



FAKULTA
CHEMICKÉ TECHNOLOGIE
VŠCHT PRAHA

Studentská Vědecká Konference

2024

28. 11. 2024

SBORNÍK ANOTACÍ

Ústav anorganické chemie (101)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Hana Kotoučová, Ph.D.

SEZNAM SEKČÍ

1. [B1 - Ústav anorganické chemie](#)
2. [B2 - Ústav anorganické chemie](#)
3. [M - Ústav anorganické chemie](#)

SPONZOŘI - ÚSTAV ANORGANICKÉ CHEMIE



Silikátová společnost
České republiky z.s.



Milan Kotouč -SAGA



SPOL. S R.O.



B1 - Ústav anorganické chemie – místnost A211

KOMISE

doc. Ing. Kateřina Rubešová, Ph.D. (předseda)

Ing. Vítek Jakeš, Ph.D. (tajemník)

Ing. Tomáš Hartman, Ph.D.

RNDr. Viera Murašková, Ph.D.

Ing. Jiří Šturala, Ph.D.

Ing. Jan Havlíček

Ing. Zuzana Gubišová

PROGRAM

09:00 **zahájení – Laboratoř D1**

09:30 [Adéla Kubištová](#) (B3, prof. Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.)

Struska ze zplyňování TAP jako náhrada plniva do kompozitních materiálů na bázi MOC

09:45 [Jan Hron](#) (B2, Ing. Martin Pižl, Ph.D.)

Syntéza a charakterizace polypyridylových komplexů ruthenia se schopností interkalace DNA

10:00 [Alžběta Picková](#) (B2, Ing. Vilém Bartůněk, Ph.D.)

Příprava a charakterizace nanočástic nestechiometrického oxidu cerititého za různých výchozích podmínek

10:15 [Jan Abrham](#) (B3, doc. Ing. Pavla Nekvindová, Ph.D.)

Yttrito-hlinito-křemičitá skla dopovaná cerem pro přípravu optických scintilačních vláken

10:30 [Daniel Obozov](#) (B3, Ing. Hana Kotoučová, Ph.D.)

Příprava polypyridinových ligandů nehemového typu a jejich interakce s lehkými přechodnými kovy

10:45 [Marek Hrdinka](#) (B3,)

Využití nízkodimenzionálních sloučenin v elektrochemické detekci bioaktivních látek

11:00 [Danylo Dementiev](#) (B3, Ing. Jan Holub, Ph.D.)

Testing the possibility of organometallic coordination grids in preparation of bifunctional ligands in protein degradation

11:15 [Matouš Řezníček](#) (B3, Ing. Vilém Bartůněk, Ph.D.)

Možnosti přípravy nanomateriálů na bázi železa a jejich možné využití pro přípravu kompozitních nanomateriálů

Cca 12:30 **vyhlášení výsledků**

Struska ze zplyňování TAP jako náhrada plniva do kompozitních materiálů na bázi MOC

Adéla Kubištová (B3)

Školitel: prof. Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.

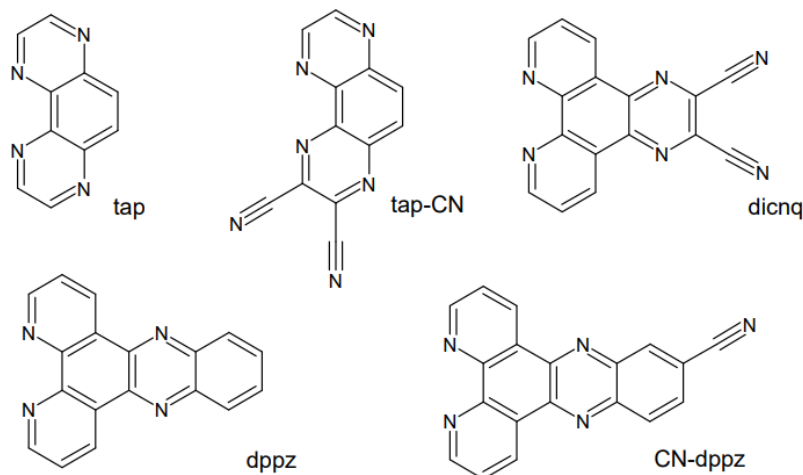
Kompozitní materiály na bázi reaktivního oxidu hořečnatého se ukazují jako slibná alternativa k široce využívanému Portlandskému cementu. Ve srovnání s Portlandským cementem mají lepší mechanické vlastnosti a s jejich procesem výroby je spojen nižší objem emisí CO₂. Tématem této práce byla příprava kompozitního materiálu na bázi MOC (z angl. magnesium oxychloride cement), v němž bylo běžně používané plnivo (křemičitý písek) nahrazeno struskou vznikající při zplyňování tuhých alternativních paliv (TAP). Taktéž byly připraveny referenční vzorky MOC bez obsahu TAP, pro porovnání vlastností připravených materiálů. U všech vzorků bylo analyzováno jejich chemické a fázové složení pomocí rentgenové fluorescenční (XRF) a rentgenové difrakční analýzy (XRD). Dále byla studována mikrostruktura pomocí skenovací elektronové mikroskopie (SEM) a zastoupení jednotlivých prvků pomocí energiově disperzní spektroskopie (EDS). Také byly analyzovány jejich mechanické parametry.

