

**VYSOKÁ ŠKOLA CHEMICKO-TECHNOLOGICKÁ V PRAZE****FCHI****FCHT****FPBT**

Ústav analytické chemie  
Ústav anorganické chemie  
Ústav biochemie a mikrobiologie  
Ústav fyzikální chemie

Ústav fyziky a měřicí techniky  
Ústav chemického inženýrství  
Ústav organické chemie  
Ústav počítačové a řídicí techniky  
Laboratoř informatiky a chemie

## **Roční závěrečná zpráva projektu č. 434**

### **„Rozvoj modulární struktury laboratoří základních předmětů v magisterském studiu“**

řešeného

**v roce 2006**

v rámci

**Programu 1**

**na podporu rozvoje struktury**

podprogramu

**a) rozvoj nové struktury a modulární skladba studijních programů**

**Hlavní řešitel:**

**Doc. Dr. RNDr. Pavel Matějka**

Praha, 14. 1. 2007

**Obsah:**

|                                                                                            |    |
|--------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Hlavní cíl projektu.....                                                                   | 3  |
| Celková anotace a finanční souhrn projektu (2004 – 2006) se zaměřením na rok 2006.....     | 4  |
| Průběh a výsledky řešení projektu v roce 2006.....                                         | 7  |
| Výchozí stav pro řešení v roce 2006 – stručný souhrn předchozího řešení projektu .....     | 7  |
| Obecné kroky přípravy modulárních laboratoří realizované během roku 2006 .....             | 7  |
| A. Průběh výběru a základní implementace systému elektronických laboratorních záznamů..... | 9  |
| A1. Výběr elektronického laboratorního záznamníku vhodného pro výuku na VŠCHT Praha.....   | 9  |
| A2. Základní implementace systému elektronického laboratorního deníku .....                | 10 |
| B. Průběh přípravy jednotlivých modulů .....                                               | 13 |
| B1. Moduly připravované Ústavem analytické chemie .....                                    | 13 |
| B2. Moduly připravované Ústavem anorganické chemie .....                                   | 16 |
| B3. Moduly připravované Ústavem biochemie a mikrobiologie .....                            | 17 |
| B4. Moduly připravované Ústavem fyzikální chemie .....                                     | 20 |
| B5. Moduly připravované Ústavem fyziky a měřicí techniky .....                             | 21 |
| B6. Moduly připravované Ústavem chemického inženýrství .....                               | 29 |
| B7. Moduly připravované Ústavem organické chemie .....                                     | 30 |
| B8. Moduly připravované Ústavem počítačové a řídicí techniky .....                         | 33 |
| C. PŘÍLOHY .....                                                                           | 38 |

**Zařazení projektu:**

Program: **1. Program na podporu rozvoje struktury a modulární skladby studijních programů**

Téma: **Plné uplatnění strukturovaných studijních programů a další rozvoj struktury a modulární skladby studijních programů v rámci školy**

**Pokračování řešení projektu z let 2004 a 2005 – zpráva za 3.rok řešení a souhrn**

**Celková doba řešení: 3 roky (2004 – 2006)**

**Hlavní cíl projektu**

- Hlavním cílem projektu bylo vytvořit **flexibilní strukturu modulárních laboratoří základních předmětů pro studenty magisterského studia na VŠCHT Praha** a nabídnout ji pro nově koncipované strukturované studijní programy všech fakult. Záměrem projektu bylo v souladu s Dlouhodobým záměrem VŠCHT Praha umožnit studentům magisterských studijních programů získat pokročilejší znalosti a experimentální zkušenosti nejen z vlastního, ale i z jiných oborů, a tak **posílit interdisciplinaritu magisterských studijních programů**. Zároveň tyto laboratoře zformované do tematických modulů **s variabilní obtížností jednotlivých úloh** umožní studentům sestavit si **individuální program**, jednak s ohledem na absolvovaný bakalářský studijní program, jednak odpovídající jejich dalšímu odbornému zaměření, případně s ohledem na téma diplomové práce. Pro posílení interdisciplinárních vazeb a uplatnění moderních trendů využívání elektronických prostředků při výuce byla **pro rok 2006 nově** navrhována realizace systému elektronických protokolů ve formě intranetového **elektronického chemicky orientovaného laboratorního deníku** („electronic laboratory notebook“ – ELN). Studenti se tak seznámí s **moderní formou vedení laboratorních záznamů**, která se stále více uplatňuje v chemických, farmaceutických, potravinářských a dalších, jak rutinních, tak vývojových laboratořích s ohledem na správnou laboratorní praxi (GLP) a využívání systémů LIMS („laboratory information management system“). Tímto způsobem bude dosaženo vyšší úrovně počítačové a informační gramotnosti absolventů magisterského stupně studia VŠCHT Praha.

**Řešitel:** Doc. Dr. RNDr. Pavel Matějka  
Ústav analytické chemie  
Fakulta chemicko-inženýrská  
VŠCHT Praha

e-mail: Pavel.Matejka@vscht.cz  
tel. 2 2453 4281  
fax. 2 2431 0352  
166 28 Praha 6, Technická 5

**Na projektu se podílejí ústavy třech fakult:**

Ústav analytické chemie (FCHI) - ÚAN  
Ústav biochemie a mikrobiologie (FPBT) - ÚBM  
Ústav fyzikální chemie (FCHI) - ÚFCH  
Ústav fyziky a měřicí techniky (FCHI) - ÚFMT  
Ústav chemického inženýrství (FCHI) - ÚCHI

Ústav organické chemie (FCHT) - ÚOCH  
Ústav anorganické chemie (FCHT) - ÚACH  
Ústav počítačové a řídicí techniky (FCHI) - ÚPŘT  
Laboratoř informatiky a chemie (FCHT) - LICH

**Garanti řešení z jednotlivých ústavů:**

ÚAN Doc. Dr. RNDr. Pavel Matějka  
ÚBM Doc. RNDr. Olga Valentová, CSc.  
ÚFCH Dr. Ing. Pavel Vrbka  
ÚFMT Doc. Ing. Karel Kadlec, CSc.  
ÚCHI Ing. Oldřich Holeček, CSc.

ÚOCH Doc. Ing. Pavel Lhoták, CSc.  
ÚACH Doc. Ing. Dagmar Sýkorová, CSc.  
ÚPŘT Doc. Ing. Miroslav Kubíček, CSc.  
LICH Ing. Bedřich Košata, PhD.

## **Celková anotace a finanční souhrn projektu (2004 – 2006) se zaměřením na rok 2006**

Řešení projektu modulárních laboratoří základních předmětů pro studenty magisterského studia VŠCHT Praha **bylo zahájeno v roce 2004**, kdy se pozornost soustředila na vyřešení konkrétní obsahové náplně všech původně navržených dvaceti čtyř modulů, vytipování vhodných úloh ze stávajících studijních programů, na zahájení budování zcela nových úloh odpovídajících aktuálním potřebám a trendům vysokoškolské laboratorní výuky, stejně jako na modernizaci a zvýšení kapacity některých existujících úloh. Na základě vyhodnocení poptávky po jednotlivých modulech bylo pořízeno finančně nákladné klíčové přístrojové vybavení do modulů **Základní biochemické metody, Kalorimetrie, Molekulová spektrometrie, či Provozní měření a řízení**, a to již v průběhu 1. pololetí roku 2004.

**V druhém roce (2005)** řešení projektu se pozornost soustředila na přípravu dalších nových úloh v souvislosti s nově (v roce 2005) pořízeným přístrojovým vybavením, a to především v modulech, které nebyly přístrojově pokryty v roce 2004. Pokračovalo se také v přípravě nových úloh, pro jejichž budování bylo přístrojové a další vybavení pořízeno již v roce 2004. Nové vybavení bylo směřováno především do modulu věnovaného **membránovým operacím**, do modulů zajišťovaných ústavem ÚPŘT, a to především do modulu věnovaného **snímání provozních dat**, a dále do dvou modulů z oblasti moderní anorganické chemie, tj. do modulů **Reakce v pevné fázi a Komplexní sloučeniny**. Další kapitálové prostředky byly využity například pro biochemický modul **studia biomakromolekul**, a to na přípravu nové laboratorní práce věnované dvojdimensionální elektroforese. V oblasti analytické chemie byla provedena výrazná modernizace v modulu věnovaném **prvkové analýze**. Kromě toho probíhala drobnější modernizace některých stávajících úloh stejně jako zvýšení kapacity některých dalších existujících úloh. Pozornost přitom byla věnována variabilní obtížnosti prací na jednotlivých přístrojích, jakož i možnosti obměňovat obsah úlohy podle oborového zaměření frekventantů, a to volbou sledovaných analytů při zachování principu úlohy.

**Ve třetím roce (2006)** řešení projektu byla pozornost rozdělena do dvou dílčích témat. Jedním tématem bylo **dokončení přípravy laboratorních úloh a jejich celkového uspořádání do vyučovaných modulů**, spočívající v jejich odzkoušení, optimalizaci jejich tématické náplně a časové náročnosti, zajištění odpovídajících návodů a dalších náležitostí nutných pro běžný provoz posluchačských laboratoří. Zároveň s tím probíhala **celková koordinace modulů** do formy předmětu s rozsahem 84 hodin za semestr (formálně 6 h ve výukovém týdnu –  $6 \times 14 = 84$ ) v reálném uspořádání složeném ze čtyř zvolených modulů po 21 h ( $4 \times 21 = 84$ ), kdy v rámci modulu absolvují studenti nejčastěji tři denní (7 h) úlohy ( $3 \times 7 = 21$ ). Modulární laboratoře budou moci být nabízeny jak v zimním tak letním semestru, při čemž některé moduly budou nabízeny v obou semestrech, jiné pak jen v jednom z nich s ohledem na kapacitní možnosti jednotlivých zúčastněných ústavů. Minimální počet nabízených modulů v jednom semestru bude 12, z nichž si studenti zvolí 4 podle svých preferencí. Druhým důležitým tématem bylo vybírání, pořízení, instalace a realizace základní **implementace systému elektronických laboratorních záznamů** do výuky ve formě společně provozovaného intranetového elektronického chemicky orientovaného laboratorního deníku („electronic laboratory notebook“ – ELN). Podařilo se zajistit stabilní provoz ELN serveru se zálohováním dat a instalaci klientů nejen ve vybraných laboratořích, ale i ve všech počítačových učebnách VŠCHT, provozovaných Výpočetním centrem VŠCHT. Tím byly vytvořeny předpoklady k širokému seznámení posluchačů VŠCHT s ELN systémem, jakožto produktem široce nasazovaným v chemických, farmaceutických, biotechnologických firmách či v chemickém výzkumu a vývoji. Zvolený komerční ELN produkt od renomované firmy Waters umožňuje jeho využití v široké škále chemických laboratoří od anorganické či organické syntézy, přes moderní instrumentální analýzu až po pokročilé metody biochemické. Systém umožňuje i elektronické předávání protokolů nadřazeným (vyučujícím), možnost



jejich zamítnutí, potvrzení či vyzvání k revizím a archivaci všech verzí protokolu, čímž může přispět k transparentnějšímu hodnocení práce studentů v laboratořích.

**Řešení projektu bylo finančně velmi náročné, na rozvoj modulárních laboratoří bylo během tří let využito 15,3 mil. Kč ze samotné finanční dotace projektu. Tyto prostředky byly v mnoha případech doplněny dalšími finančními zdroji dle rozhodnutí jednotlivých zúčastněných pracovišť.**

**V prvním roce řešení projektu (2004) bylo přiděleno a vyčerpáno celkem 6 milionů Kč,** z čehož 3,8 milionu Kč tvořily kapitálové finanční prostředky v kapitole samostatné věci movité (stroje, zařízení), 2,2 milionu Kč pak představovaly běžné finanční prostředky (420 tis. Kč pohyblivé složky mzdy, 147 tis. Kč odvody na SZP, 23 tis. Kč stipendia, 878 tis. Kč drobný majetek, 704 tis. Kč materiální náklady a 36 tis. Kč služby).

**Pro druhý rok řešení (2005) bylo celkem přiděleno a vyčerpáno opět 6 milionů Kč,** z čehož 3,6 milionu Kč tvořily kapitálové finanční prostředky v kapitole samostatné věci movité (stroje, zařízení), 2,4 milionu Kč pak představovaly běžné finanční prostředky (420 tis. Kč pohyblivé složky mzdy, 147 tis. Kč odvody na SZP, 24 tis. Kč stipendia, 1 200 tis. Kč drobný majetek, 600 tis. Kč materiální náklady a 9 tis. Kč služby). Oproti roku 2004 došlo k výraznému poklesu reálné hodnoty kapitálových prostředků, neboť vzhledem ke změně daňových předpisů bylo třeba zaplatit DPH i v případě importovaných přístrojů a zařízení (v roce 2004 se podařilo většinu investičních akcí zrealizovat před 1. květnem, kdy vstoupila v platnost nová zákonná úprava).

**Pro třetí a závěrečný rok řešení (2006) bylo celkem přiděleno 3,3 milionu Kč,** z čehož 2 miliony Kč tvořily kapitálové prostředky (1,5 milionu Kč dlouhodobý nehmotný majetek (SW, licence) a pouze 0,5 milionu Kč samostatné věci movité (stroje, zařízení)), 1,3 milionu Kč representovaly běžné prostředky (516 tis. Kč pohyblivé složky mzdy, 180,6 tis. Kč odvody na SZP, 91 tis. Kč stipendia, 265 tis. Kč drobný majetek, 240 tis. Kč materiální náklady a 7,4 tis. Kč služby). Struktura rozpočtu na rok 2006 tak byla výrazně odlišná od předchozích rozpočtů, což souviselo s plánem zřídit softwarově náročný systém ELN a s požadavky danými potřebou odzkoušet úlohy a dokončit přípravu studijních materiálů pro výuku v jednotlivých modulech bez významných investic do přístrojového vybavení. **Přidělené finanční prostředky pro rok 2006 byly vyčerpány v plné výši** (viz formulář č.8), pouze s drobnými odchylkami ve struktuře rozpočtu. Částka 1,5 milionu Kč na dlouhodobý nehmotný majetek byla přečerpána o 5 160,54 Kč, tj. o 0,34 % plánované částky, tak aby vedle samotného ELN softwaru byl pro jeho spolehlivý provoz pořízen i software na zálohování dat na serveru. To bylo kompenzováno nedočerpáním částky 500 tis. Kč na samostatné věci movité o 5 294,- Kč (tj. o 1,06 % plánované částky). Celkově tak byly 2 miliony Kč přidělených kapitálových prostředků nedočerpány o 133,46 Kč (méně než 0,007 %). V běžných finančních prostředcích došlo k přečerpání částky 1,3 milionu Kč o 603,69 Kč (tj. o 0,046 % plánované částky) v součtu čerpání devíti zúčastněných pracovišť (tj. cca 67 Kč na jednotlivé pracoviště). Po odečtení 133,46 Kč nedočerpaných kapitálových prostředků, činí celkové přečerpání dotace 470,23 Kč, což je hrazeno z prostředků VŠCHT Praha. Pohyblivé složky mzdy byly vyčerpány přesně ve výši 516 tis. Kč, stejně jako stipendia byla čerpána přesně ve výši 91 tis. Kč. Vzhledem k zaokrouhlovacím chybám byla částka na SZP (180 tis. Kč – 35 % mzdových prostředků) nedočerpána o 1 Kč. K větším odchylkám, i když nikterak zásadním, došlo v čerpání částek na drobný majetek, materiální náklady a služby. Na drobný majetek byla plánovaná částka (265 tis. Kč) přečerpána o 33 189,90 Kč (tj. o 12,5 % původně plánované částky), což bylo kompenzováno nižším čerpáním v položce materiálních nákladů, kdy bylo vyčerpáno 212 815,59 Kč místo plánovaných 240 tis. Kč (úspora 27 184,41 Kč, tj. 11,3 % plánované položkové částky) a úsporami ve službách ve výši 5 400,80 Kč. Struktura čerpání přidělené dotace podle jednotlivých pracovišť je uvedena v příloze 1 (část C této zprávy).

**Formulář pro závěrečné zprávy**  
**specifikace čerpání finanční dotace na řešení jednotlivých projektů**  
 (vyplnit za celý projekt)

|                                                      |                                                                                                                                 |
|------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Číslo a název projektu</b>                        | <b>434</b><br><b>Rozvoj modulární struktury laboratoří základních předmětů v magisterském studiu</b>                            |
| <b>Program</b>                                       | 1 Program na podporu rozvoje struktury a modulární skladby studijních programů                                                  |
| <b>Řešitel (jméno a příjmení, titul, pracoviště)</b> | Doc. Dr. RNDr. Pavel Matějka, Ústav analytické chemie, Fakulta chemicko-inženýrská, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze |

| Kapitálové finanční prostředky               |                                           | Přidělená dotace na řešení projektu (ukazatel I) | Čerpání dotace |
|----------------------------------------------|-------------------------------------------|--------------------------------------------------|----------------|
| <i>Z toho</i>                                | Dlouhodobý nehmotný majetek (SW, licence) | <b>1500</b>                                      | <b>1505</b>    |
|                                              | Samostatné věci movité (stroje, zařízení) | <b>500</b>                                       | <b>495</b>     |
| <b>Celkem kapitálové finanční prostředky</b> |                                           | <b>2000</b>                                      | <b>2000</b>    |

| Běžné finanční prostředky               |                                                      | Přidělená dotace na řešení projektu (ukazatel I) | Čerpání dotace |
|-----------------------------------------|------------------------------------------------------|--------------------------------------------------|----------------|
| <i>Z toho</i>                           | Mzdy                                                 | <b>0</b>                                         | <b>0</b>       |
|                                         | Pohyblivé složky mzdy                                | <b>516</b>                                       | <b>516,0</b>   |
|                                         | Odměny dle dohod o pracích konaných mimo prac. poměr | <b>0</b>                                         | <b>0</b>       |
|                                         | Odvody na sociální a zdravotní pojištění             | <b>180,6</b>                                     | <b>180,6</b>   |
|                                         | Drobný majetek                                       | <b>265</b>                                       | <b>298,2</b>   |
|                                         | Materiální náklady                                   | <b>240</b>                                       | <b>212,8</b>   |
|                                         | Služby a náklady nevýrobní povahy                    | <b>7,4</b>                                       | <b>2,0</b>     |
|                                         | Cestovní náhrady                                     | <b>0</b>                                         | <b>0</b>       |
|                                         | Stipendia                                            | <b>91</b>                                        | <b>91,0</b>    |
| <b>Celkem běžné finanční prostředky</b> |                                                      | <b>1300</b>                                      | <b>1300,6*</b> |

Veškeré částky jsou uváděny v tisících korun českých.

