově významných systémech obsahujících alkoholy a uhlovodíky. Simultánní korelace termodynamických dat binárních systémů. Dle potřeby rozšiřovat a upravovat výpočetní procedury.

Jevy na fázových rozhraních

Bude pokračováno ve výzkumu vzájemných vztahů mezi vlastnostmi v objemové a povrchové fázi vodných roztoků organických látek relevantních z biofyzikálního hlediska

Experimentální studium sorpce čistých organických látek z kapalně fáze na polymerních membránách: modifikované polyimidy.

Membránové separace

Měření koeficientů propustnosti a difúze par organických látek (alkoholů C1-C6, benzen, toluen, hexan, cyklohexan a heptan) ve vybraných polymerních membránách.

Měření sorpce par alkoholů, n-alkánů a aromátů a jejich binárních směsí ve vybraných polymerních membránách.

Studium vlivu teploty na separační vlastnosti vybraných pervaporačních membrán.

Spolupráce: Ústav polymerů VŠCHT Praha, Institut petrochemických syntéz, Moskva.

3. Chemické a asociační rovnováhy

V oblasti studia roztoků se silnými specifickými interakcemi budou výsledky našich nových termodynamických měření a měření NMR spektroskopii pro systémy haloethanu a trichlormetanu s tetrahydropyranem analyzovány

jednoduchými asociačními modely s cílem získat kvantitativní informace o rozsahu komplexace a stabilitě příslušných komplexů.

U dříve naměřených rovnováh pevná látka-kapalina bude zkoumána schopnost jejich popisu 2- a více parametrickými rovnicemi z dat o rovnováze kapalina-pára. Nově bude měřeno chování pevná látka-kapalina u systému, v němž jedna složka obsahuje karboxylovou, druhá dusíkatou skupinu.

Studium interakce oligo- a polysacharidu (neutrálních a kationických) s opačně nabitými makrocikly. Spektroskopické sledování interakce systému sacharid-protein, který představuje model pro studium nekovalentní komplexace, odpovědné za imunitní responzi.

Spektroskopické sledování schopností makrocyclických sloučenin tvořit různé agregované systémy, především nano-velikosti. Bude rozpracována metodika spektroskopické charakterizace nanočástic a sledována změna jejich fyzikálně-chemických vlastností v závislosti na velikosti.

Charakterizace interakcí ligand - protilátka s využitím kapilární elektroforézy, modelové experimenty na systémech chelatační činidla – BSA.

Sledování interakcí radionuklid (^{166}Ho , ^{90}Y a ^{125}In) - ligand – protilátka, systémů vhodných pro radioterapeutické aplikace, s využitím kapilární elektroforézy.

Studium sorpce různých valenčních forem jodu na přírodních sorbentech na bázi bentonitů za aerobních a anaerobních podmínek.

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

Využití gelové permeační chromatografie a iontově výměnné chromatografie pro speciaci biogenních prvků (Fe, Zn, Cu, Se, I) v tělních tekutinách. Spolupráce s I. LF UK Praha.

Pomocí rezonanční Ramanovy spektroskopie sledovat změny ve vzorcích biologického materiálu (tkání) po ozaření světlem nebo urychlenými protony.

Pomocí FT Ramanovy spektroskopie sledovat in vivo změny obsahu vybraných složek v jehlicích smrku ztepilého.