Syntéza a charakterizace polypyridylových komplexů ruthenia se schopností interkalace DNA

Jan Hron (B2)

Školitel: Ing. Martin Pižl, Ph.D.

Ruthenaté komplexy s polypyridylovými ligandy jsou v posledních letech zkoumány pro své fotofyzikální, fotochemické vlastnosti a také pro jejich schopnost fotooxidace DNA. Této vlastnosti by se dalo využít k cílené léčbě nádorových onemocnění. Výhodou je, že ligandy se dají do jisté míry modifikovat, lze tak ovlivnit afinitu komplexu k DNA, nebo redoxní vlastnosti zmenšením (respektive zvětšením) rozdílu mezi hladinami HOMO a LUMO. Ve své práci se zabývám syntézou polypyridylových ligandů s různými počty nitrilových skupin ve své struktuře (viz obrázek): 1,4,5,8-tetraazafenantren (tap), 2,3-dikyano-1,4,5,8-tetraazafenantren (tap-CN), 6,7-dikyanodipyrido[2,2-d':2',3'-f]quinoxalin (dicnq), dipyrido[3,2-a:2',3'-c]fenazin (dppz) a 11-kyano-dipyrido[3,2-a:2',3'-c]fenazin (CN-dppz). Dále se budu věnovat syntéze heteroleptických komplexů s obecným vzorcem $[Ru(L1)_2(L2)]^{2+}$, kde L1 je tap, nebo tap-CN a L2 je dicnq, dppz nebo CN-dppz. Komplexy s Ru(II) budou následně charakterizovány a budou porovnávány jejich vlastnosti. Přítomnost nitrilové skupiny by měla vést ke snížení rozdílu energií mezi HOMO a LUMO, a tak vést ke snazší redukci komplexů. V současné době si syntetizují zmiňované ligandy.



Příprava a charakterizace nanočástic nestechiometrického oxidu ceričitého za různých výchozích podmínek

Alžběta Picková (B2)

Školitel: Ing. Vilém Bartůněk, Ph.D.

Oxid ceričitý je díky svým vlastnostem velmi atraktivní materiál, který má využití v širokém spektru aplikací – katalýza, fotokatalýza, chemisorpce, abrazivní látka pro leštění skla a kovů nebo optika. Cílem této práce bylo zjistit vliv výchozích podmínek a výchozího složení reaktantů na výslednou kvalitu, velikost, tvar a strukturu nanočástic. Připravené nanočástice byly následně charakterizovány pomocí práškové rentgenové difrakce a dalších metod.

Yttrito-hlinito-křemičitá skla dopovaná cerem pro přípravu optických scintilačních vláken

Jan Abrham (B3)

Školitel: doc. Ing. Pavla Nekvindová, Ph.D.

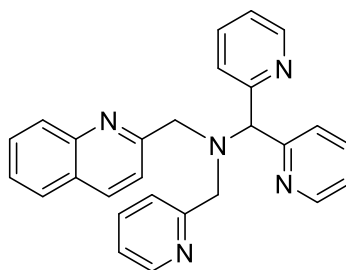
Scintilace je typ luminiscence, kdy dochází pomocí vysokoenergetického záření k emisi záření v UV-VIS oblasti. Scintilační materiály jsou schopny přeměňovat obtížně detekovatelné záření, na signál, který lze registrovat běžnými detektory. Využívané objemové scintilátory mají značnou nevýhodu v tom, že při buzení pomocí RTG dochází ke scintilaci pouze v ozařovaném místě. Naproti tomu je scintilační optické vlákno schopno RTG signál vyvolaný v libovolné části vést po celé své délce až do detektoru. Tento fenomén předurčuje scintilační vlákna pro využití v senzorech jakožto detektory RTG. Tématem práce je vývoj materiálu, příprava a charakterizace optických vláken z yttrito-hlinitých skel dopovaných cerem s různou koncentrací tohoto dopantu. Práce se zaměřuje na vliv koncentrace ceru a jeho oxidačního stavu na scintilaci. Důraz je kladen na přípravu preformy z bez defektního objemového skla jakožto prekursoru pro tažení vláken. Složení připravených vzorků skla bylo charakterizováno pomocí rentgenové fluorescenční spektroskopie (XRF), oxidační stavy prvků byly studovány fotoelektronovou spektroskopií (XPS), efektivní indexy lomu pomocí vidové spektroskopie, struktura skel Ramanovou spektroskopií. Jako nejdůležitější optické vlastnosti byly sledovány absorpce, luminiscence a radioluminiscence pomocí spektroskopických metod.

Příprava polypyridinových ligandů nehemového typu a jejich interakce s lehkými přechodnými kovy

Daniel Obozov (B3)

Školitel: Ing. Hana Kotoučová, Ph.D.