\*Celkové přečerpaní ve výši 470,23 Kč je hrazeno z prostředků VŠCHT Praha.

## **Průběh a výsledky řešení projektu v roce 2006**

### **Výchozí stav pro řešení v roce 2006 – stručný souhrn předchozího řešení projektu**

Řešení projektu bylo zahájeno v roce 2004, kdy bylo navrženo předběžné schéma struktury modulů na základě detailní analýzy bakalářských studijních programů všech čtyř fakult, a to především s ohledem na laboratorní výuku, ať již v předmětech povinných, povinně volitelných či volitelných. V souladu s návrhem projektu bylo s využitím přidělených kapitálových finančních prostředků pořízeno přístrojové vybavení pro preferované moduly, ať již se jednalo o moduly **Základní biochemické metody**, **Kalorimetrie**, **Molekulová spektrometrie**, či **Provozní měření a řízení**. Díky připravenosti pracovišť bylo toto přístrojové vybavení dodáno ještě v 1. pololetí roku 2004, takže již během uvedeného roku došlo k seznámení vyučujících s obsluhou těchto přístrojů, stejně jako byly provedeny testovací experimenty pro přípravu konkrétních úloh.

Druhý rok řešení projektu znamenal především pokračování v přípravě jednotlivých modulů, při čemž celkovou snahou bylo zmodernizovat úlohy takových dalších modulů (méně podpořených v roce 2004) tak, aby se vyrovnala celková úroveň vybavení různých tematických modulů z pohledu aktuálních trendů v laboratorní výuce. Kapitálově tak byly v roce 2005 podpořeny především moduly **Snímání provozních dat**, **Membránové operace**, **Reakce v pevné fázi**, **Komplexní sloučeniny** a v nemalé míře též moduly **Prvková analýza** či **Studium biomakromolekul**. Právě sledování trendů rozvoje laboratorní výuky v mezinárodním měřítku vedlo k vytipování dalších úloh vhodných pro zařazení do připravovaných modulárních laboratoří, a to bez větších nároků na pořizování dražších přístrojů a zařízení, tj. s využitím již existujícího vybavení tak, aby byl naplněn cíl na zvýšenou variabilitu obtížnosti jednotlivých modulů.

Lze tak konstatovat, že v předchozích dvou letech řešení projektu bylo významně investováno do přístrojového a technického vybavení laboratoří řady připravovaných modulů. Kromě již zmíněného sledování trendů přístrojového a technického vybavení v jednotlivých modulech byl zaznamenán globální rozvoj nasazení elektronických prostředků v komerčních, akademických či univerzitních laboratořích. Typickým příkladem tohoto vývoje je implementace systémů elektronických laboratorních deníků (ELN) v řadě oblastí.

Z průběhu předchozího řešení a zmíněných obecnějších rozvojových tendencí vyplynuly specifické úkoly pro rok 2006, a to soustředit se více na softwarové prostředky, dokončení přípravy úloh, doplnění laboratorního vybavení pro běžný provoz při výuce studentů a celkovou přípravu laboratoří pro zahájení výuky studentů.

### **Obecné kroky přípravy modulárních laboratoří realizované během roku 2006**

Řešení projektu v roce 2006 vycházelo z stanovených **klíčových cílů**:

1. Odkoušení úloh vytvořených v letech 2004 a 2005, příprava moderních didaktických pomůcek, rozšíření kapacity a optimalizace naplně některých úloh.
2. Příprava návodů k jednotlivým úlohám, zajištění vazeb mezi moduly a finalizace přípravy laboratoří k běžné výuce. Cílem je řádná příprava celého schématu laboratoří (včetně návodů, pomůcek i organizační struktury) pro plné spuštění s nástupem studentů do strukturovaného magisterského studia.
3. Pořízení a zavedení základu systému ELN (elektronických laboratorních záznamů – nejméně 25 současně pracujících uživatelů) do posluchačských laboratoří.

Tyto cíle byly naplňovány následujícím způsobem:

1. Odkoušení jednotlivých úloh, přípravě pomůcek, rozšíření kapacity laboratoří jednotlivých modulů a optimalizaci naplně některých úloh (**cíl 1**) se věnovala jednotlivá zúčastněná pracoviště kromě pracoviště LICH, které se věnovalo intenzivně

zavedení systému ELN. Tento **cíl 1** se podařilo naplnit, jak plyne z podrobností o přípravě jednotlivých modulů, uvedených dále v části **B** této zprávy (**Průběh přípravy jednotlivých modulů**).

2. V rámci přípravy návodů k jednotlivým úlohám, zajištění vazeb mezi moduly a finalizace přípravy laboratoří k běžné výuce (**cíl 2**) byla doplněna řada návodů (část z nich je přílohou této práce – část **C** této zprávy). Finalizace přípravy laboratoří k výuce vyplývá z průběhu přípravy jednotlivých modulů (část **B** této zprávy). Zajištění vazeb mezi moduly a příprava celého schématu laboratoří spočívala mimo jiné v přípravě materiálu o rozsahu a obsahu navrhovaného předmětu pro jednání za účasti prorektora pro pedagogiku (Prof. Ing. Stanislava Labíka, CSc.) a proděkanů pro pedagogickou činnost všech čtyř fakult VŠCHT Praha (Doc. Ing. Zdeňka Bělohla, CSc., Prof. Ing. Václava Jandy, CSc., Prof. Ing. Jana Velíška, DrSc. a Doc. Ing. Pavla Hasala, CSc.). Předmět nazvaný „Modulární laboratoře“ je tak koncipován jako volitelný pro 1. ročník magisterských studijních programů strukturovaného studia, jeho nabídka se připravuje ve dvou variantách A resp. B pro zimní resp. letní semestr, kdy některé moduly budou nabízeny v obou semestrech, jiné pak pouze v jednom z nich podle kapacitních možností jednotlivých pracovišť. Rozsah předmětu je počítán na 84 hodin za semestr (formálně tedy 6 h týdně ve 14 výukových týdnech semestru), reálně však bude 84 hodin rozděleno do 4 modulů po 21 výukových hodinách. V řadě případů bude výuka modulu reprezentována výukou ve třech laboratorních dnech po 7 hodinách. Byly též propočítány kapacity jednotlivých laboratoří a možnosti opakovaného provozování jednotlivých modulů během semestru. Studenti se budou dle svého zájmu zapisovat do jednotlivých modulů v příslušně nabízených termínech až do vyčerpání jejich kapacity, při čemž k pokrytí rozsahu předmětu budou potřebovat čtyři moduly z minimálně dvanácti nabízených v každém semestru. Jak je zřejmé, výše uvedené kroky vedly ke splnění **cíle 2**.
3. Dále byla koordinována činnost řešitelského týmu v souvislosti s výběrem a implementací ELN (**cíl 3**). Základní odborná garance zde spočívala na LICH a byly vyhledány ty laboratoře, kde dochází k nasazení ELN v první vlně, tak aby získané praktické zkušenosti umožnily jeho rozšíření do dalších laboratoří. Klientský software byl zpřístupněn z vybraných posluchačských laboratoří a ze všech počítačových učeben, které jsou v centrální správě Výpočetního centra VŠCHT. Laboratoř LICH využila finanční prostředky na počítačovou techniku, aby mohla zabezpečit seznámení studentů, doktorandů i zaměstnanců školy s ELN systémem, tj. přípravu seminářů, cvičení i přednášek pro uvedené cílové skupiny. I **cíl 3** tak byl splněn, při čemž podrobnosti o průběhu a výsledcích řešení tohoto úkolu jsou uvedeny níže v části **A** této zprávy (**Průběh výběru a základní implementace systému elektronických laboratorních záznamů**).

## A. Průběh výběru a základní implementace systému elektronických laboratorních záznamů

### A1. Výběr elektronického laboratorního záznamníku vhodného pro výuku na VŠCHT Praha

V první fázi řešení této části projektu byla pracovníky LICH vypracována rešerše na téma ELN, která se zabývala jak problematikou ELN obecně, tak přehledem jednotlivých dostupných řešení, včetně informací o jejich výrobcích, podporovaných platformách, obvyklé ceně, zaměření a vhodnosti pro různé obory zastoupené v projektu modulárních laboratoří. Vzhledem k povaze projektu bylo zřejmé, že nelze použít program s úzkým zaměřením na jediný obor. Pro výběr optimálního elektronického záznamníku (deníku – electronic laboratory notebook – ELN) byly ve spolupráci LICH, ÚAN, ÚACH, ÚOCH, ÚBM a ÚFCH zformulovány požadavky, vycházející z nároků jednotlivých klíčových laboratorních modulů (analytická chemie, anorganická chemie, biochemie, fyzikální chemie a organická chemie) s možností dalšího rozšíření do jiných modulů (fyzika a měřicí technika, chemické inženýrství). Finančně nákladný produkt je žádoucí využít nejen v modulárních laboratořích, určených pro studenty magisterských programů, ale i v dalších oblastech výuky na VŠCHT Praha, a to jak výběrově v bakalářském, tak doktorském studiu. Výhledově je třeba uvažovat i rozšíření produktu do oblasti celoživotního vzdělávání, neboť využití ELN se v komerčních laboratořích dynamicky rozvíjí. Zvážena byla i kritéria počítačového řešení ELN, finanční náležitosti a lhůty pro dodání a základní implementaci. Dopisem (viz **část C** - příloha 2) bylo osloveno 11 firem – producentů ELN, a to Tripos, Contur, ensoSoftware, Symyx IntelliChem, KLEE GROUP, Infotrieve Europe, ID Business Solutions, EKM, Elsevier MDL, Waters, CambridgeSoft. Dvě společnosti oficiálně odmítly účast ve výběrovém řízení, šest firem zaslalo své nabídky, z nichž jedna dodala demonstrační CD (ensoSoftware) a pět společností (CambridgeSoft, Contur, Elsevier MDL, Tripos a Waters) se účastnilo dvoudenního semináře „**Elektronický laboratorní notebook a management elektronických informací**“ (4. – 5. dubna 2006), organizovaného Pražským analytickým centrem inovací (PACI), kde prezentovaly své produkty z pohledu jejich funkcionalit, uživatelského a administrátorského rozhraní. Tohoto semináře se zúčastnili mimo jiné hodnotitelé nabídek z pěti pracovišť účastnících se tohoto projektu (ÚAN, ÚACH, ÚOCH, ÚBM a LICH) a Výpočetního centra VŠCHT Praha, do jehož správy byl svěřen ELN server a jeho systémová administrace. Na semináři vystoupili přední odborníci v oblasti ELN, a to Dr. John Trigg (Automation and Analytical Management Group, Royal Society of Chemistry, London / phaseFour Informatics) a Prof. Antony N. Davies (University of Glamorgan, UK / Informatics Consultant Dortmund, Germany), kteří účastníky seznámily s obecnými principy vlastností ELN systémů, s příležitostmi a riziky jejich implementace a praktického využití v komerční i akademické sféře. Až po semináři dne 6. dubna 2006 byly otevřeny obálky s nabídkami, které byly následně poskytnuty všem hodnotitelům z pěti řešitelských pracovišť a výpočetního centra (VC). Dne 12. dubna 2006 proběhla schůzka pracovní skupiny pro implementaci ELN, kde bylo rozhodnuto, že všichni hodnotitelé vyplní hodnotící tabulku do 18.4. 2006. Dne 21.4. 2006 byl vypracován zápis ze zhodnocení nabídek, který byl podepsán všemi jedenácti hodnotiteli. Nejlépe hodnocena byla nabídka firmy Waters (průměrná známka 1,5), na druhém místě se umístila nabídka firmy Contur – varianta jmenovitých licencí (průměrná známka 2,8), na třetím místě s průměrnou klasifikací 3,8 se umístila nabídka CambridgeSoft – varianta Ultra Desktop. Téhož dne bylo provedeno rozhodnutí o přidělení malé veřejné zakázky na software firmě WATERS GmbH – organizační složka Praha. Ve spolupráci Ing. Marka Exnera (Waters), řešitele projektu (Doc. Pavla Matějky) a kvestora VŠCHT Praha Ing.

Tomáše Kopřivy byla vypracována kupní smlouva, kterou pak za stranu kupující podepsal rektor VŠCHT Praha Prof. Ing. Vlastimil Růžička, CSc. V souladu s doporučeními firmy Waters a po konzultacích s pracovníky VC byl objednán od firmy Dell odpovídající server (PowerEdge 1850 se dvěma Intel Xeon procesory 3.4 GHz a RAM 4GB – 130 900,-Kč) pro instalaci ELN. Ve dnech 27. až 30. června 2006 proběhla pracovníky firmy Waters instalace software na serveru, na několika klientských počítačích, byla provedena základní konfigurace systému, nastavení agentů a základní zaškolení administrátorů a klíčových uživatelů, a to za účasti pracovníků VC, ÚAN, ÚACH, ÚBM a LICH. Zaškolení pracovníci jsou schopni spravovat server, provádět administraci systému ELN, instalovat klientský software a přizpůsobovat systém podmínkám na VŠCHT Praha při dostupné systémové podpoře ze strany firmy Waters, a to především e-mailovou komunikací. Cena ELN software zahrnující ELN Application Server V3.0; ELN Named User – 20, ELN Structure Search; ELN Enhanced Search; ELN Spectral Search, základní maintenance poplatky, instalační, školicí a konzultační servis činila 1, 477 mil. Kč. Pořízených dvaceti uživatelských jmen pro uvedený produkt umožňuje, aby na jedno uživatelské jméno bylo zároveň přihlášeno libovolné množství konkrétních uživatelů, používajících jeden účet (limitace je dána pouze hardwarovými možnostmi a kapacitou sítě z hlediska komunikace mezi klientskými počítači a serverem). Při výuce v počítačové učebně, tak vystačí pro všechny současně vyučované studenty jeden účet, stejně jako pro zpracování protokolů u jedné vyučované laboratorní úlohy. Účty tak byly dedikovány na jednotlivá zúčastněná pracoviště, resp. na jednotlivé moduly (tématiky). Původně formulovaný požadavek na zajištění 25 současně pracujících uživatelů, tím byl evidentně naplněn a překročen. V případě potřeby dalšího rozšíření počtu uživatelských jmen bude možné dokoupit pouze licence bez zásahu do činnosti serveru i již instalovaného klientského softwaru.

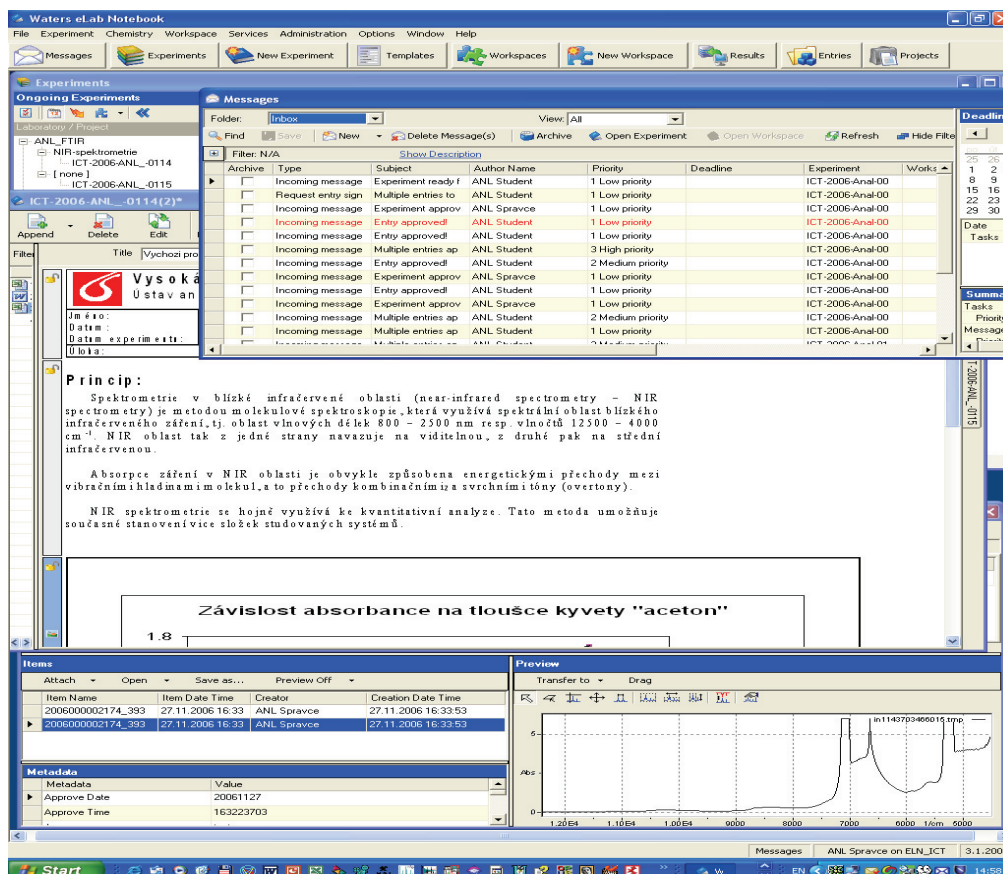
## A2. Základní implementace systému elektronického laboratorního deníku

Po výše uvedeném výběru a základní instalaci systému byla zahájena vlastní implementace ELN do výuky na VŠCHT Praha. Byly zřízeny uživatelské účty pro VC, studenty, vyučující a lokální administrátory na ÚAN, ÚACH, ÚOCH, ÚBM a LICH. Během měsíců července a srpna byla provedena instalace klientského software v posluchačských laboratořích na ÚAN a ve spolupráci ÚAN, VC a LICH byl ELN klient zahrnut do standardního balíku software dostupného na všech počítačích v počítačových učebnách VŠCHT spravovaných centrálně výpočetním centrem. LICH se pak významně podílela na implementaci ELN systému a jeho zkušebním zařazení do výuky studentů. LICH zakomponovala ELN do výuky celoškolského předmětu *Chemická informatika*, který laboratoř zajišťuje. Seznámení studentů s tímto systémem již ve druhém ročníku, v rámci povinného (pro většinu studentů VŠCHT) předmětu, by mělo studentům i pedagogům usnadnit práci s ELN v rámci připravovaných modulárních laboratoří. Zároveň připraví studenty na možnost, že se s podobným systémem setkají v praxi. V rámci pilotního programu byli se systémem ELN seznámeni studenti bakalářského oboru *Informatika a chemie* a tři vybrané kruhy dalších oborů v rámci předmětu *Chemická informatika*, a to napříč fakultami VŠCHT. Od letního semestru 2007 bude základní instruktáž v práci s ELN standardní součástí výuky *Chemické informatiky* pro všechny vyučované kruhy studentů napříč všemi fakultami VŠCHT. Na ÚAN byla připravena základní sada „entries“ nutných pro laboratorní protokoly, byl připraven formát hlavičky protokolů a dalších základních součástí – princip úlohy, pracovní postup, výpočty, vložená spektra či obrazové soubory, závěr. Tvorba protokolu v prostředí ELN byla testována v zimním semestru 2006/07 při výuce úlohy „*Spektrometrie v blízké infračervené oblasti*“ v rámci předmětu *Laboratoře z analytické chemie II*, čímž byly připraveny podmínky pro využití ELN v modulu **Metody molekulové spektrometrie**. Na základě získaných zkušeností

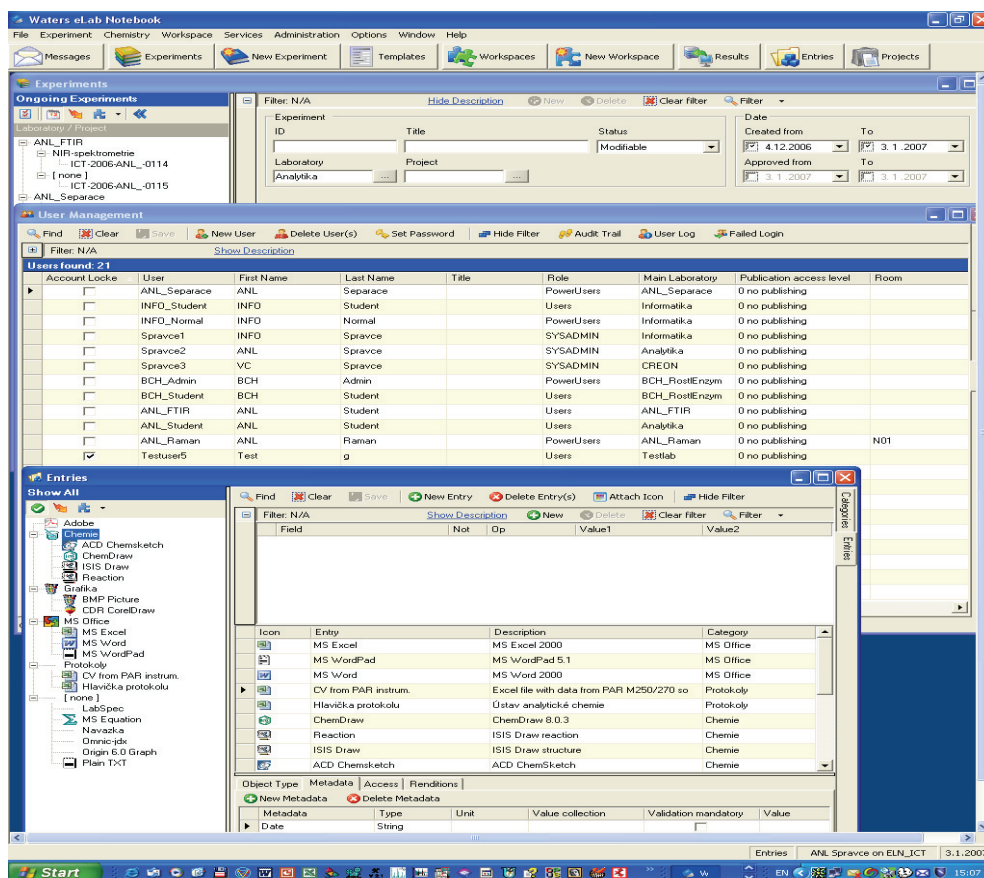
a dosavadních pilotních projektů se předpokládá brzké využití ELN v dalších modulech na ÚAN, ÚACH a ÚBM, kde v současné době probíhá testovací provoz. Další využití pak bude zřejmě následovat na ÚOCH a ÚFCH. Pořízený systém ELN přitom umožňuje nejen samotnou tvorbu elektronických laboratorních protokolů, ale i elektronický systém jejich předávání vyučujícím, možnosti elektronického vrácení protokolu k přepracování, zamítnutí či akceptaci protokolu, systém elektronických podpisů a dlouhodobé archivace s vyloučením dodatečných úprav, a tím i s vyloučením možnosti falšování protokolů. Systém obsahuje stechiometrický modul, užitečný pro práce zaměřené na chemickou syntézu, komunikuje s databázovým systémem, vhodným pro archivaci spektroskopických a chromatografických dat, což rozšiřuje možnosti ELN v oblasti chemické analýzy, podporuje nejen textové, ale i strukturní či spektrální vyhledávání. Další optimalizace využití systému je možná s využitím dodaného SDK (software development kit) a Excel Metadata AddIn utilitou. Pro eliminaci rizika ztráty dat na ELN serveru (pracujícím v prostředí OS Windows server a databázovým software Oracle 10g (10.1.0.4) Server Enterprise Edition) byl dodatečně pořízen back-up software (cca 28 tis. Kč) pro Oracle databázi v prostředí Windows, který byl nakonfigurován pracovníky VC po konzultaci se systémovou podporou firmy Waters. Pro zajištění výuky ELN, školení vyučujících, asistentů a doktorandů byl pořízen datový projektor Epson EMP-755 (cca 44 tis. Kč) a notebook Dell Latitude D620 (39,5 tis. Kč).

Ve dnech 29. 11. a 1. 12. 2006 proběhly ve spolupráci s projektem PACI a firmou Waters dva celodenní semináře věnované tématu ELN včetně praktické ukázky a krátkých praktických cvičení – účastníci semináře (jak z VŠCHT, tak externí) si vyzkoušeli samostatně vytvořit v prostředí ELN laboratorní protokol podle konkrétního zadání. Seminářů se mimo jiné zúčastnili doktorandi a odborní asistenti z ústavů zúčastněných na tomto projektu, kteří se účastní příprav laboratorních úloh v jednotlivých modulech. Nabyté znalosti tak využijí při implementaci ELN do vhodných laboratorních modulů. Na leden 2007 (zkouškové období) je naplánován krátký, prakticky orientovaný seminář pro zájemce z širších řad zaměstnanců a doktorandů školy, který by měl sloužit k jejich seznámení se systémem ELN a napomoci tak dalšímu rozšíření jeho používání ve výuce širší škály především laboratorních předmětů. Dosud je na tento seminář přihlášeno více než 20 zájemců.

**Cíle projektu tak byly v této oblasti naplněny a předpokládáme, že v dalších letech bude pokračovat aplikace této moderní a progresivní formy vedení laboratorních záznamů v posluchačských laboratořích VŠCHT Praha.**



Obr. A2-1: Klientské rozhraní ELN – okno protokolu, zpráv a spektrálního vstupu



Obr. A2-2: Klientské rozhraní ELN – okno správy uživatelů a entries



## B. Průběh přípravy jednotlivých modulů

### B1. Moduly připravované Ústavem analytické chemie

#### 1.1. Metody molekulové spektrometrie

Přehled navrhovaných a připravovaných úloh, resp. témat, z nichž budou voleny tři jednodenní práce podle složení skupiny posluchačů a aktuálních možností pracoviště:

- a) Spektrometrie ve střední a blízké infračervené oblasti
  - Identifikace látek a strukturní analýza
  - Kvantitativní analýza
- b) NMR spektrometrie
  - Identifikace látek
  - Strukturní analýza
- c) Ramanova spektrometrie
  - Identifikace látek
  - Povrchová analýza
- d) Fluorimetrie a spektrofluorimetrie
  - závislost intenzity fluorescence na pH
  - fluorimetrické stanovení chininu v nápojích
  - ověření činnosti spektrofluorimetru a záznam excitačních a emisních spekter
  - stanovení kyseliny acetylsalicylové v tabletovině farmaceutického preparátu

Úlohy tohoto modulu lze rozdělit do dvou zaměření, a to na úlohy strukturní analýzy a identifikace (organických) analytů, a dále na úlohy kvantitativní (vícesložkové) analýzy. Některé úlohy obou zaměření jsou koncipovány jako práce úlohy základní obtížnosti, další úlohy jsou středně pokročilé. U některých úloh bude možné volit typy analytů podle odborného zaměření studentů. V roce 2006 probíhalo testování a optimalizace náplně jednotlivých úloh modulu. Nejvíce pozornosti bylo věnováno nově rozvíjené problematice spektrometrie v blízké infračervené oblasti, kde se jednalo o zajištění variability obtížnosti připravovaných úloh.

##### 1.1.1. Nově připravovaná tematika - Kvantitativní spektrometrie v blízké a střední infračervené oblasti

V roce 2004 byla zahájena příprava zcela nové tematiky, a to úlohy věnované ***Kvantitativní spektrometrie v blízké a střední infračervené oblasti***. V roce 2005 probíhalo testování a ověřování jak obsahové náplně, tak časového rozsahu pokročilejší úlohy v rámci výuky předmětu „Laboratoř oboru II“, určeného pro studenty 4. ročníku zaměření „Analytická chemie“ studijního oboru „Technická fyzikální a analytická chemie“. Úloha přitom byla řešena ve dvou dnech a zahrnovala vícesložkovou analýzu v neperlivých nealkoholických i alkoholických nápojích. V roce 2006 byla testována jednodušší a časově méně náročná (jednodenní) varianta úlohy, zaměřená na stanovení cukru v nealkoholických nápojích s pozorností soustředěnou na vývoj a ověření kalibračního modelu. Zároveň byla u této úlohy zkoušena možnost využití ELN softwaru pro zápis laboratorních protokolů a jejich elektronické předání vyučujícímu v rámci ELN systému. V rámci toho byly nejprve nastaveny příslušné „entries“ a byl vytvořen demonstrační protokol, který lze „klonovat“. Dále byla zpracována výchozí verze návodu k této úloze (viz přílohy v **části C** této zprávy). K úloze vybavené čtyřmi počítači byly dopořizeny kabely a drobné počítačové příslušenství a materiál (cca 1 700 Kč).

### 1.2. Separační a elektromigrační metody

Přehled navrhovaných a připravovaných úloh, resp. témat, z nichž budou voleny tři jednodenní práce podle složení skupiny posluchačů a aktuálních možností:

- a) Plynová chromatografie
- b) Kapalinová chromatografie
- c) Iontově výměnná chromatografie
- d) Kapilární izotachoforéza
- e) Kapilární elektroforéza

V roce 2006 pokračovala příprava a testování jednotlivých úloh, ověřována byla časová náročnost jednotlivých prací. Pro testování úloh byla pořízena rozpouštědla (cca 900 Kč).

### 1.3. Prvková analýza

Přehled navrhovaných a připravovaných úloh, resp. témat, z nichž budou voleny tři jednodenní práce podle složení skupiny posluchačů a aktuálních možností:

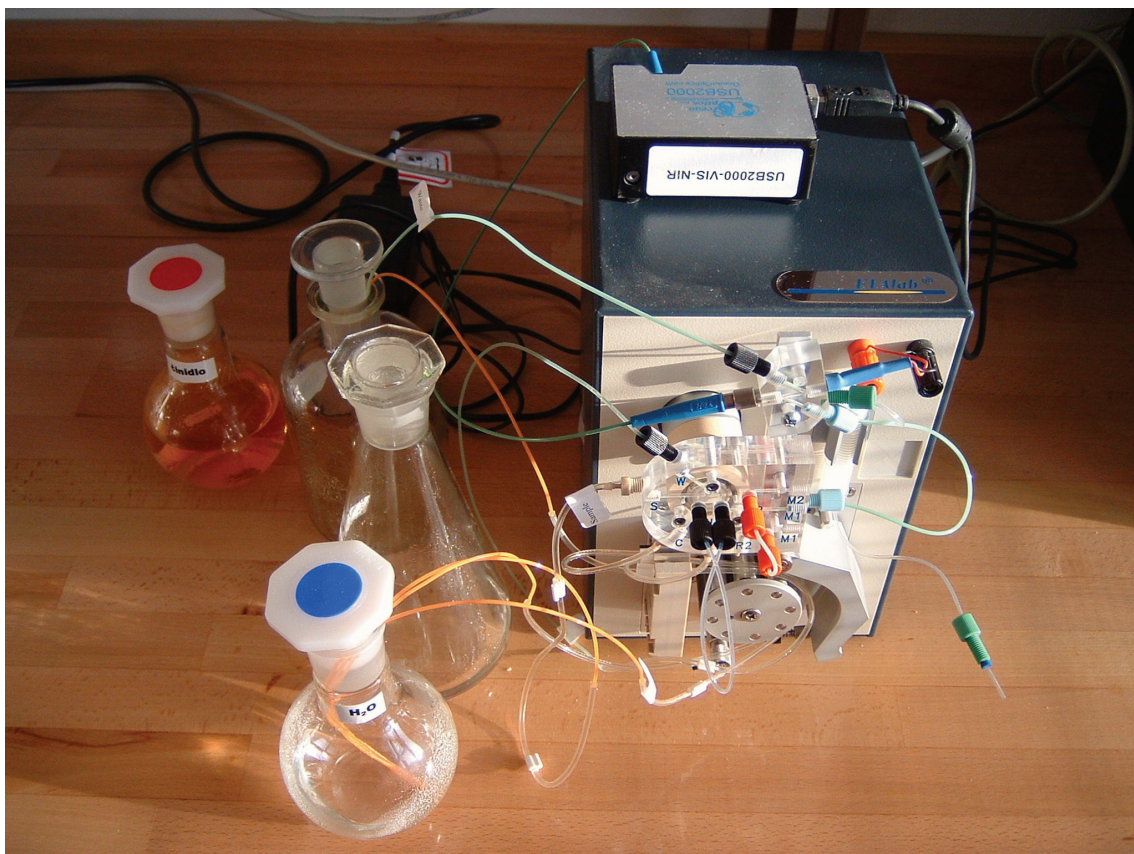
- a) Atomová absorpční spektrometrie
- b) Optická emisní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem
- c) Rentgenová fluorescenční analýza
- d) Gama spektrometrie
- e) Průtoková vstřikovací analýza
- f) Coulometrie

V roce 2006 pokračovala optimalizace náplně jednotlivých úloh, testování kapacitních možností jednotlivých prací v souvislosti s časovým rozsahem jednotlivých připravovaných úloh. Hlavní pozornost byla věnována modernizované úloze z průtokové vstřikovací analýzy, u které je třeba zvýšit její kapacitu, tak aby byla kompatibilní s dalšími úlohami modulu.