Komplexy *d*-kovů s polypyridinovými ligandy se v posledních letech těší stále většímu zájmu výzkumníků pro své účinné a v některých případech vysoce selektivní oxidační schopnosti. Tato práce se zaměřuje na syntézu dobře hodnoceného ligandu N3PyQ, jeho odpovídajícího Fe(IV) komplexu a jeho případnou derivatizaci modifikovanými ligandy. Tyto látky nacházejí využití ve farmaceutickém průmyslu jako šetrná oxidační činidla sulfidů na sulfoxidy, jenž tvoří široce rozšířenou skupinu léčiv.



N3PyQ

Využití nízkodimenzionálních sloučenin pro elektrochemickou detekci bioaktivních látek

Marek Hrdinka (B3)

Školitel: Ing. Vlastimil Mazánek, Ph.D.

Biologicky aktivní látky jsou sloučeniny s přímým účinkem na živou tkáň, například vitamíny, hormony nebo léčiva. Pomocí detekce lze sledovat jejich koncentrace v potravinách, léčivech či přímo v živých organismech, což přispívá k ochraně zdraví a k zajištění bezpečnosti a kvality produktů. Tato práce se zabývá možností využití MPS₃ pro detekci biologicky aktivních látek obsahující aminovou skupinu (paracetamol, lidokain, benzokain aj.). MPS₃ patří do skupiny vrstevnatých materiálů, které lze snadno exfoliovat a mají zajímavé elektrochemické vlastnosti. Vybrané materiály byly připraveny přímou syntézou z prvků v evakuované ampuli a následně byla ověřena jejich struktura a chemické složení. Objemové krystaly byly poté exfoliovány pomocí ultrazvuku v isopropanolu. Jako pracovní elektroda sloužila elektroda ze skelného uhlíku modifikovaná suspenzí MPS₃. Byly zkoumány základní elektrochemické vlastnosti, jako je stabilita, heterogenní přenos elektronů a následně i detekční vlastnosti.

Testing the possibility of organometallic coordination grids in preparation of bifunctional ligands in protein degradation

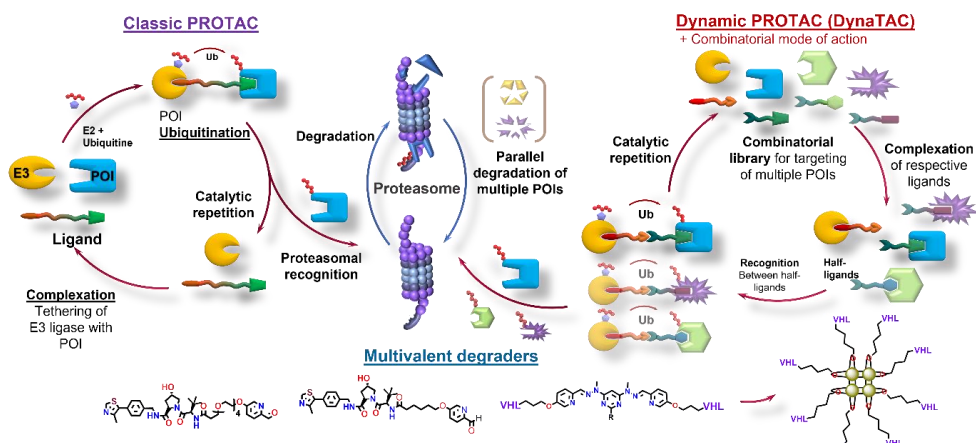
Danylo Dementiev (B3)

Školitel: Ing. Jan Holub, Ph.D.

Multivalency is a key concept in molecular interactions, which refers to the ability of a molecule to simultaneously bind into multiple sites. This principle finds applications in metalldriven self-assembling coordination complexes. The coordination between metal nodes and ligands gives rise to well-defined multivalent structures, such as supramolecular grids.

Recently, the concept of multivalency found an application in various bioactive compounds such as Proteolysis Targeting Chimeras (PROTACs). They work by binding a target protein and E3 ubiquitin ligase to produce a ternary complex, which leads to ubiquitination and degradation of a respective protein. To work properly, the degrader must mediate appropriately positioned complex of sufficient stability. We hypothesize these molecular recognition features could be enhanced by increasing binding valency using coordination architectures as multivalent platforms.

Currently, we are synthesising and testing model ligands and grids based on bishydrazone-type ligands linked with carbon or PEG chains of different lengths. So far more than 10 precursors and compounds, proved by NMR and MS studies, have been synthesised. Finally, prepared motives are tested in cell cultures, cooperating with Department of Biochemistry and Microbiology.



Možnosti přípravy nanomateriálů na bázi železa a jejich možné využití pro přípravu kompozitních nanomateriálů

Matouš Řezníček (B3)

Školitel: Ing. Vilém Bartůněk, Ph.D.

Oxidy, hydroxidy a oxido-hydroxidy na bázi železa v oxidačním stavu II nebo III, či jejich kombinaci, mohou být zajímavé svými magnetickými a dalšími vlastnostmi. Navíc je lze snadno připravit ve formě nanomateriálů nejrůznějších morfologií s dalšími zajímavými vlastnostmi, jako je třeba orientovaný povrch. Tyto materiály je pak možné kombinovat s dalšími nanomateriály a vytvářet kompozity, kombinující například magnetické atributy na železe založených nanomateriálů, se sorpčními nebo katalytickými vlastnostmi dalších materiálů.