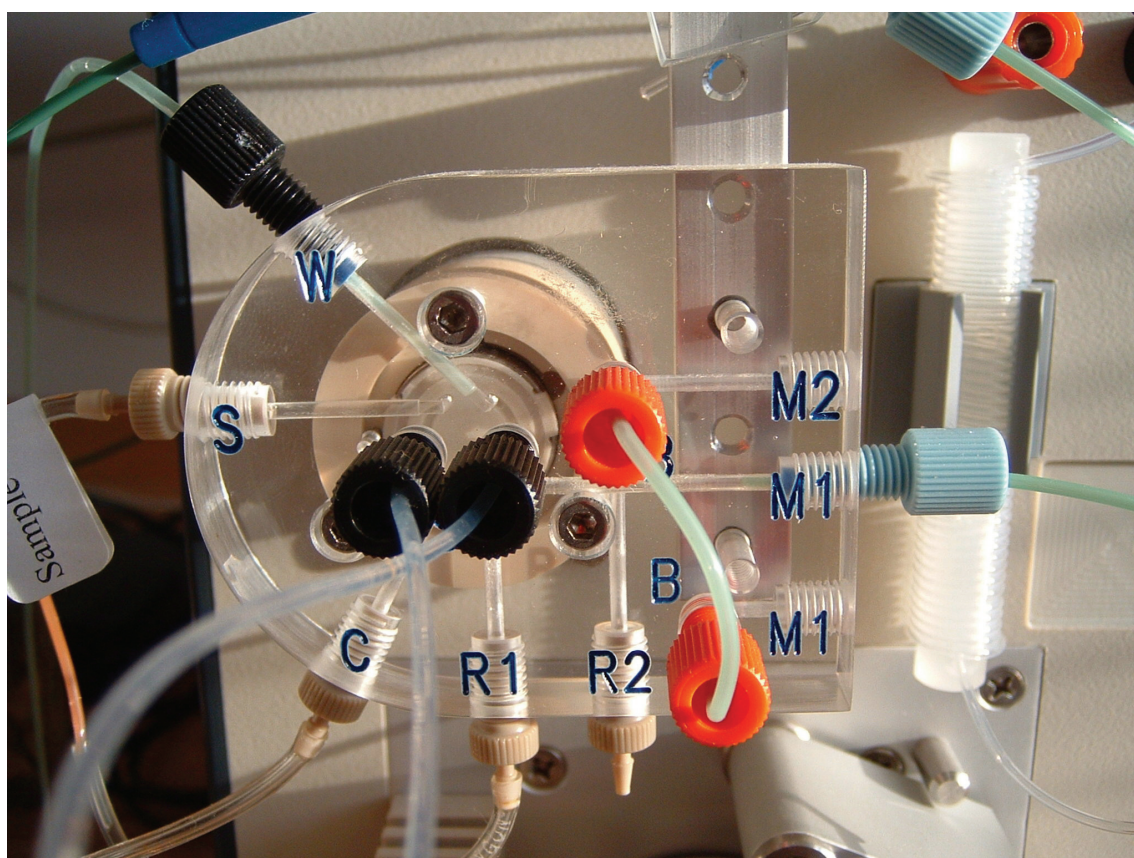
#### 1.3.1. Modernizovaná úloha - Průtoková vstřikovací analýza

Na základě zkušeností získaných v roce 2005 bylo na rok 2006 plánováno zvýšení kapacity a rozšíření možností tématické náplně této úlohy pořízením ještě jednoho manuálně ovládaného systému FIALab 2000 za cca 120 tis. Kč, který je didakticky velmi vhodný na seznámení se základními principy průtokové vstřikovací analýzy. Bohužel na vznesený požadavek výrobce odpověděl, že výrobu manuálně ovládaného systému FIALab 2000 z důvodů nerentability ukončil.

Jako náhradní řešení byl pořízen automatizovaný FIA systém FIALab-2500 (obr. 1.1), se čtyřkanálovým peristaltickým čerpadlem, šesticestným vstřikovacím ventilem (obr. 1.2), hadičkami a dalším příslušenstvím, ovládaný softwarem FIALab for Windows. Součástí pořízené sestavy je i 1-cm průtočná cela, širokopásmový světelný zdroj (440 – 700 nm) a spektrometr Ocean Optics připojený pomocí vláknové optiky, jehož cena i po speciální slevě přesahovala možnosti dané rozpočtem tohoto projektu, takže z tohoto projektu bylo využito 170 tis. Kč kapitálových prostředků, zbytek byl uhrazen z prostředků ÚAN. K úloze z průtokové vstřikovací analýzy byl dále dokoupen počítač pro řízení a vyhodnocování experimentů (PC sestava HP dc 7600 včetně monitoru – cca 36 tis. Kč).



Obr. 1.1: Systém FIALab 2500



Obr. 1.2: Detail šesticestného ventilu

## B2. Moduly připravované Ústavem anorganické chemie

### 2.1. Reakce v pevné fázi

V rámci modulu **Reakce v pevné fázi** byly připravovány následující práce:

- a) Příprava feromagnetického oxidu  $\text{La}_{0,7}\text{Sr}_{0,3}\text{MnO}_3$ 
  - mechanismus a provedení reakce v pevné fázi, charakterizace vlastností připravených látek pomocí magnetu
- b) Příprava vysokoteplotního supravodiče  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$  reakcí v pevné fázi
  - klasická reakce v pevné fázi
- c) Příprava supravodiče  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$  z prekursoru získaného metodou sol-gel
  - cílem je dosáhnout maximální homogenity a co nejmenší velikosti částic
- d) Příprava pigmentové titanové běloby
  - vliv podmínek přípravy na změnu optických parametrů kalcinátu titanové běloby rutilového typu (vliv teploty kalcinace, vliv různého obsahu rutilových zárodků, vliv různých iontů)
- e) Planární optické vlnovody ve skleněných podložkách
  - příprava tenké vrstvy ve skleněné podložce, která vede světlo, tedy planárního optického vlnovodu požadovaných vlastností

Předpokládáme návrh 3-6 konkrétních laboratorních úloh, ze kterých bude pro daný den odborným asistentem vybrána vždy jedna úloha. Student bude pak postupovat podle podrobného návodu. Ve všech těchto úlohách student **připraví vlnovod iontovou výměnou**, tj. připraví podložku - substrát vhodné velikosti a vyčistí jeho povrch na polovodičovou čistotu ve vhodných rozpouštědlech a ultrazvukové pračce. Dále naváží a promíchá taveninu pro iontovou výměnu a po jejím roztavení při dané teplotě provede iontovou výměnu. Po ukončení vzorek vyjme z taveniny, která bude vylita do sběrné nádoby, očistí jej a osuší. Dále pak vzorek **samostatně proměří metodou jednohranové vidové spektroskopie a získaná experimentální data zpracuje** programem PLANPROF. Ve výsledcích se tedy vždy objeví hloubkový profil indexu lomu.

Vzhledem k tomu, že reakce v pevné fázi vyžadují dlouhé doby tepelného zpracování, byly do tohoto modulu zařazena práce (e), která vyplní dobu, kdy budou vzorky (práce a, b) kalcinovány nebo sintrovány.

Návody na základní práce (a, b) byly uvedeny ve zprávě z roku 2005, zbývající návody jsou v přílohách (**část C** této zprávy).

Rozsah prací v tomto modulu bude upraven podle počtu přihlášených studentů a kapacity laboratoře, kde bude práce prováděna (kapacita 5-10 studentů, opakování 4x během semestru).

**Čerpání finančních prostředků:** Xe lampy (24 000,- Kč), zdroj (6 900,- Kč), chemikálie (9 000,- Kč), drobný materiál (4 000,- Kč)

### 2.2. Preparační řady (bezodpadová technologie)

Náplň modulu tvoří preparativní přípravy, které vyžadují určitou experimentální rutinu při jejich provádění (sloučeniny s oxidačními účinky nebo citlivé na podmínky přípravy – viz přílohy v **části C** této zprávy). Práce jsou navrženy tak, aby byly minimalizovány chemické odpady a jsou doplněny kvalitativními reakcemi příslušných prvků a sloučenin. Většina návodů na tyto práce je ve skriptu „Návody pro laboratoře z anorganické chemie“, další dostanou studenti přímo v laboratoři.

Kapacita laboratoře pro tento modul je minimálně osm studentů, a modul lze zopakovat 4x během semestru.



### 2.3. Komplexní sloučeniny

V rámci modulu **Komplexní sloučeniny** byly připravovány následující práce:

- Příprava *cis*- a *trans*- izomerů chloridu dichloro-bis(ethylendiamin)kobaltitého
- Barevnost komplexů přechodných kovů
- Charakteristika elektronového uspořádání komplexu  $[\text{Fe}(\text{bpy})_3][\text{BF}_6]$

Kapacita laboratoře pro tento modul je cca 2-3 studenti, a modul lze zopakovat 4x během semestru.

**Čerpání finančních prostředků:** odborná literatura: Shriver – „*Inorganic Chemistry*“, Salomon – „*Inorganic Electronic Structure and Spectroscopy*“ (2 díly) (*The f-elements, Descriptive Inorganic Chemistry*), celkem 10 000,- Kč.

### 2.4. Likvidace odpadů

V rámci modulu byly připravovány následující práce:

Likvidace odpadních vod z výrob traskavin (každá skupina likviduje dvě vybrané odpadní vody).

- likvidace azidu olovnatého
- likvidace trinitrorezorcinátu olovnatého
- likvidace pikraminátu olovnatého

Příprava modelových roztoků odpadních vod

- stanovení koncentrace aniontu (manganometrie, oxidimetrie obecně)
- stanovení koncentrace kationtu (chelometrie olova)

Testování různých metod na likvidaci aniontové i kationtové části traskaviny – sestavení aparatury.

- likvidace dusitanem sodným
- likvidace manganistanem draselným
- likvidace dichromanem popř. bromičnanem sodným
- případná likvidace pomocí UV záření a fotoaktivního  $\text{TiO}_2$ .

Likvidace reálné odpadní vody, sestavení a vyčíslení reakčních schémat, celková bilance spotřeby činidel na likvidaci denní produkce příslušné odpadní vody o známé koncentraci a množství.

Všechny metody byly laboratorně otestovány (návodů existují) a vybrané jsou používány při reálné likvidaci odpadních vod z výroby.

Kapacita laboratoře pro tento modul je 6 studentů, a modul lze zopakovat 4x během semestru.

## B3. Moduly připravované Ústavem biochemie a mikrobiologie

Náplň navrhovaných modulů vychází ze současné situace, kdy jsou laboratoře z biochemie a to jak základní tak i další navazující pokročilé kursy zařazeny pouze ve studijních programech Fakulty potravinářské a biochemické technologie, na ostatních fakultách se realizují přednášky z biochemie bez praktických cvičení. Vzhledem k tomu, že současný trend výzkumu vede k tomu, že i ostatní chemické obory velmi často zkoumají biologické systémy, je zcela zřejmé, že je třeba studentům zejména navazujících magisterských studijních programů ostatních fakult nabídnout možnost seznámit se se základními biochemickými technikami.

Moduly zahrnují základní biochemické postupy, jejich cílem je seznámit studenty se specifikou práce s biologicky aktivními biopolymery, jejich izolací a charakterizací. Náplní jednotlivých úloh jsou základní postupy používané v biochemické laboratoři.

V roce 2006 probíhalo dovybavení laboratoří a testování úloh. Kapitálové prostředky proto byly využity k nákupu sady počítače a dataprojektoru s příslušenství (74 941 Kč), která slouží pro výuku v laboratořích, pro presentaci metodických postupů a objasnění principů laboratorních úloh. Výdaje na materiál (celkem 53 tis. Kč) byly použity na nákup standardních roztoků pro kalibraci pH metru, chemikálií pro přípravu roztoků na SDS elektroforesu v polyakrylamidovém gelu. Byla také zakoupena sada automatických pipet jako nezbytné vybavení pro všechny biochemické laboratorní úlohy. V neposlední řadě byl pořízen program Kaleidagraph, který je využíván v souvislosti s implementací ELN (viz kap. A2).

### 3.1. Základní biochemické metody

Do tohoto modulu byly zařazeny tři úlohy v nichž se studenti seznámí s problematikou studia enzymů, základní separační technikou používanou v biochemickém výzkumu a principem imunochemických technik:

1. Studium enzymové kinetiky – stanovení kinetických parametrů a vlastností trypsinu
2. Dělení biopolymerů gelovou permeační chromatografií
3. Základní imunoprecipitační techniky

**kapacita laboratoře:** 12 studentů

**rozsah:** 3 x 7h

**počet opakování během semestru** = 4, takže celková kapacita v semestru je 48 studentů

#### 1. Studium enzymové kinetiky – stanovení kinetických parametrů a vlastností trypsinu

Trypsin (EC 3.4.21.4) je proteasa štěpící preferenčně peptidové vazby v molekulách peptidů a bílkovin, na nichž se svou  $\alpha$ -karboxylovou skupinou podílejí bazické aminokyseliny arginin a lysin. Jako substrát ke stanovení aktivity trypsinu se běžně používají přirozené bílkoviny (kasein, hemoglobin, albumin) nebo tzv. chromogenní substráty. To jsou vhodně chemicky upravené substráty, z nichž enzym odštěpuje barevný produkt. Substrát je přitom buď nerozpustný (suspenze) nebo bezbarvý. Rychlost změny absorbance reakčního roztoku je tedy odrazem změny koncentrace produktu a tudíž aktivity enzymu. Takovým chromogenním substrátem pro trypsin je např.  $N_\alpha$ -benzoyl-D,L-arginin-p-nitroanilid, BAPA. Z tohoto bezbarvého substrátu je účinkem trypsinu odštěpován žlutý p-nitroanilin.

Schopnost enzymů přeměňovat substrát závisí na pH, protože stupeň protonace disociovatelných skupin v aktivním místě molekuly enzymu je závislý na koncentraci vodíkových iontů. Stanovení optimální hodnoty pH je jednou ze základních charakteristik každého enzymu.

Stejně tak je pro enzymy charakteristická optimální teplota; průběh závislosti aktivity enzymu na teplotě je dán dvěma protichůdnými jevy: zvyšování enzymové aktivity a současně zvyšování stupně denaturačních změn v molekule enzymu s rostoucí teplotou vede ke „zvonovitému“ tvaru křivky.

Kinetické parametry enzymu, Michaelisovu konstantu ( $K_m$ ) a limitní rychlost ( $V_{lim}$ ) lze určit změřením rychlosti hydrolýzy substrátu (BAPA) při různých počátečních koncentracích substrátu. Michaeliova konstanta vyjadřuje míru afinity enzymu k danému substrátu.

## 2. Dělení biopolymerů gelovou permeační chromatografií

Gelová permeační chromatografie, též gelová chromatografie, gelová filtrace nebo chromatografie na principu molekulového síta, je metoda, při které se separují molekuly podle své velikosti a tvaru. Jde o typ rozdělovací chromatografie v systému kapalina - kapalina, kde stacionární fází je kapalina, zakotvená v gelu (inertní polymerní biokompatibilní nosič), čímž je zajištěna nemísitelnost s mobilní fází. Stejná kapalina pak tvoří mobilní fází protékající mezi částicemi gelu. Částice gelu mají kulovitý tvar a obsahují póry o známé průměrné velikosti. Separace složek směsi je tedy dána schopností separovaných molekul procházet póry stacionární fáze. Jednotlivé molekuly jsou zpomalovány úměrně své schopnosti prostupovat částicemi gelu.

## 3. Základní imunoprecipitační techniky

Podstatou všech imunochemických metod je interakce mezi antigenem a protilátkou *in vitro*. Imunochemické metody využívají interakce antigenu se specifickými protilátkami za tvorby imunokomplexu antigen-protilátka-antigen. Možnosti stanovení nebo detekce takového komplexu se odvíjejí od charakteru a koncentrace obou reaktantů, a od prostředí, ve kterém se interakce uskutečňuje. Takové metody dovolují stanovovat protilátky nebo nejružnější antigeny (hapteny). Rozšiřují paletu analytických metod v řadě profesních oblastí. Obzvláště v lékařské chemii našly velké uplatnění a při stanovení některých analytů jsou prakticky nezastupitelné. Mezi jejich hlavní přednosti patří vysoká specifita interakce antigen - protilátka (protilátka váže pouze ten antigen, který vyprovokoval její vznik) a vysoká citlivost některých imunometod. Imunochemické metody lze rozdělit do dvou základních skupin podle toho, zda jsou založeny na vzniku precipitátu nebo pouze imunokomplexu. Nejjednodušší imunochemické metody využívají sekundárního jevu, který doprovází vznik imunokomplexu. Je jím vypadnutí imunokomplexu z roztoku v podobě viditelného precipitátu (imunoprecipitace).

### **3.2. Vlastnosti biopolymerů**

Modul v němž by se studenti měli seznámit s postupy izolace a separace biopolymerů (nukleové kyseliny a proteiny) a jejich základní charakterizace – stanovení koncentrace DNA a proteinů, a molekulové hmotnosti proteinů:

- 1.- 2. Izolace a charakterizace nukleových kyselin
3. Stanovení relativní molekulové hmotnosti bílkovin SDS PAGE

**kapacita:** 12 studentů,

**rozsah:** 3 x 7h

**počet opakování během semestru** = 4, takže celková kapacita v semestru je 48 studentů

#### 1.-2. Izolace a charakterizace nukleových kyselin

Dva typy nukleových kyselin - RNA a DNA - se vzájemně liší lokalizací v buňce, funkcí, strukturou i složením. Při izolaci nukleových kyselin z různých zdrojů se využívá centrifugace a srážení organickými rozpouštědly.

Základními složkami nukleových kyselin jsou dusíkaté báze, pentosy a kyselina fosforečná. Dusíkaté báze vykazují charakteristickou absorpci s maximem při 260 nm a minimem při 230 nm díky aromatickému systému. Absorpční spektra v UV oblasti jsou důležitou charakteristikou nukleových kyselin a lze z nich také usuzovat na stupeň znečištění preparátu proteiny.

### 3. Stanovení relativní molekulové hmotnosti bílkovin SDS PAGE

Elektromigrační metody patří mezi základní biochemické techniky sloužící jednak k separaci látek (především proteinů a nukleových kyselin) ale také k určení čistoty preparátů a k charakterizaci jednotlivých izolovaných biopolymerů.

Při elektroforéze se bílkoviny dělí podle náboje a velikosti svých molekul. Aniontový detergent dodecylsírán sodný (SDS) se váže na povrch proteinů, čímž je denaturuje a proteiny získávají podobný tvar a hustotu záporného náboje. Pomocí SDS - PAGE lze určit molekulovou hmotnost bílkovin srovnáním se standardy o známých molekulových hmotnostech. Přidá-li se ke vzorku bílkovin merkaptoethanol (dithiothreitol), který redukuje disulfidové vazby, je možno stanovit molekulovou hmotnost jednotlivých polypeptidových řetězců.

#### B4. Moduly připravované Ústavem fyzikální chemie

Ústav fyzikální chemie připravil v rámci řešení projektu celkem 4 moduly:

- **MikroDSC kalorimetrie**
- **DSC kalorimetrie**
- **Studium fázových rovnováh důležitých pro životní prostředí**
- **Elektrochemická měření**

Pro všechny 4 moduly:

**kapacita pracoviště:** 2-3 studenti, 6 studentů v případě modulu **Elektrochemická měření**

**rozsah:** 3 x 7h (3 laboratorní práce v každém modulu)

**počet opakování během semestru** = 4

#### 4.1. Moduly Kalorimetrie

Původně zamýšlený modul **Kalorimetrie** se stal tak rozsáhlým, navíc jsou k dispozici dva špičkové přístroje, takže se zdá být účelné, aby byl rozdělen na dva moduly: na modul **MikroDSC kalorimetrie** a modul **DSC kalorimetrie**. V prvním modulu bude využit mikrokolorimetr Setaram MicroDSC III zakoupený v rámci tohoto projektu (2004), ve druhém modulu pak DSC kalorimetr Thermal Analysis Q 1000 zakoupený dříve z jiných zdrojů.

V modulu **MikroDSC kalorimetrie** se v roce 2006 postupovalo s ohledem na návrat kalorimetru z opravy ve výrobním závodě ve Francii. Na přístroji byly zcela nově provedeny kalibrace teploty (gallium, naftalen, voda) a tepelného toku. Poté bylo přistoupeno k experimentům s biochemickými vzorky, konkrétně k experimentům k charakterizaci denaturace Ribonukleázy A a Lysozymu. Manipulace s biochemickými vzorky není jednoduchá, experiment vyžaduje celou řadu přípravných kroků. Za tímto účelem byly zakoupeny jednoduché pomůcky k provádění dialýzy vzorků (cca 8 tis. Kč).

V druhém modulu **DSC kalorimetrie** byly připraveny úlohy na téma kalibrace kalorimetru (teplota, tepelný tok) a dále praktické úlohy na stanovení tepelné kapacity, na studium fázových přechodů organických i anorganických látek. Dále ke zkoumání rovnováhy kapalina – tuhá fáze a tvorbu fázového *s-l* diagramu. Velmi praktickou úlohou je stanovení čistoty látek. Pro tento modul byly v roce 2007 z prostředků projektu zakoupeny pánve na vzorky (spotřební materiál – cca 13 tis. Kč). K úlohám byl vytvořen soubor návodů.



#### 4.2. Studium fázových rovnováh důležitých pro životní prostředí

Modul se sestává ze tří experimentálních prací, jejichž společným jmenovatelem je binární systém ethylacetát + voda. V první části bude zkoumána rovnováha kapalina – kapalina objemovou metodou. Studenti určí vzájemnou mísitelnost obou komponent studovaného systému při několika teplotách. Objemová metoda je jednoduchá, nevyžaduje složité zařízení. Ve druhé části bude stanoven limitní aktivitní koeficient ethylacetátu ve vodě metodou Inert gas stripping. Z této hodnoty budou určeny další charakteristiky dělení ethylacetátu mezi fáze životního prostředí, konkrétně vodu a vzduch, tj. rozdělovací koeficient voda-vzduch a Henryho konstanta. Ve třetí části bude stanoven limitní aktivitní koeficient vody ve ethylacetátu. Hodnoty limitních aktivitních koeficientů stanovené na obou koncích koncentračního intervalu umožní dále výpočet rovnováhy kapalina – pára v celém koncentračním intervalu, což je postup běžně užívaný v průmyslové praxi.

#### 4.3. Reakční kinetika

Tento modul je stále rozpracovaný. V roce 2006 byly na výstavbu tohoto modulu použity výhradně prostředky Ústavu fyzikální chemie.

#### 4.4. Elektrochemická měření

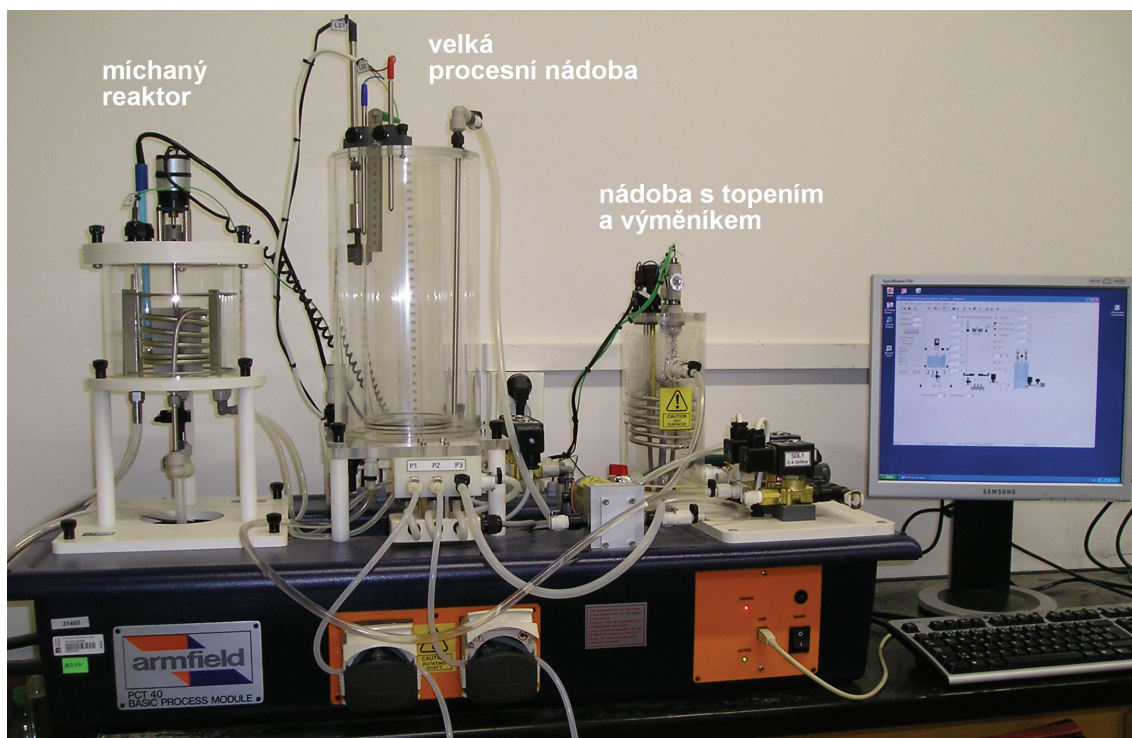
Navrženo měření vodivosti s následným určením disociačních konstant slabých elektrolytů a součinu rozpustnosti málo rozpustných solí. Za tímto účelem byly jednak vytipovány vhodné málo rozpustné anorganické soli a slabé organické kyseliny. Přístrojové vybavení bylo doplněno moderním konduktometrem firmy WTW (zakoupeným z prostředků Ústavu fyzikální chemie – cca 58 tis. Kč) s drobným příslušenstvím a vhodnou vodivostní elektrodou (pořízené z prostředků projektu – cca 18 tis. Kč).

Pro měření teplotní závislosti napětí článku byl zvolen jednoduchý Daniellův článek. Výhodou tohoto článku je, že se dá velmi jednoduše určit další termodynamická veličina, totiž reakční teplo reakce probíhající v tomto článku. Toto reakční teplo se změří v jednoduchém kalorimetru, který je k dispozici v posluchačských laboratořích ÚFCH. Stavební prvky Daniellova článku byly zakoupeny z prostředků Ústavu fyzikální chemie – cca 2 tis. Kč.

### B5. Moduly připravované Ústavem fyziky a měřicí techniky

#### 5.1. Provozní měření a řízení

Multifunkční systém od firmy ARMFIELD, určený pro výuku provozního měření a řízení byl dokončen a odzkoušen při výuce studentů stávajícího magisterského studia. Systém tvořený konstrukčními jednotkami PCT 40 a PCT 41 umožňuje výuku základních principů měření a řízení různých technologických procesů (obr.5.1).



**Obr. 5.1 Multifunkční systém pro výuku provozního měření a řízení**

Pro modulové laboratoře byla připravena náplň dvou laboratorních prací, u nichž se počítá s časovou dotací 7 výukových hodin pro každou práci. První laboratorní práce je věnována základnímu seznámení s multifunkčním systémem a podrobně se zabývá měřením a regulací hladiny ve velké procesní nádobě. Náplní druhé laboratorní práce je měření a regulace chemického složení média v míchavém reaktoru. V budoucnosti bude možno ještě zařadit laboratorní práci s tematikou měření a regulace teploty v malé nádobě s výměníkem.

### **5.1.1 Měření a regulace hladiny**

Laboratorní úlohy věnované měření a regulaci hladiny využívají velké procesní nádoby multifunkčního systému. Velká procesní nádoba představuje model provozní nádrže, která je opatřena potřebnými elementy pro připojení ovládacích ventilů a čerpadel pro přívod a odvod vody a je vybavena několika snímači pro měření polohy hladiny náplně (obr. 5.2).

Pro měření a regulaci polohy hladiny jsou k dispozici následující prvky:

- průhledové měřítko pro vizuální odečítání polohy hladiny,
- plovák mechanickým nastavením žádané polohy, vybavený magnetickým spínačem pro dvoupolohovou regulaci hladiny,
- stavitelné elektrody vodivostního snímače s nastavitelným pásmem necitlivosti,
- snímač hydrostatického tlaku ve dně nádoby, vybavený tenzometrickým snímačem s elektrickým analogovým signálem, úměrným výšce hladiny v nádobě.

V rámci první laboratorní práce se studenti seznámí s jednotlivými prvky multifunkční stanice, s její obsluhou, napojením na řídicí počítač i s příslušným softwarem pro snímání a ukládání naměřených dat. Stěžejní úkoly laboratorní práce pak souvisí s měřením a regulací hladiny ve velké procesní nádobě:

### Měření polohy hladiny a její regulace dvoupolohovým ventilem

- Dvoupolohová regulace hladiny s použitím plovákového snímače
- Řízení hladiny s využitím diferenčního vodivostního snímače

### Řízení polohy hladiny proporcionálním solenoidovým ventilem

- Manuální řízení hladiny proporcionálním solenoidovým ventilem
- Spojitá regulace hladiny s PID-regulátorem a proporcionálním ventilem:
  - nastavení PID-regulátoru,
  - řízení procesu PID-regulátorem při zadaném nastavení parametrů regulátoru
  - vliv působení poruchy způsobené otevřením výpustních ventilů
  - změna žádané hodnoty při zadaném nastavení konstant regulátoru
  - vliv nastavení konstant regulátoru na průběh regulace
  - optimální nastavení konstant regulátoru
  - řízení procesu s optimalizovaným PID-regulátorem



**Obr. 5.2 Velká procesní nádoba se snímači hladiny**

K laboratorní práci byly vypracovány potřebné učební texty, které tvoří dvě části.

Je to jednak úvodní text, který by měl student prostudovat před nástupem do laboratoře. V tomto textu se student seznámí s multifunkčním výukovým systémem a možnostmi jeho využití. Jsou zde i partie věnované popisu funkce snímačů využívaných k měření hladiny a základní poznatky související se skladbou a funkcí regulačního obvodu a funkcí spojitých a dvoupolohových regulátorů.

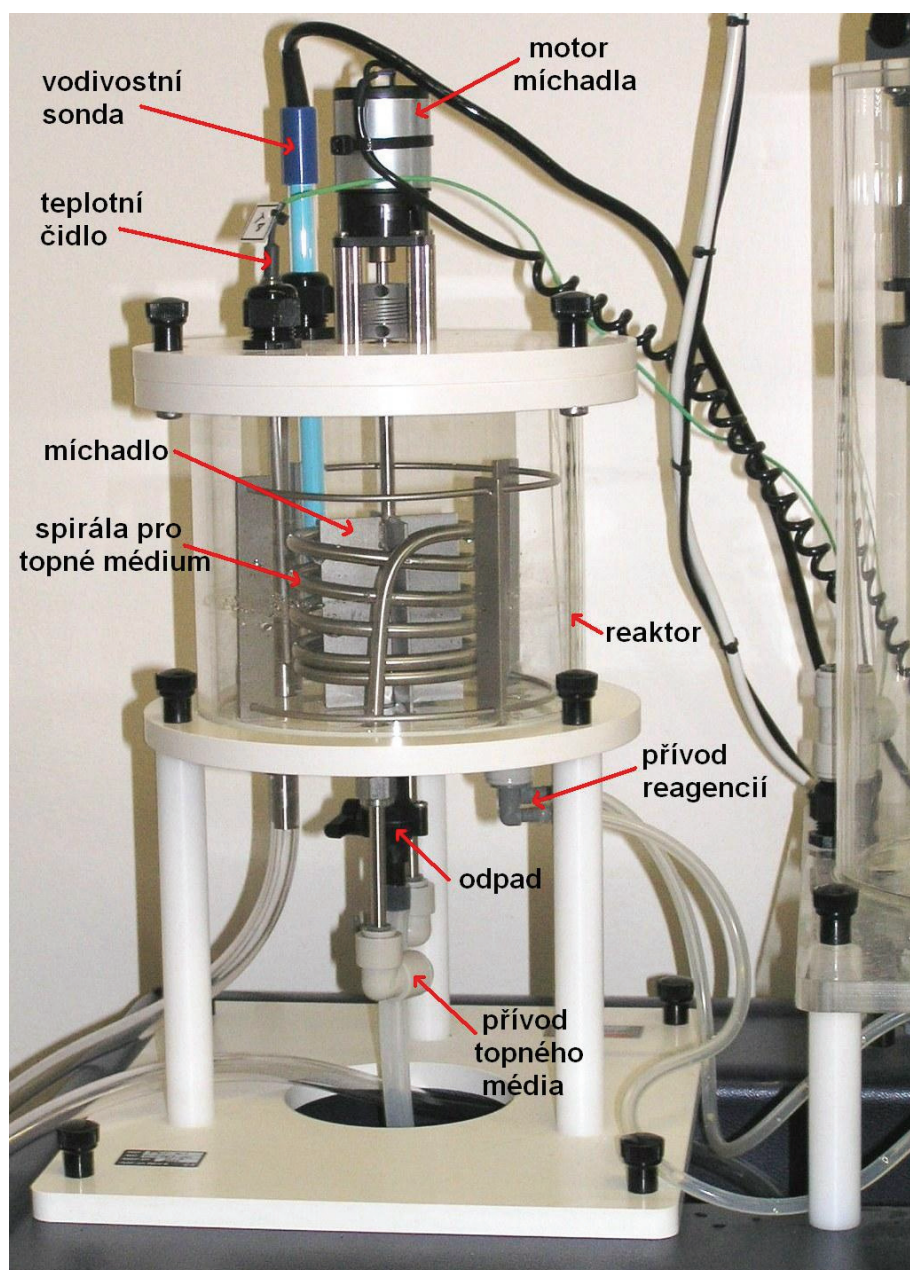
Druhý text je hlavním průvodcem studenta při vlastním laboratorním cvičení a tvoří jej podrobný návod pro obsluhu multifunkční stanice, obsahuje zadání jednotlivých laboratorních úloh, pokyny k jejich provedení a zpracování výsledků měření.

Oba textové dokumenty jsou uvedeny v samostatných přílohách (pdf soubory) a jsou k dispozici na internetu na adrese <http://www.vscht.cz/ufmt/kadleck.html>.



### 5.1.2 Měření a regulace složení

Laboratorní úlohy věnované měření a regulaci koncentrace využívají míchaný reaktor PCT 41 multifunkčního systému. Míchaný reaktor představuje model provozního reaktoru, který je opatřen potřebnými elementy pro připojení ovládacích ventilů a čerpadel pro přívod a odvod vody a roztoků, je vybaven rotačním míchadlem poháněným elektrickým motorkem a k dispozici jsou snímače pro měření teploty a koncentrace roztoku. Provedení modelu provozního reaktoru je patrné z obr. 5.3. Pro měření koncentrace média v reaktoru je možno využít buď snímač elektrické vodivosti média nebo snímač pH. S takto vybavenou laboratorní stanicí je možno realizovat úlohy, které modelují chování koncentračních směšovačů a chemických reaktorů v chemických a biotechnologických výroбах.