V této práci byly testovány přípravy různých materiálů na bázi železa precipitačními nebo hydrolyzačními metodami. Byla provedena základní materiálová charakterizace připravených materiálů a pozorovány jejich magnetické vlastnosti.

B2 - Ústav anorganické chemie – laboratoř D1

KOMISE

doc. Ing. Pavla Nekvindová, Ph.D. (předseda)

Ing. Irena Hoskovcová, CSc. (tajemník)

Ing. Vilém Bartůněk, Ph.D.

Ing. Jan Luxa, Ph.D.

Ing. Tomáš Hlásek, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení – Laboratoř E**

09:30 [Tereza Tůmová](#) (B2, Ing. Jan Holub, Ph.D.)

Osmiové polypyridinové komplexy jako katalyzátory elektrochemické oxidace amoniaku a vody

09:45 [Kateřina Brzáková](#) (B2, Ing. Jan Holub, Ph.D.)

Oxidace amoniaku a vody za pomoci polypyridinových organorutheniových katalyzátorů

10:00 [Martin Szkandera](#) (B2, prof. Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.)

Objasnění příčin chybějících endohedrálních fullerénů

10:15 [Radek Šifalda](#) (B3, Ing. Vlastimil Mazánek, Ph.D.)

Elektrochemická exfoliace vrstevnatých materiálů

10:30 [Stela Kašperanová](#) (B3, doc. Ing. Kateřina Rubešová, Ph.D.)

Optimalizace růstu tenkých oxidových vrstev hydrotermální metodou

10:45 [Marek Zemjanek](#) (B3, Ing. Martin Pižl, Ph.D.)

Elektrochemické a spektroeletrochemické vlastnosti ruténatých polypyridylových komplexů

11:00 [Filip Jiřík](#) (B3, Ing. Jan Holub, Ph.D.)

Komplexy ruthenia na bázi pyridinových ligandů pro katalýzu oxidace amoniaku

11:15 [Dominik Najzar](#) (B3, Ing. Tomáš Hartman, Ph.D.)

Fotodetektory na bázi 2D nanomateriálů

Cca 12:30 **vyhlášení výsledků**

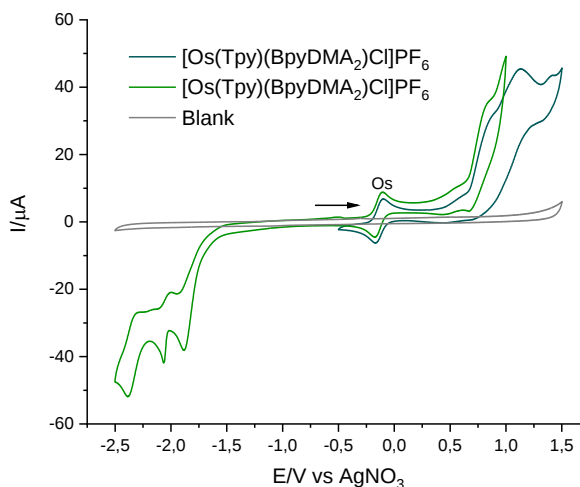
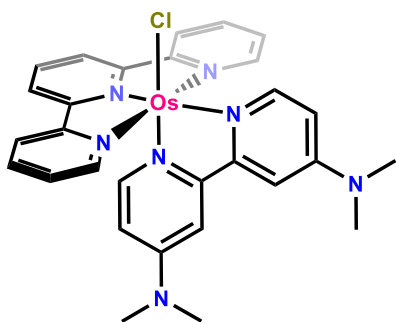
Osmiové polypyridinové komplexy jako katalyzátory elektrochemické oxidace amoniaku a vody

Tereza Tůmová (B1)

Školitel: Ing. Jan Holub, Ph.D.

Příprava vodíku rozkladem vody a amoniaku by výrazně přispěla k rozvoji zelené energie a udržitelného rozvoje. Je známo, že rutheniové komplexy jsou schopny oba zmíněné procesy efektivně katalyzovat. Vyšli jsme tedy z předpokladu, že díky podobnosti ruthenia a osmia, by osmiové komplexy měly být schopny téhož. Reakce na osmiu obvykle probíhají pomaleji než na rutheniu, což by nám také mělo ulehčit studium mechanismu katalýzy, určení reakčních intermediátů a pomoci celkově proces zefektivnit.

Dosud byly připraveny dva komplexy: $[\text{Os}(\text{Tpy})(\text{BpyDMA}_2)\text{Cl}]\text{PF}_6$ a $[\text{Os}(\text{Tpy})(\text{Bpy})\text{Cl}]\text{PF}_6$. Oba již byly zkoumány a elektrochemicky charakterizovány. Z cyklické voltametrie vyplývá, že oba snižují napětí potřebné pro elektrokatalytickou oxidaci amoniaku. V souladu s očekáváním se navíc potvrdilo, že rozdílné použití elektrondonorních substituentů dále pozitivně ovlivňuje napětí, při kterém probíhá oxidace jak Os(II/III) , tak i katalýza.



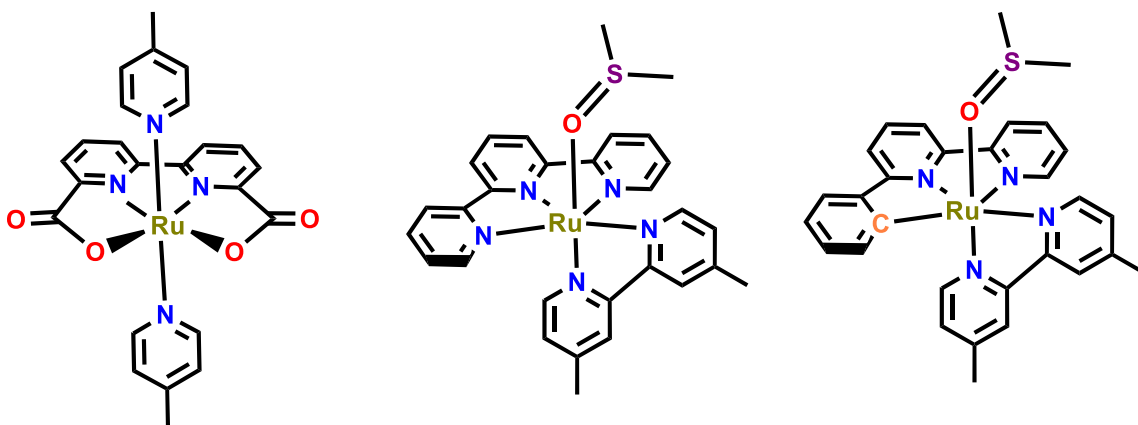
Oxidace amoniaku a vody za pomoci polypyridinových organorutheniiových katalyzátorů

Kateřina Brzáková (B2)

Školitel: Ing. Jan Holub, Ph.D.

Jedním ze způsobů, jak snížit množství používaných fosilních paliv, je výroba levného vodíku pomocí elektrokatalyzované oxidace amoniaku a vody. Amoniak je z tohoto pohledu studován jako alternativa k vodě a také jako medium pro transport vodíku kvůli jeho vysoké energetické hustotě, nízkým nárokům na zkapalnění a nízkým termodynamickým nárokům pro jeho rozklad na N_2 a H_2 .

V této práci používáme komplexy na bázi ruthenia, hlavně kvůli jejich stabilitě a vysoké aktivitě.^{1,2} Je známo, že organické ligandy mohou významně ovlivnit oxidačně redukční potenciál centrálního kovu komplexu a tím i samotnou katalýzu. Naší snahou je připravit různě substituované komplexy ruthenia a sledovat jak elektrondonorní nebo akceptorní skupiny ovlivňují přepětí a účinnost katalýzy. Ke studiu těchto charakteristik používáme elektrochemické metody, především cyklickou volumetrii a diferenční pulsní voltametrii.



Obrázek 1 RuBda^{1,2}

^{1,2}DUNN, Peter L.; COOK, Brian J.; JOHNSON, Samantha I.; APPEL, Aaron M. a BULLOCK, R. Morris. Oxidation of Ammonia with Molecular Complexes. Online. *Journal of the American Chemical Society*. 2020, roč. 142, č. 42, s. 17845-17858. ISSN 0002-7863

Objasnění příčin chybějících endohedrálních fullerenu

Martin Szkandera (B2)

Školitel: Prof. Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.

Konzultant: Doc. Mgr. Michal Straka, Ph.D.

Endohedrální fullereny jsou fascinující molekuly s unikátními vlastnostmi a s potenciálním využitím například v molekulární elektronice nebo solárních panelech. Dosud byly v laboratoři syntetizovány vyšší desítky endohedrálních fullerenu, převážně z řad kovů první až čtvrté skupiny periodické tabulky prvků, mnoha lanthanoidů a některých aktinoidů. Překvapivě však snahy o syntézu endohedrálních fullerenu d-prvků, vyjma třetí až čtvrté skupiny nepřinesly uspokojivé výsledky.

Tato práce se zaměřuje na *in-silico* studium příčin absence endohedrálních fullerenu pozdějších d-prvků. Konkrétně se zaměřujeme na studium IPR endohedrálních fullerenu obsahující jeden atom daného kovu. Porováním vypočtených vlastností známých a dosud nepozorovaných monometalofullerenu se snažíme zdůvodnit, proč byly experimentální pokusy přípravy některých těchto fullerenu metodami elektrického oblouku a laserové ablace neúspěšné.

Elektrochemická exfoliace vrstevnatých materiálů

Radek Šifalda (B3)

Školitel: Ing. Vlastimil Mazánek Ph.D.