Obr. 5.3 Model reaktoru pro měření a regulaci složení náplně

Při laboratorním cvičení jsou zadávány následující úlohy:

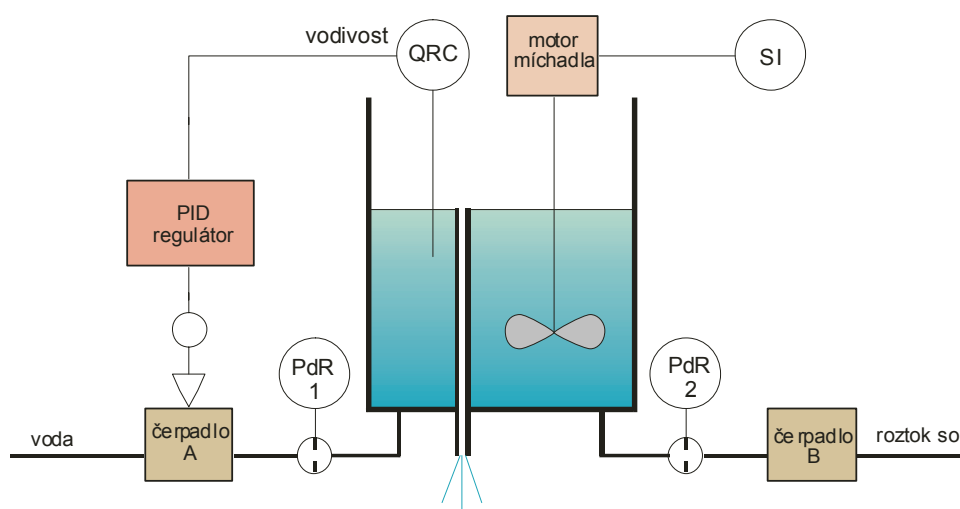
#### Identifikace regulované soustavy

- Teoretický popis statických a dynamických vlastností míchaného reaktoru jako regulované soustavy
- Experimentální stanovení statických a dynamických vlastností regulované soustavy

#### Regulace koncentrace v míchaném reaktoru

- Přímá zpětnovazební regulace s PID-regulátorem
- Optimalizace nastavení konstant PID-regulátoru

Schéma regulačního obvodu pro řízení složení média v míchaném reaktoru je na obr. 5.4



Obr. 5.4 Schéma regulačního obvodu

I k této laboratorní práci byl vypracován návod uvedený v samostatné příloze (pdf soubor). Na základě zkušeností a ověřování v laboratořích oboru budou v textu provedeny potřebné úpravy a text bude rovněž umístěn na internetu.

#### **5.1.3 Výsledky řešení a čerpání finančních prostředků v roce 2006**

- Byly zpracovány potřebné učební texty a podrobné návody k laboratorním pracím **Měření a regulace hladiny** a **Měření a regulace složení**. Úlohy věnované měření a regulaci hladiny byly zařazeny k ověření do programu laboratoří Měřicí a řídicí technika v magisterském studiu na FCHI. Úlohy zabývající se měřením složení byly zařazeny pro ověření do programu laboratoří k předmětu Měřicí technika pro chemické inženýry a do laboratoří oboru Měřicí technika.
- Získané poznatky s využitím systému PCT 40 a PCT 41 prokazují, že nová laboratorní stanice přispívá významně k inovaci a k zefektivnění laboratorní výuky provozního měření a řízení.
- Z kapitálových prostředků byl v roce 2006 pořízen dataprojektor s příslušenstvím v celkové ceně 74 924 Kč. Dataprojektor bude využíván při výuce v laboratořích pro prezentaci společných informací pro posluchače o teoretických základech k laboratorním pracím a názorných instrukcí k ovládání experimentálního zařízení laboratorních úloh, případně k prezentacím vybraných výsledků měření.

- Provozní prostředky v roce 2006 byly využity na nákup drobného hmotného majetku ve výši 8 556 Kč (pořízení digitálních vah Ohaus, typ Scout-Pro, jako doplňku k úloze Měření a regulace složení). Provozní prostředky na materiálové výdaje ve výši 6 364 Kč byly použity k pokrytí výdajů spojených se zajištěním provozu stanice (chemikálie, sklo, paměť, DVD-média apod.).
- Je možno konstatovat, že plánované cíle byly splněny a díky rozvojovému projektu byly laboratoře vybaveny velmi moderním výukovým zařízením, které bylo využíváno ve výuce již v minulém akademickém roce a do budoucna je možno jeho využití dále rozšiřovat.

## 5.2. Měření vybraných technologických veličin

Na základě rozvahy o časové dotaci pro jednotlivé laboratorní práce, bylo rozhodnuto začlenit původně samostatný modul **Technologická měření s využitím internetu** do modulu **Měření vybraných technologických veličin**. V tomto modulu budou tedy zařazeny 4 laboratorní práce:

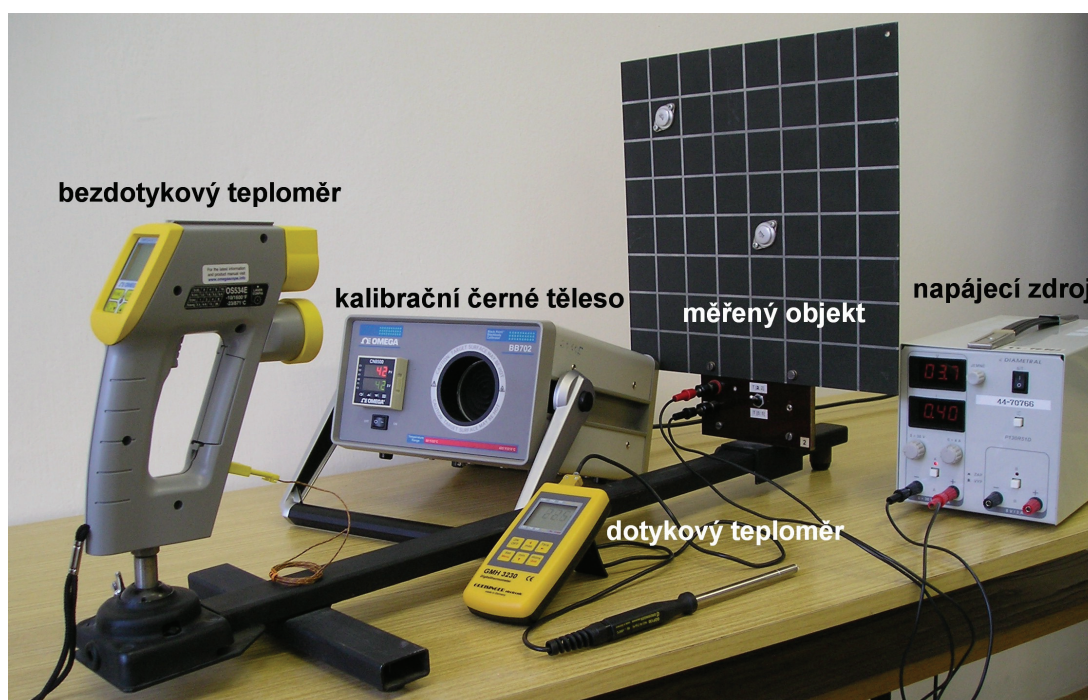
- Bezdotykové měření teploty
- Inteligentní provozní snímač tlaku
- Měření množství tepla
- Měření teploty s připojením k internetu

Pro modulové laboratoře jsou připraveny dvě dvojice laboratorních prací z oblasti technologických měření; pro každou dvojici laboratorních prací se počítá s časovou dotací 7 výukových hodin:

- |                                |                                          |
|--------------------------------|------------------------------------------|
| 1) Bezdotykové měření teploty. | Inteligentní snímač tlaku.               |
| 2) Měření množství tepla.      | Měření teploty s připojením k internetu. |

### 5.2.1 Bezdotykové měření teploty

Měřicí stanice je k dispozici ve třech exemplářích a její inovované uspořádání rozšířené o porovnávací měření teploty dotykovým digitálním teploměrem bylo začleněno do stávající laboratorní úlohy. Funkce byla ověřena v rámci posluchačských laboratoří. Uspořádání laboratorního zařízení je patrné z obr. 5.5.



Obr. 5.5 Laboratorní stanice pro bezdotykové měření teploty



V roce 2006 byl zakoupen nový bezdotykový teploměr OMEGASCOPE OS 543E, který je vybaven kruhovým laserovým zaměřovačem, ultrazvukovým měřením vzdálenosti objektu a komunikačním rozhraním RS 232 pro přímé propojení s personálním počítačem. Do budoucna počítáme s tím, že tímto moderním typem bezdotykového teploměru budou nahrazeny současně používané IČ-teploměry, kdy nové teploměry bude možno propojit přímo s počítačem.

V rámci laboratorní práce se posluchači seznámí s provedením přenosného IČ-teploměru, provedou kalibraci bezdotykového teploměru pomocí černého tělesa, proměří rozložení teploty na povrchu vyhřívané desky a výsledek experimentu vyhodnotí na počítači.

### 5.2.2 Inteligentní provozní snímač tlaku

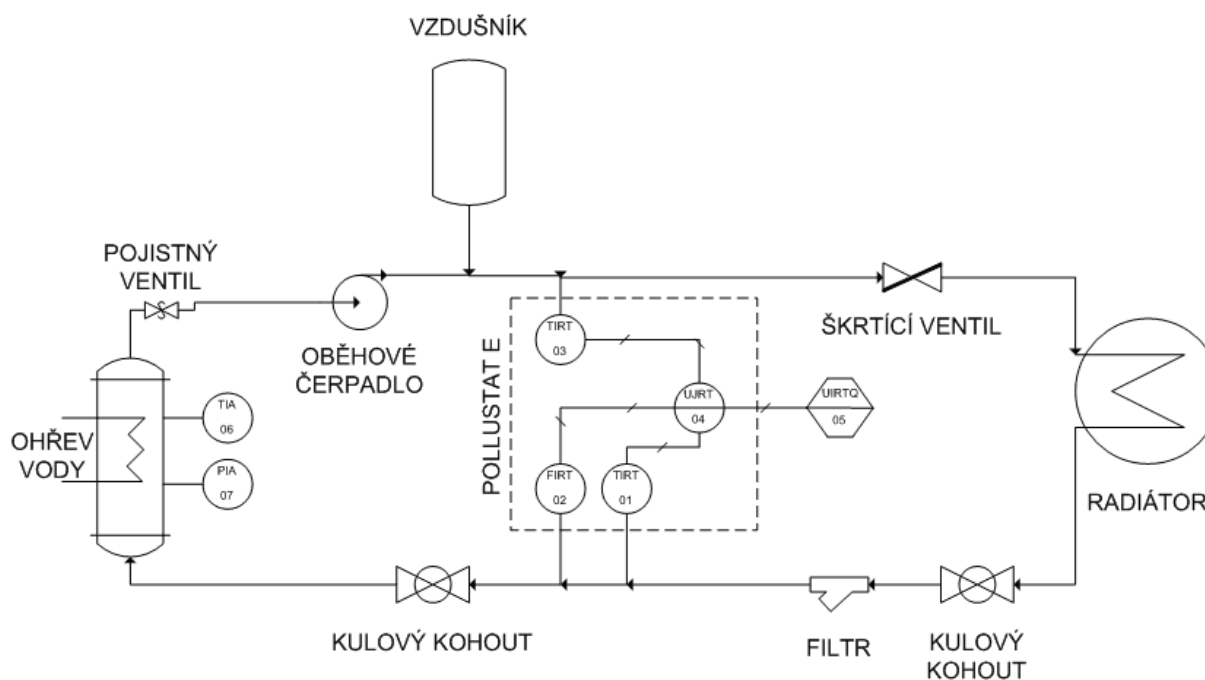
Základem laboratorní práce je inteligentní snímač tlaku Rosemount 3051 S, který poskytuje analogový unifikovaný proudový signál 4 až 20 mA a je vybaven i digitální komunikací prostřednictvím protokolu HART. Snímač tlaku může být propojen jak s analogovým, tak s digitálním ukazatelem analogového výstupního signálu a prostřednictvím komunikačního modulu přes sběrnici RS232 s počítačem.

Posluchači se seznámí s funkcí inteligentního snímače tlaku, provedou měření relativního a absolutního tlaku, seznámí se s analogovou a digitální komunikací prostřednictvím protokolu HART a výsledky vyhodnotí na počítači.

Pro další vylepšení laboratorních úloh bude zapotřebí ještě zakoupit zařízení umožňující kalibraci provozního snímače. Vzhledem k tomu, že na zakoupení tohoto zařízení nebyl dostatek prostředků z tohoto rozvojového projektu, byla podána přihláška projektu FRVŠ na rok 2007.

### 5.2.3 Měření množství tepla

Na základě návrhu z minulého roku byla realizována nová stanice umožňující měření množství předaného tepla (obr. 5.6).



Obr. 5.6 Schéma laboratorní stanice pro měření množství tepla

Laboratorní modelové zařízení, na kterém se bude měřit množství předaného tepla modeluje reálnou situaci. Zařízení tvoří zdroj tepla (elektrický ohřívák vody s termostatem) a jako spotřebič tepla slouží vzduchem ochlazovaný radiátor. Teplá voda je v systému dopravována oběhovým čerpadlem, případné rázy čerpadla jsou kompenzovány v zařazené expanzní nádobě. Měřič tepla PoluStat-E sdružuje ultrazvukový snímač průtoku, který je zapojen na výstupu vody z radiátoru; a snímače teploty, které jsou lokalizovány na vstupu a na výstupu radiátoru. Přístroj je možno ovládat buď manuálně ve čtyřech úrovních (uživatelská, archivační, servisní a parametrická) anebo prostřednictvím zabudované zásuvné karty M-Bus modulu propojeného přes převodník PW3 (převodník sběrnice M-Bus/RS232) s počítačem.

Při laboratorním cvičení se posluchači seznámí s funkcí kompaktního měřiče tepla, na laboratorním modelovém zařízení experimentálně vyhodnotí množství předaného tepla, proměří závislost teplotního výkonu na teplotě nebo průtoku teplotního média a porovnájí množství spotřebované elektrické energie s předaným teplem.

#### 5.2.4 Měření teploty s připojením k internetu

Laboratorní práce je určena k seznámení studentů s procesním indikátorem, který je vybaven ethernetovým rozhraním a umí se chovat jako webový server, což umožňuje přistupovat k přístroji odkudkoli v počítačové síti. Lze tak číst aktuální naměřenou hodnotu nebo konfigurovat přístroj v internetovém prohlížeči. Student se seznámí s problematikou síťového spojení a s možnostmi komunikace u průmyslových přístrojů.

Laboratorní úlohy mají informativní charakter, student se seznámí s funkcí přístroje s přímým připojením k internetu, provede nastavení vhodné konfigurace přístroje a ověří požadovanou funkci při komunikaci s přístrojem přes internet.

#### 5.2.5 Výsledky řešení a čerpání finančních prostředků v roce 2006

- Laboratorní stanice pro bezdotykové měření teploty byla doplněna moderním IČ-teploměrem. Laboratorní úloha byla zařazena do programu laboratorí magisterského studia. Byl vypracován učební text a návod pro laboratorní cvičení (samostatná příloha jako pdf soubor) a tento dokument je k dispozici na adrese <http://www.vscht.cz/ufmt/kadleck.html>.
- Byla realizována nová laboratorní stanice pro úlohu měření předaného tepla.
- Provozní prostředky byly využity na nákup drobného hmotného majetku ve výši 21 088 Kč, a to na pořízení IČ-teploměru, který bude využíván v laboratorní úloze bezdotykové měření teploty. Další provozní prostředky na materiálové výdaje a služby ve výši 11 296 Kč byly použity k nákupu komponent pro realizaci stanice měření tepla a pro úpravu dalších laboratorních stanic (kovové profily, teploměr, trubky, kohouty, těsnění, vrtáky, spojovací materiál apod.).
- Také u modulu **Měření vybraných technologických veličin** je možno konstatovat, že vytčené cíle byly splněny a díky rozvojovému projektu vznikly nové laboratorní úlohy, z nichž některé již byly využívány ve výuce v minulém akademickém roce a další budou do výuky zařazeny v akademickém roce 2007/8.

#### Publikace spojená s řešením projektu:

Kadlec K.: *Multifunkční stanice pro výuku provozního měření a řízení*.  
AUTOMA 12, 7, 68-70, (2006), ISSN 1210-9592



**Přílohy: (uváděné jako samostatné pdf soubory – resp. jako součást pdf souboru příloh )**

P1. Učební text k modulu „Provozní měření a řízení“ – soubor „P1\_Hladina-PCT40-uvod.pdf“

P2. Návod k úloze Měření a regulace hladiny – soubor „P2\_Hladina-PCT40-navod\_v5.pdf“

P3. Návod k úloze Měření a regulace složení – soubor „P3\_Konc-PCT41-navod\_v2.pdf“

P4. Návod k úloze Bezdotykové měření teploty – soubor „P4\_Bezdotykově\_teploмеры.pdf“

P5. Publikace v časopisu AUTOMA – soubor „P5\_Automa\_Kadlec.pdf“

**B6. Moduly připravované Ústavem chemického inženýrství****6.1. Provozní výpočet**

Pro modul **Provozní výpočet** jsou připraveny úlohy:

- 1) Návrh provozní sušárny na základě laboratorních dat
- 2) Návrh provozního filtru z dat naměřených na poloprovozním zařízení
- 3) Návrh provozní promíchávané nádoby na základě laboratorních dat
- 4) Vyhodnocení faktoru znečištění z měření na výměníku tepla

Tyto úlohy mohou být od února 2007 zadávány v zimním i letním semestru, zájemci se musí přihlásit zhruba do 15.2. na letní semestr a do 30.9. na zimní semestr. Předpokládá se 1 den práce v laboratoři a 4 týdny na provedení výpočtu provozního zařízení a vypracování závěrečné zprávy. Úlohu bude vždy řešit skupina dvou až tří posluchačů společně. (konzultace při výpočtu bude poskytovat určený učitel ústavu v dohodnutých termínech )

Pro další akademický rok se plánuje rozšíření modulu o úlohu "Návrh plněné rektifikační kolony na základě laboratorních dat".