Exfoliace vrstevnatých materiálů představuje klíčový proces v oblasti nanotechnologií a materiálového inženýrství, který umožňuje z krystalických materiálů získávat extrémně tenké, jedno – nebo několikovrstvé nanočástice. Tento postup byl poprvé efektivně aplikován při objevování grafenu, což je monovrstva grafitu. V dnešní době se používají i materiály jako dichalkogenidy přechodných kovů (TMDs). Exfoliace se podle postupu/fyzikálního principu rozděluje na: mechanické, chemické, elektrochemické. Elektrochemická exfoliace představuje efektivní a šetrnou metodu získávání 2D materiálů, která nabízí několik výhod oproti tradičním mechanickým a chemickým přístupům. Umožňuje relativně rychlou exfoliaci většího množství materiálu s nižší energetickou náročností a bez nutnosti použití inertního prostředí. Krystal se může uchytit v držáku, ale poté není homogenně interkalován, ale vypadá jako „vějíř“.

Inovativní přístup zahrnuje interkalaci na kapalnou elektrodu, např. rtuť nebo eutektické slitiny (Ga-In-Sn). Tato práce srovnává použití klasické fixace krystalu v držáku a umístění na kapalnou elektrodu. Jako interkalační činidlo se použila kvartérní amoniová sůl – tetrabutylamonium hexafluorofosfát (TBAPF₆). V této práci byla vyzkoušena různá organická rozpouštědla, jako jsou acetonitril, karbonáty a dimethylformamid. Cílem práce je vyladění postupu exfoliace pro získání kvalitních vrstev pro použití v elektronice.

Optimalizace růstu tenkých oxidových vrstev hydrotermální metodou

Stela Kašperanová (B3)

Školitel: doc. Ing. Kateřina Rubešová, Ph.D.

Práce navazuje na předešlý výzkum růstu oxidových vrstev hydrotermální metodou z vrstev kovů (Nb nebo Ti). Tenké oxidové vrstvy BaTiO_3 a LiNbO_3 spadají do skupiny perovskitů. Oba patří mezi nejvíce studované oxidové materiály díky široké škále fyzikálních vlastností a své uplatnění nacházejí v průmyslových odvětvích, např. ve fotonice, optoelektronice či solární energetice.

Cílem bakalářské práce je optimalizovat růst vrstev hydrotermální metodou, se zaměřením na zvýšení prvkové čistoty výchozích kovových vrstev a potlačení kontaminace vrstev skrze hydrotermální aparaturu. Dále budou v práci porovnány vrstvy narostlé z částečně naoxidovaných kovových vrstev, případně přímo z amorfních oxidových vrstev nanesených metodami sol-gel.

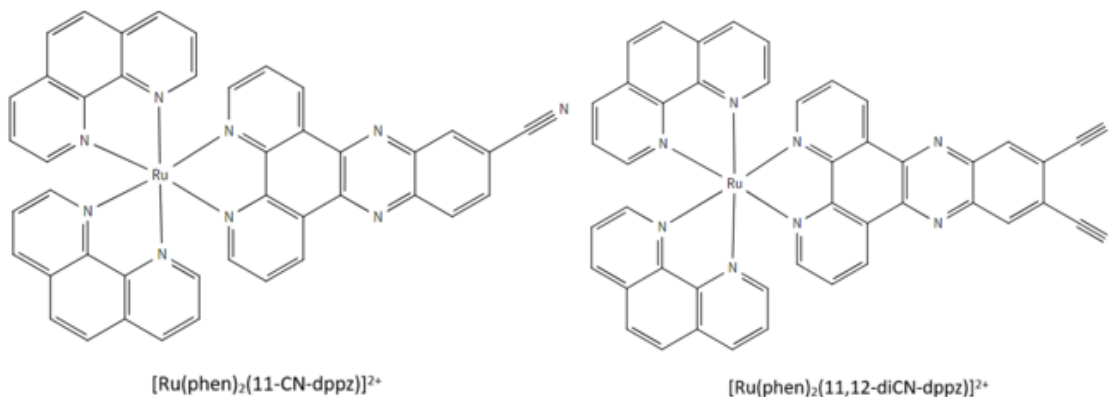
V této prezentaci je shrnuta první část práce, kde jsme srovnávali targety Nb a Ti pro vakuové naprašování od různých dodavatelů, s důrazem na kontaminaci Fe, která byla v minulosti hlavní příčinou nehomogenního růstu tenkých vrstev při hydrotermálním růstu. Železo totiž vytváří stabilní fáze s niobem i lithiem a tím blokuje homogenní růst LiNbO_3 . Zároveň byly srovnány dvě různé vakuové naprašovačky, protože experimentální set-up může míru kontaminace také ovlivnit. Naprášené kovové vrstvy byly charakterizovány metodami XRF a XRD, a také byla srovnána mikrostruktura vrstev pomocí SEM.

Elektrochemické a spektroelektrochemické vlastnosti ruténatých polypyridylových komplexov

Marek Zemjanek (B3)

Školiteľ: Ing. Jan Holub, Ph.D.

Fotofyzikálne a elektrochemické vlastnosti polypyridylových komplexov ruténia sa uplatňujú vo viacerých aplikáciách. Jednou z nich je interkalácia do DNA, pre ktorú sa skúma využitie rôznych typov substituovaných polypyridylových ligandov, ako napríklad dppz (dipyridofenazín), 11-CN-dppz (11-kyanodipyridofenazín) alebo 11,12-diCN-dppz (11,12-dikyanodipyridofenazín). Kyanidová skupina naviazaná na ligandoch znižuje redukčný potenciál zlúčenín a tým uľahčuje oxidáciu DNA. Náplňou mojej práce je syntéza ruténatých komplexov, ich elektrochemické a spektroelektrochemické štúdium. Ide o komplexy so všeobecnou štruktúrou $[\text{Ru}(\text{NN})_2(\text{Int})](\text{PF}_6)_2$, kde NN je phen (1,10-fenantrolín) alebo phen-CN (2-kyano-1,10-fenantrolín) a Int je dppz, 11-CN-dppz alebo 11,12-diCN-dppz. Doposiaľ boli syntetizované ligandy: 11-CN-dppz, 11,12-diCN-dppz a phen-N-oxid (1,10-fenantrolín-1-oxid), z ktorého bude syntetizovaný phen-CN. Séria komplexov na báze $[\text{Ru}(\text{phen})_2(\text{Int})](\text{PF}_6)_2$ už bola pripravená (viď Obrázok 1).



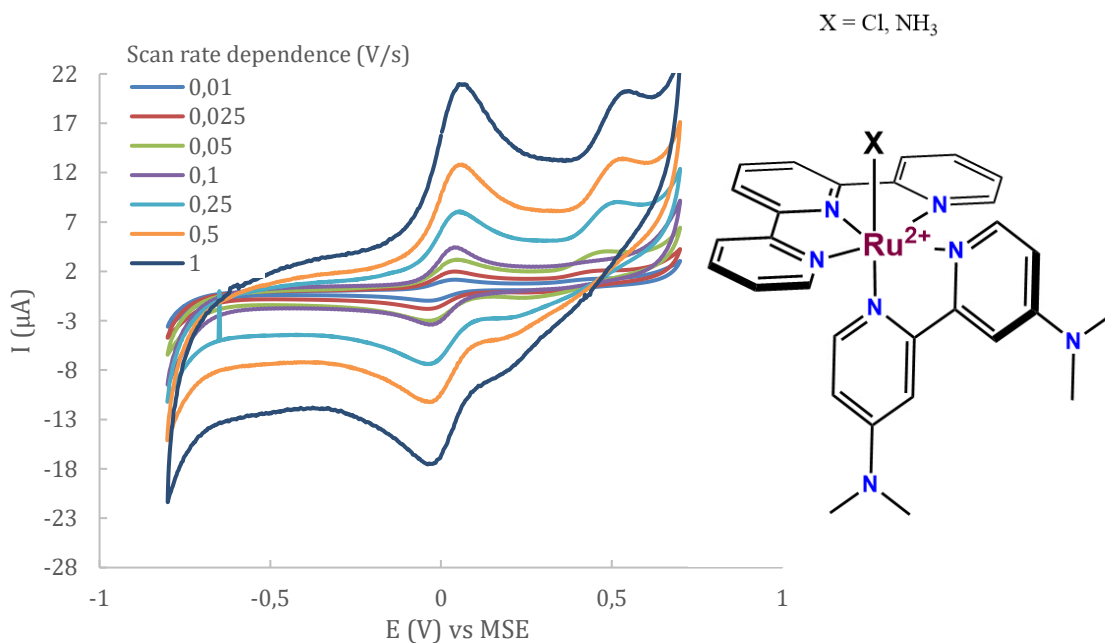
Obrázok 1: $[\text{Ru}(\text{phen})_2(\text{Int})]^{2+}$

Komplexy ruthenia na bázi pyridinových ligandů pro katalýzu oxidace amoniaku

Filip Jiřík (B3)

Školitel: Ing. Jan Holub, Ph.D.

Není tajemstvím, že existuje velká snaha o nahrazení fosilních paliv ekologičtější a dlouhodobě udržitelnou náhradou. Velké naděje jsou již roky vkládány do vodíku, jakožto bezemisního paliva. Jeho problémem stále zůstává „zelená“ příprava a vysoké nároky na transport. Vedle elektrolýzy vody jako hlavního studovaného procesu, se v současné době studuje i rozklad amoniaku jakožto doplňkového procesu. V případě nalezení vhodných katalyzátorů by mohl amoniak sloužit k ukládání vodíku, k jeho přepravě a k následnému uvolnění. Hlavní výhodou transportu amoniaku oproti vodíku je možnost využití již existující infrastruktury, nižší přepravní náklady a větší bezpečnost. V mé práci se zabývám syntézou různě substituovaných komplexů ruthenia. Tyto jsou tvořeny ligandy odvozenými od bipyridinu a terpyridinu obsahujícími elektrodonorní funkční skupiny. Snažím se vyhodnotit, který ze substituentů nejpříhodněji ovlivňuje katalytickou oxidaci amoniaku a za jakých podmínek. Ke studiu se využívá různých elektrochemických metod (např: cyklická voltametrie, Diferenční pulzní voltametrie, elektrolýza) měřené jak ve vodném, tak i organickém prostředí, přičemž sledujeme především nástup katalýzy při nižším napětí.