**6.2. Membránové operace**

Jak bylo uvedeno již v závěrečné zprávě za rok 2005, nestačily prostředky přidělené na projekt k realizaci původně plánovaných tří aparatur. Byla zakoupena a uvedena do plného provozu aparatura k úloze "Reverzní osmóza" a aparatura k úloze "Pervaporace". K úloze "Pervaporace" bylo nutno dokoupit z prostředků mimo projekt laboratorní stůl, který byl dodán až v září 2006, a tím se zdržel nutný zkušební provoz. Tuto úlohu bude možné zadávat od zimního semestru akademického roku 2007/2008. ÚCHI chtěl zachovat původní záměr připravit pro tento modul celkem tři úlohy, takže z prostředků ústavu byl zakoupen oxymetr (129 tis. Kč) pro úlohu "Permeace". Dále pak 52 tis. Kč z prostředků projektu přidělených na rok 2006 bylo využito na nákup permeačního modulu EnOxy 304 pro obohacování vzduchu kyslíkem a za dalších 73 tis. Kč z prostředků získaných mimo projekt byly zakoupeny speciální filtry pro předúpravu vzduchu. Celkové dokončení realizace úlohy "Permeace" bude vyžadovat ještě asi 50 tis. Kč, které budou k dispozici až v roce 2007. I tak lze přepokládat, že úloha bude připravena k zadání do zimního semestru roku 2007. Pokud by se tento předpoklad nenaplnil, bude tento modul přechodně (v roce 2007) zadáván pouze v rozsahu dvou úloh.

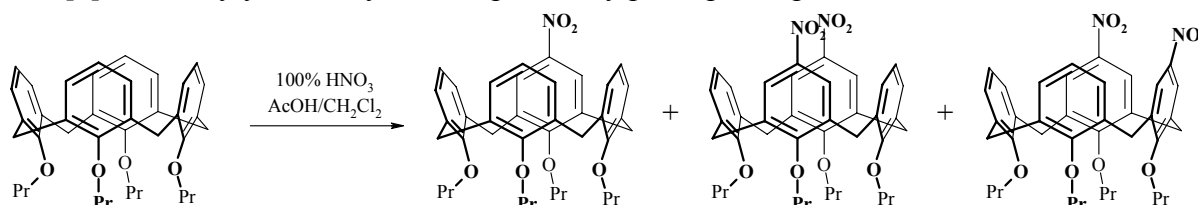
Modul bude vyžadovat 2 až 3 dny práce v laboratoři, laboratorní protokoly by měly být odevzdány do týdne po ukončení poslední práce. Obvykle nebude možné zajistit z organizačních důvodů změření více než dvou úloh v jednom týdnu, takže celková doba na

absolvování modulu bude 2 až 3 týdny. Modul bude vždy absolvovat skupina dvou až tří posluchačů společně. Přihlásit se je třeba do 30.9. v příslušném akademickém roce.

## B7. Moduly připravované Ústavem organické chemie

### 7.1. Organická syntéza

Byly odzkoušeny konkrétní reakční podmínky dříve zvolených reakcí (regioselektivní nitrace calix[4]arenu a byly nalezeny vhodné podmínky pro separaci produktů.



**Schéma:** Regioselektivní nitrace calix[4]arenu

Příklad syntetického postupu:

#### Syntéza: 5,17-dinitro-25,26,27,28-tetrapropoxycalix[4]aren

Do roztoku 1,34 g (2,2 mmol) 25,26,27,28-tetrapropoxycalix[4]arenu ve 135 ml sušeného dichlormethanu a 5,5 ml ledové kyseliny octové bylo přikapáno 1,35 ml (32,4 mmol) 100 % kyseliny dusičné, směs byla za nepřístupu vzdušné vlhkosti (pod N<sub>2</sub> atmosférou) míchána při laboratorní teplotě 1 hodinu. Reakce byla ukončena přidávkem 200 ml vody, vodná fáze byla extrahována třikrát 50 ml chloroformu. Spojené extrakty byly promyty 50 ml vody, 50 ml nasyceného roztoku hydrogenuhličitanu sodného a znovu 50 ml vody. Po sušení síranem hořečnatým, filtraci a odpaření rozpouštědla bylo sloupcovou chromatografií (SiO<sub>2</sub>, eluent CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> : petrolether 5:1) izolováno 0,470 g žluté látky (30 %) o bodu tání 184-185 °C.

<sup>1</sup>H NMR δ(ppm): 7,42 (s, 4H, Ar-**H**), 6,74 (s, 6H, Ar-**H**), 4,47 a 3,25 (d, 8H, J=13,7 Hz, Ar-**CH**<sub>2</sub>-Ar), 3,89 (m, 8H, -O-**CH**<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>- CH<sub>3</sub>), 1,90 (m, 8H, -O-CH<sub>2</sub>- **CH**<sub>2</sub>- CH<sub>3</sub>), 1,00 (m, 12H, -O-CH<sub>2</sub>- CH<sub>2</sub>- **CH**<sub>3</sub>).

#### Popis chromatografie:

50 g Silikagelu se suspenduje v 500 ml Erlenmeyerově baňce ve 150 ml směsi CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>-petrolether 5:1 a vzniklá suspenze se nalije do zavřené chromatografické kolony a silikagel na stěnách kolony se opláchne čistým eluentem. Po usazení sloupce vložte do kolony kolečko filtračního papíru o průměru 25 mm. Po odpuštění přebytku eluentu se produkt nitrace (roztok v CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>) opatrně nanese na sloupec injekční stříkačkou s dlouhou jehlou na střed silikagelu v koloně. Opatrně se odpustí z kolony takové množství eluentu, aby se roztok vzorku právě nasákl do sloupce silikagelu, baňka s produktem se vypláchne 5 ml čerstvého CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> a nanese se znovu na kolonu. Po zasáknutí tohoto podílu se nanese stříkačkou 10 ml čistého eluentu a nechá se stejným způsobem zasáknout. Pak se ještě jednou provede stejná operace s 20 ml eluentu než se na sloupec opatrně nalije 200 ml eluentu ze zásobní lahve a jímají se frakce cca 30 ml (rychlostí cca 10 ml za minutu). Chromatografie se ukončí, když podle TLC analýzy veškerý podíl nitrovaných derivátů kolonou.

Jednotlivé frakce se natečkují na destičku silufolu a nechají se vyvíjet ve směsi CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>: petrolether 2:1 v chromatografické komůrce. Frakce obsahující produkt (podle tenkovrstvé chromatografie) se spojí a odpaří se na vakuové rotační odparce. Izolovaný produkt se pak rekrystaluje ze směsi methanol-CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>.

## 7.2. Separační metody v organické syntéze

V současné době jsou k dispozici tři různé typy preparativní chromatografie:

- Flash chromatografie
- Radiální preparativní chromatografie
- Střednětlaká sloupcová chromatografie s UV-vis detektorem a lineárním sběračem frakcí

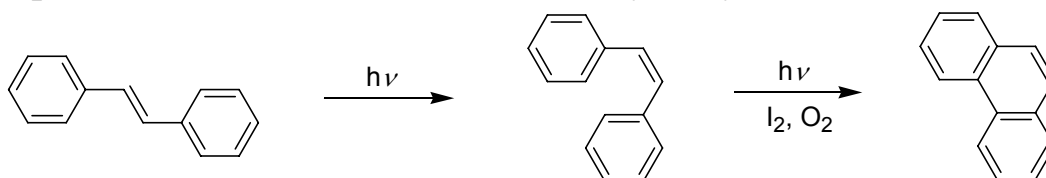
U všech systémů byly úspěšně odzkoušeny optimální podmínky pro efektivní rozdělení směsí získaných v modulu **Organická syntéza**. Pro střednětlakou sloupcovou chromatografii byl pořízen přístroj na monitorování eluentu (20 tis. Kč), dále pak C18 cartridge (11 tis. Kč). Pro celý modul byly pořízeny chemikálie v hodnotě cca 11 tis. Kč.

## 7.3. Fotochemie

Ve třetím roce řešení projektu jsme se soustředili na otestování konkrétního provádění reakcí (z výběru navrženého v předchozím roce projektu), které budou studenti provádět v rámci modulu **Fotochemie**. Při výběru vhodné fotochemické reakce jsme vycházeli z následujících kritérií: možnost spektrofotometrického sledování reakce, dostupnost výchozí látky, relativně snadné zpracování produktu, přijatelně dlouhá doba ozařování. K testování byl potřeba spotřební laboratorní materiál (3 tis. Kč) a harddisk k zálohování a přenášení dat (9 tis. Kč).

Vzor syntézy:

### Příprava fenanthrenu fotoizomerací-dehydrocyklizací stilbenu



Požadované znalosti a dovednosti: základní techniky organické syntézy, sloupcová chromatografie, tenkovrstvá chromatografie, UV-VIS spektrometrie, NMR spektroskopie.

Získané znalosti a dovednosti: fotochemické reakce, sublimace, fotoexcitace molekul, Jablonského diagram, elektrocyklické reakce, Woodward-Hoffmanova pravidla

Doba provedení: 2 – 3 dny

Literatura: Mallory F. B., Wood C. S., Gordon J. T.: *J. Am. Chem. Soc.* **1964**, 86, 3094;  
 Davy J. R., Jessup P. J., Reiss J. A.: *J. Chem. Educ.* **1975**, 52, 747;  
 Wayne C. E., Wayne R. P.: *Photochemistry*, Oxford Chemistry Primers, Oxford University Press **2002**.

Postup:

1. Měření UV-VIS spekter *trans*-stylbenu a fenanthrenu.

Připravte 10 ml roztoku *trans*-stylbenu a fenanthrenu o koncentraci  $5 \times 10^{-4} \text{ mol l}^{-1}$ . S využitím těchto roztoků připravte pomocí automatických pipet přímo do spektrofotometrických kyvet ( $V = 3 \text{ ml}$ ) roztoky vzorků *trans*-stylbenu a anthracenu o koncentracích  $5 \times 10^{-6}$ ,  $1 \times 10^{-5}$ ,  $1.5 \times 10^{-5}$ ,  $2 \times 10^{-5} \text{ mol l}^{-1}$  a  $2.5 \times 10^{-5}$  změřte jejich UV-VIS spektra. Jako pozadí použijte samotný cyklohexan. Ve spektrech najděte maxima jednotlivých absorpčních pásů a ze závislosti absorpance na koncentraci určete příslušné molární absorpční koeficienty. Určete vhodné vlnové délky, při kterých bude možné sledovat průběh fotoizomerace-dehydrocyklizace stilbenu.

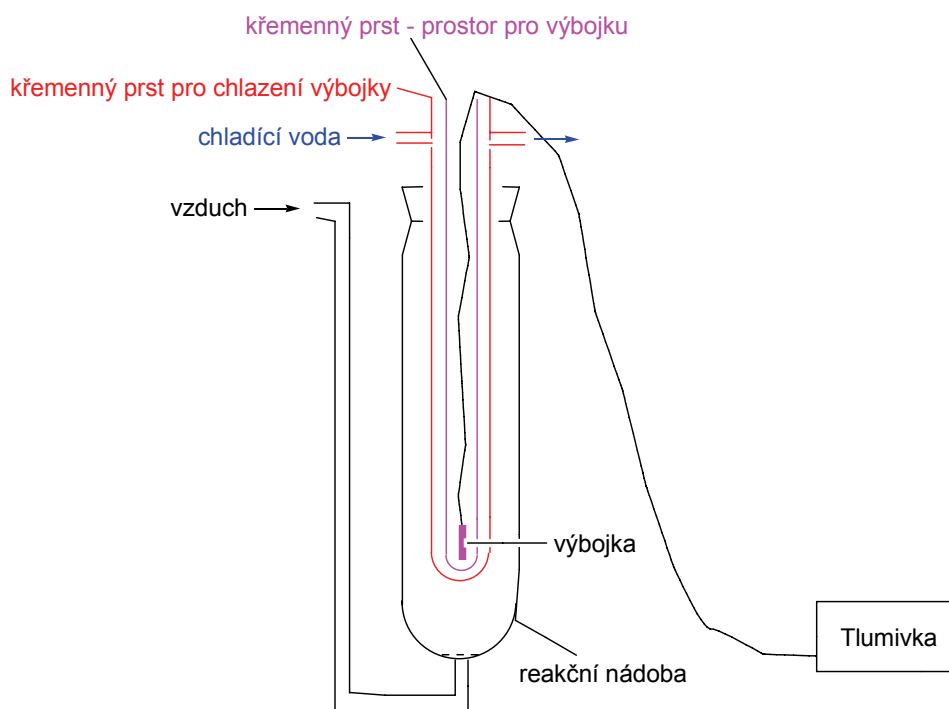
## 2. Provedení reakce v preparativním měřítku.

*Upozornění. Vzhledem k UV záření produkovaném výbojkou je nezbytné aparaturu uzavřít do speciálního boxu, aby nedošlo k ohrožení zraku přítomných. Při manipulaci s aparaturou při zapnutém světle používejte vždy brýle se speciálním filtrem!*

1.0 g *trans*-stilbenu a 55 mg jodu rozpustíte ve 350 ml cyklohexanu. Roztok umístíte do fotochemické aparatury, která je vybavená chlazeným křemenným prstem pro umístění zdroje světla (střednětlaká rtuťová výbojka, 150 W) a trubičkou pro zavádění vzduchu do roztoku (viz obrázek 7.1). Roztokem začnete probublávat vzduch, zapnete rtuťovou výbojku do tlumivky a aparaturu zavřete do boxu. Průběh reakce sledujte pomocí UV-VIS spektrofotometrie. Vzorek odebírejte každou hodinu. Odebraný vzorek vždy naředíte do spektrofotometrické kyvety na vhodnou koncentraci a změřte UV spektrum. Dle příslušných hodnot absorbancí výchozí látky i produktu ve spektru vzorku odhadněte konverzi (závislost konverze na čase zakreslujte do grafu). Přibližná celková doba ozařování je 8 – 10 hodin.

Po ukončení reakce odpařte rozpouštědlo na rotační vakuové odparce, zbytek rozpustíte v malém množství (1 – 2 ml) petroletheru a surovou směs přečistíte pomocí sloupcové chromatografie na alumině. Průběh chromatografie sledujte pomocí TLC. Frakce s produktem spojte a odpařte do sucha. Produkt přečistíte sublimací, změřte jeho  $^1\text{H}$  NMR spektrum a bod tání. Změřte rovněž  $^1\text{H}$  NMR spektrum výchozího *trans*-stilbenu.

Phenanthren je bílá krystalická látka o b.t. 99 – 99.5 °C.



Obr. 7.1 Schéma fotochemického reaktoru

## B8. Moduly připravované Ústavem počítačové a řídicí techniky

### 8.1. Modul - Laboratoř automatického řízení

Seznam úloh modulu:

- a) Průmyslové snímání dat a regulace
- b) Programovatelné automaty – kombinační logické řízení
- c) Programovatelné automaty – sekvenční logické řízení

#### Úloha 8.1.a Průmyslové snímání dat a regulace

Ústav počítačové a řídicí techniky je vybaven systémem průmyslových snímačů fyzikálních veličin, které byly získány od firmy Rosemont. Jedná se o přístroje měřící teplotu, tlak, průtok, vodivost a činitele pH. Všechny snímače jsou vybaveny mikropočítači a jsou schopny po proudové smyčce 4 až 20 mA přenášet na dálku měřenou veličinu. Rovněž umožňují digitální čtení a nastavování jejich vlastností pomocí protokolu HART. Snímače byly instalovány na systému potrubí, kterým je čerpadlem proháněna voda (viz obr.8.1). Průtok lze ovládat dvěma ventily umístěnými na paralelních větvích potrubí. Prostřednictvím kohoutů lze vytvářet různé kombinace pro automatizaci reálných procesů. Studenti se seznámí s typickým modulárním průmyslovým řešením analogových a číslicových modulů pro sběr a generování signálů i s vyspělým programovým vybavením pro ovládání těchto systémů (viz samostatná příloha– soubor *labdeltav1a.doc*, resp. *součást pdf souboru příloh*).

#### Výsledky prací dosažené v roce 2006:

- 1) Byla odzkoušena úloha pro dálkové nastavování měřicích přístrojů prostřednictvím protokolu HART využitím programu AMS (viz samostatná příloha – soubor *labdeltav1a.pdf*, Laboratorní úloha 2, též součást pdf souboru příloh)
- 2) Byly instalovány hladinoměry pro dvě používané nádoby (do každé jeden ultrazvukový spojitě měřící hladinu a jeden plovákový pro hlídání maximální úrovně) a realizováno

programové ovládání čerpadel. Byl realizován program pro čtení hladinoměřů a ovládání čerpadel.

- 3) Byly realizován systém měření tlaku v různých místech potrubí pomocí magnetventilů a sestaven program pro řízení těchto ventilů.
- 4) Pro tuto úlohu byla pořízena přenosná flash paměť( 990,- Kč).

### **Úlohy 8.1.b a 8.1.c Programovatelné automaty – kombinační a sekvenční logické řízení**

Bylo vytvořeno funkční zařízení pro výuku obou typů úloh logického řízení. Na obou stanicích bude možné provádět všechny úlohy obou typů logického řízení, a jsou tedy zcela záměnné.

Podklady obsahují příslušné teoretické partie logického řízení, uživatelský manuál laboratorní stanice, uživatelskou příručku prostředí Concept v 2.1M v rozsahu nezbytně nutném pro řešení úloh na laboratorních stanicích a zadání konkrétních úloh logického kombinačního i sekvenčního řízení.

#### **Výsledky prací dosažené v roce 2006:**

Byla dobudována druhá laboratorní stanice pro úlohy 8.1.b a 8.1.c. Do stojanové konstrukce byl zabudován čelní panel s technologickým schématem, na němž je instalován programovatelný automat TSX Momentum. Byly osazeny napájecí zdroje a nové solenoidové ventily a provedeno kompletní elektrické zapojení a rozvod vody ve stanici. Zapojení programovatelného automatu bylo přizpůsobeno dodanému firmware automatu. Byla současně provedena revize stávající laboratorní stanice a výměna starých nespolehlivých solenoidových ventilů za nové ventily stejného typu jako v nové stanici. Konečné provedení obou stanic je zřejmé z obrázku 8.2. Pro tyto úlohy byl pořízen převodník s vodivostní sondou Newport (14 565,- Kč).



Obr.8.1 Uspořádání průmyslového systému pro snímání dat a regulaci





Obr. 8.2 Laboratorní stanice pro úlohy 8.1.b a 8.1.c. Na panelu programovatelný automat, vlevo fyzikální model nádrže a v popředí počítač pro programování a simulaci řídicích programů automatu.

## 8.2. Modul - Snímání provozních dat

Seznam úloh modulu:

- a) Filmová odparka - regulace tlaku v brýdovém prostoru
- b) Filmová odparka - studium dynamiky procesu zahušťování roztoku
- c) Řízení fyzikálního procesu počítačem

### 8.2.a Filmová odparka - regulace tlaku v brýdovém prostoru

### 8.2.b Filmová odparka – studium dynamiky procesu zahušťování roztoku

Toto zařízení (viz obr.8.3) je umístěno v technologické hale FPBT a slouží k výuce studentů FPBT i FCHI. Stanice je řízena počítačovým systémem a umožňuje sběr dat do on-line databáze, odkud mohou být podle potřeby exportována pro další zpracování.

### Výsledky prací dosažené v roce 2006:

Bylo zlepšeno technické vybavení stanice náhradou původní vývěvy za výkonnější membránovou vývěvu () a byly navrženy a vyzkoušeny další úlohy. V současné době jsou na odparce k dispozici pro modulární laboratoře následující úlohy:

1. Regulace tlaku v brýdovém prostoru
2. Studium dynamiky procesu zahušťování roztoku
3. Určení statické charakteristiky kondenzátoru brýdových par
4. Sledování výkonu odparky

Pro tyto úlohy byly zpracovány návody a jsou uvedeny v samostatných přílohách této zprávy. Rovněž byly zpracovány manuály s popisem odparky a pokyny pro obsluhu, jeden pro studenty a jeden pro asistenty. Jsou také uvedeny v přílohách.

Předpokládáme, že perspektivně budou připraveny ještě další úlohy, zejména z oblasti identifikace systémů a regulace. Ty by pak měly sloužit především studentům magisterského studijního oboru Inženýrská informatika a řízení procesů.



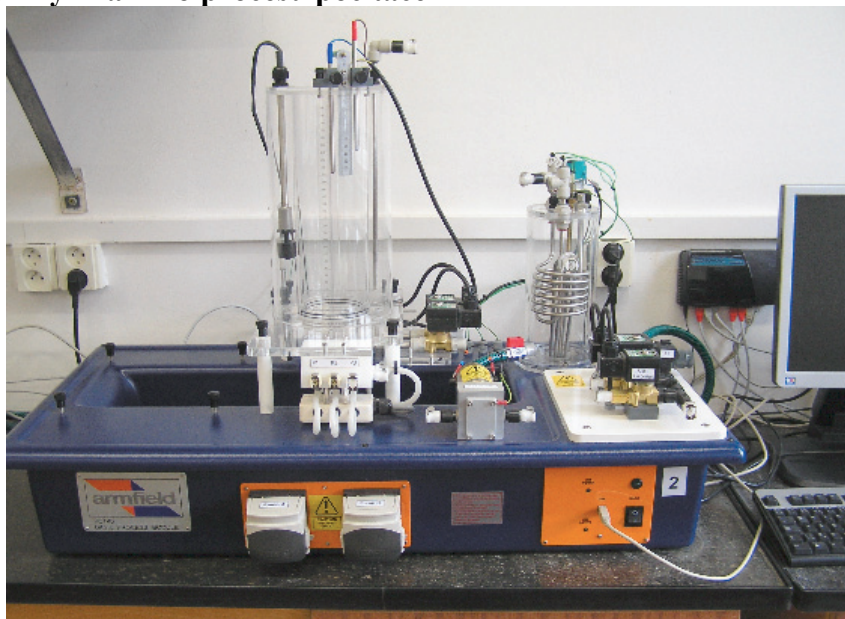
Obr.8.3a Celkový pohled na laboratorní filmovou odparku



Obr.8.3b Celkový pohled na odparku z opačné strany



### 8.2.c Řízení fyzikálního procesu počítačem



Obr.8.4 Laboratorní stanice ARMFIELD PCT40

Laboratorní stanice PCT40 představuje špičkový výukový systém jak z hlediska technického tak i z hlediska programového vybavení. Je to systém dávající možnost rychlé realizace různých fyzikálních procesů, při nichž jsou měřeny základní fyzikální veličiny tj. teplota, tlak, průtok a hladina a zajištěno jejich řízení a automatická regulace počítačem. Zakoupená stanice má jednak zvýšit průchodnost úloh vybudovaných na Ústavu fyziky a měřicí techniky a rozšířit úlohy zajišťované Ústavem počítačové a řídicí techniky.

#### Výsledky prací dosažené v roce 2006:

- 1) Byl vytvořen popis systému pro potřebu programování.
- 2) Byla vytvořena příručka pro programování systému PCT40 v LabView s vyzkoušenými aplikacemi.
- 3) Byla vytvořena příručka pro programování systému PCT40 v Simulinku systému MATLAB s vyzkoušenými aplikacemi.
- 4) Byl zakoupen modul USB-6211 v ceně 19 374 Kč pro seznámení studentů s nově zaváděnou možností ve snímání dat, který najde využití i ve výuce dalších předmětů. Kromě toho byla pořízena kniha Assembler (890,- Kč).

Úlohy modulů zajišťovaných ÚPŘT jsou velmi náročné, a proto navrhujeme obsazení dvěma současně vyučovanými studenty na modul.

## C. PŘÍLOHY

Příloha 1 – přehled čerpání jednotlivých pracovišť

| 2006 |                  | Dlouhodobý       |                  |                  |                | Běžné            | Pohyblivé      | Odvody na      | Drobný         | Materiální     | Stipendia     | Služby a     |
|------|------------------|------------------|------------------|------------------|----------------|------------------|----------------|----------------|----------------|----------------|---------------|--------------|
|      |                  | Celkové          | Kapitálové       | nehmotný         | Samostatné     | finanční         | složky         | sociální a     | majetek        | náklady        |               | náklady      |
|      |                  | finanční         | finanční         | majetek          | (stroje,       | prostředky       | mzdy           | zdravotní      |                |                |               | nevýrobní    |
|      |                  | prostředky       | prostředky       | (SW,             | zařízení)      |                  |                | pojištění      |                |                |               | povahy       |
|      |                  |                  |                  | licence)         |                |                  |                |                |                |                |               |              |
| 402  | ÚAN              | 1 965 092        | 1 850 002        | 1 505 161        | 344 841        | 115 090          | 56 000         | 19 600         | 36 294         | 3 196          | 0             | 0            |
| 101  | ÚACH             | 130 587          | 0                | 0                | 0              | 130 587          | 56 000         | 19 599         | 6 831          | 48 062         | 0             | 95           |
| 320  | ÚBM              | 212 541          | 74 941           | 0                | 74 941         | 137 600          | 56 000         | 19 600         | 0              | 53 000         | 9 000         | 0            |
| 403  | ÚFCH             | 138 884          | 0                | 0                | 0              | 138 884          | 56 000         | 19 601         | 25 181         | 29 102         | 9 000         | 0            |
| 444  | ÚFMT             | 191 061          | 74 924           | 0                | 74 924         | 116 137          | 40 000         | 14 000         | 29 644         | 21 589         | 9 000         | 1904         |
| 409  | ÚCHI             | 127 598          | 0                | 0                | 0              | 127 598          | 56 000         | 19 600         | 39 508         | 12 490         | 0             | 0            |
| 110  | ÚOCH             | 117 000          | 0                | 0                | 0              | 117 000          | 40 000         | 13 998         | 29 048         | 24 954         | 9 000         | 0            |
| 445  | ÚPŘT             | 136 707          | 0                | 0                | 0              | 136 707          | 56 000         | 19 600         | 50 227         | 1 880          | 9 000         | 0            |
| 112  | LICH             | 281 001          | 0                | 0                | 0              | 281 001          | 100 000        | 35 001         | 81 458         | 18 542         | 46 000        | 0            |
|      | <b>celkem</b>    | <b>3 300 470</b> | <b>1 999 867</b> | <b>1 505 161</b> | <b>494 706</b> | <b>1 300 604</b> | <b>516 000</b> | <b>180 599</b> | <b>298 190</b> | <b>212 816</b> | <b>91 000</b> | <b>1 999</b> |
|      | <b>přiděleno</b> | <b>3 300 000</b> | <b>2 000 000</b> | <b>1 500 000</b> | <b>500 000</b> | <b>1 300 000</b> | <b>516 000</b> | <b>180 600</b> | <b>265 000</b> | <b>240 000</b> | <b>91 000</b> | <b>7 400</b> |
|      | rozdíl [Kč]      | -470,23          | 133,46           | -5 160,54        | 5 294,00       | -603,69          | 0,00           | 1,00           | -33 189,90     | 27 184,41      | 0,00          | 5 400,80     |

**Request for an offer with a quotation**

**Subject:**     **The Electronic Laboratory Notebook (ELN) Software**  
                  optimized for use in chemical educational environment at the Institute of  
                  Chemical Technology (ICT) Prague.

Dears,

I would like to ask you to prepare an offer with a quotation for installation/implementation of ELN at the Institute of Chemical Technology Prague (Vysoká škola chemicko technologická Praha, Technická 5, Praha 6 – Dejvice, PSC 16628, IČ 60461373, DIČ CZ60461373). The purpose of the installation, the requests, characteristics of the solution, price and other conditions are specified below.

**Main purpose - education of students**

The further described implementation of ELN at ICT Prague is a part of a triennial project entitled “Development of modular structure of laboratory exercises of fundamental disciplines in Master study programs” financially supported by Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic within the framework of “Development project: program for support of innovation and the development of the structure and modular forms of study programs”.

The aim of this part of the project is to introduce students to ELN itself and to demonstrate the advantages of use of ELN in chemical laboratory. We assume that this knowledge and experience improve the employability of the graduates of ICT Prague on Czech and European employment market. Different way of ELN presentation and use is proposed in the individual degrees of studies.

- Bachelor degree programs
  - Optional course for those, who are interested in flows of information in chemical laboratories (tens of students per year)
- Master degree programs
  - Introduction to ELN system, laboratory informatics and data management – special laboratory exercise will be prepared to demonstrate the key features of ELN and the way of work in such environment (hundreds of students per year)
  - use in advanced laboratory exercises (tens of students per year)
- PhD programs (tens of students per three-years study program)
  - Individual use by PhD students – their own laboratory notebook (shared with supervisor, at least tens of students per year)

**Further prospective usage of the system**

- Seminars for academic staff and students from other Czech universities and Academy of Science of the Czech Republic
- Trainings or seminars for laboratory staff from Czech chemical/pharmaceutical companies and other chemical/analytical professional laboratories

**Kinds of laboratories**

- Key topics
  - Analytical chemistry, Inorganic chemistry, Organic chemistry, Biochemistry, Physical chemistry
- Optional topics
  - Physics and physical measurement techniques, Chemical engineering, Microbiology

**Features required**

- Server and client system – enterprise version
- Client fully functional under MS Windows 2000, XP and followers. The clients for W98 and clones and non-MS systems are welcome.
- The Windows client must be fully functional under standard user account without administrator rights.
- Management of user rights by local administrators
- Configurable user environment
- Configurable data sharing between students and teachers
- Possibility of predefined, topic-defined and user-defined templates
- Support for chemical reactions, structures – drawing, database formation on them
- General chemical drawings included with image library of fundamental laboratory glassware and other laboratory equipment
- Reference management for preparation of protocols, MSc and PhD thesis, manuscripts of scientific papers and other presentation outputs, including interface for text editors (e.g. MS Word, LaTeX, Open Office), format of references should be programmable according the requests of journals
- Support for X-ray diffraction data (e.g. \*.xrdml)
- Support for spectral data – UV-vis (Varian), IR (Nicolet, Bruker), NMR (Varian, Bruker), MS etc.
- Support for chromatographic and electrophoretic data
- Support for microscopic data and images
- Support for spreadsheet data (MS Excel, Origin, The Unscrambler etc.)
- Support multiple code pages in one document to assure correct work with national-specific characters (greek symbols, letters from former CE encoding sets, etc.)
- Support at least basic formatting (sub- and superscripts, italic and bold fonts)
- Support for figures in both bitmap (bmp, jpg, gif, png) and vector (wmf, svf) formats
- Ability to search and index stored “pdf” and “doc” documents
- Interface to other chemistry and biochemistry databases and database systems
- Possibility to link with already existing chemistry software and databases
- Open system with further modularity – a platform for additional modules and various add-ons
- Intelligent search engine – text, graphs, chemical entities, structures, spectra etc.
- Full text search engine
- Interfaces to external programs (especially MS Office package)
- Interfaces to laboratory instruments
- Interfaces to chemical information resources (SciFinder, Web of Science)

**Characteristics of the computer solution:**

- Our demand is a complete software solution including supporting server/client software
  - Complete server installation, including prerequisite software optionally excluding OS)
  - Installation of clients in one classroom (at least for testing)
  - Training of local administrators
  - Training of a small group of users/staff
  - Backup solution and further system support with the update possibility



- Specify your hardware (system) requirements on the server and clients PC's
- Specify your requirements on the pre-installed operation system
- Please, offer a demo version for a possibility to compare your solution with offers of other companies
- Please, specify the type of license (unlimited user number within the ICT network, or number of licensees offered, access limited via user names or via specified IP addresses, etc.)

#### **Price and other conditions**

**The maximal total price including VAT, delivery costs, installation and short on-site training is fixed to 1 500 000,-Kč (Czech crowns - CZK).**

**Your offer with the quotation should be delivered in a closed envelope (marked "ELN-ICT") at the furthest on April 4, 2006 at 9:00 a.m. at ICT Prague – office of the Department of Analytical Chemistry (room number 238). Address: Department of Analytical Chemistry, Institute of Chemical Technology, Technicka 5, 166 28 Prague 6, The Czech Republic**

A two-day seminar on "Laboratory Innovations: Electronic Laboratory Notebooks (ELN's)" will be held in Prague on April 4 – 5, 2006, organized by a project called Prague Analytical Center of Innovations (PACI) with participation of ICT Prague. Tens of participants from Prague universities, institutes of Academy of Science and private companies are expected.

A presentation of your product at the seminar is welcome. Your expenses of the meeting attendance have to be included in the price limit mentioned above. The details about the two-day seminar will be sent later via e-mail. **Please, inform us about your participation at the seminar "Laboratory Innovations: Electronic Laboratory Notebooks (ELN's)" before March 17, 2006.**

**The installation, training and testing period have to be finished before December 2006.**

#### **Evaluation of the offers – decision-making processes**

Please, prepare your offer that way to allow evaluation of the compliance with the above-mentioned requirements and characteristics. The license rules (number of licenses), the optimization (tailoring) of the solution to an educational environment of ICT and further support (updates) will be the key factors evaluated within the features described above. Your eligibility to implement ELN at ICT Prague should be documented; the references on your previous installation/implementation should be included. The offer has to include your hardware requirements and eventual other prerequisites. The demo version of your product and its feature (confirming the written offer) will be important in the decision procedure.

Assoc. Prof. Pavel Matejka  
 coordinator of the project  
 Department of Analytical Chemistry  
 Institute of Chemical Technology  
 Technicka 5  
 166 28 Prague 6 – Dejvice  
 The Czech Republic

Email: [Pavel.Matejka@vscht.cz](mailto:Pavel.Matejka@vscht.cz)  
 Phone: +420 220 444 281  
 Fax: + 420 220 444 352  
 GSM: +420 603 712 701