Fotodetektory na bázi 2D nanomateriálů

Dominik Najzar (B3)

Školitel: Ing. Tomáš Hartman, Ph.D.

Tato práce se zabývá přípravou senzorů využívajících 2D kompozitní materiály na bázi křemíku a germania povrchově modifikované organickými skupinami. Tyto materiály patří do skupiny grafenových analogů, které mají významné fyzikálně-chemické vlastnosti, díky čemuž se můžou uplatnit ve vývoji detekčních zařízení. Cílem práce je syntéza Zintlových fází $\text{CaSi}_x\text{Ge}_{(2-x)}$ s různými poměry Si a Ge a jejich následná deinterkalace za vzniku tenkých kompozitních vrstev $\text{Si}_x\text{Ge}_{(1-x)}\text{H}$. Exfoliované materiály se následně podrobí chemické modifikaci pomocí slitiny NaK, kdy se na jejich povrch naváže alkylový řetězec, což může ovlivnit jejich fyzikálně-chemické vlastnosti. Modifikací povrchu se očekává změna stability a citlivosti těchto materiálů, což je zásadní pro jejich využití při detekci různých látek.

M1 - Ústav anorganické chemie – místnost A210B

KOMISE

prof. Dr. Ing. David Sedmidubský (předseda)

Ing. Jan Holub, Ph.D. (tajemník)

prof. Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.

Ing. Vlastimil Mazánek, Ph.D.

Ing. Hana Kotoučová, Ph.D.

Ing. Anna-Marie Lauermannová

PROGRAM

09:00 **zahájení – Laboratoř E**

09:30 [Bc. Oskar Chmel](#) (M1, prof. Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.)

Integrace vysokých hmotnostních koncentrací umělých pinningových center do GdBCO/Ag supravodivých monokrystalů

09:45 [Bc. Matyáš Jandík](#) (M1, Ing. Vilém Bartůněk, Ph.D.)

Příprava a charakterizace nanočástic nových směsných fluoridů vzácných zemin

10:00 [Bc. Marek Jankovský](#) (M1, Ing. Mastný Libor, CSc.)

Reakce karbidu křemíku ve vodou stabilizovaném plazmatu

10:15 [Bc. Jiří Prikner](#) (M1, Ing. Vít Jakeš, Ph.D.)

Vliv sintrovacího činidla a programu SPS na $\text{Lu}_2\text{Hf}_2\text{O}_7$

10:30 [Bc. Petr Kupka](#) (M2 Ing. Jan Luxa, Ph.D.)

Třídění exfoliovaných částic WSe_2 pomocí hustotního gradientu v centrifugálním poli

10:45 [Bc. Tomáš Chvojka](#) (M2, doc. Ing. Kateřina Rubešová, Ph.D.)

Studium vlivu aditiv na vlastnosti koncentrovaných elektrolytů pro vodné baterie

11:00 [Bc. Sára Ryvolová](#) (M2, doc. Ing. Pavla Nekvindová, Ph.D.)

Defekty v monokrystalickém a nanokrystalickém ZnO

Cca 12:30 **vyhlášení výsledků**

Integrace vysokých hmotnostních koncentrací umělých pinningových center do GdBCO/Ag supravodivých monokrystalů

Bc. Oskar Chmel (M1)

Školitel: prof. Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.

Optimální množství umělých pinningových center je klíčové pro zlepšení některých supravodivých vlastností, zejména kritické proudové hustoty. Na základě předchozího výzkumu byla vybrána vhodná pinningová fáze, která byla integrována do GdBCO/Ag supravodičů připravených metodou růstu SDMG ve vysokých hmotnostních koncentracích. Takto byly úspěšně připraveny vzorky s hmotnostní koncentrací až 13 % pinningové fáze, což je několikanásobně více než u konvenční metody růstu TSMG a dalece přesahuje využitelné množství pinningu. I přes takto vysoké přídavky nedocházelo k výrazným růstovým vadám ani k výraznému zhoršení supravodivých vlastností, což ukazuje vysokou robustnost SDMG růstu a možnosti další optimalizace supravodičů pro náročné aplikace. Tyto supravodiče vykazují vhodné růstové parametry pro aplikace v průmyslu a naleznou uplatnění v oblastech, kde jsou kladeny vysoké nároky zachycení silných a homogenních magnetických polí, jako jsou undulátory nebo magnetické rezonance.

Příprava a charakterizace nanočástic nových směsných fluoridů vzácných zemin

Bc. Matyáš Jandík (M1)

Školitel: Ing. Vilém Bartůněk, Ph.D.

Fluoridy vzácných zemin (Sc, Y a lanthanoidy) mají zajímavé vlastnosti, které je činí vhodnými pro různé aplikace. Mohou se využít ve formě krystalů, skla, i rozptýlených nanočástic. Již dlouhou dobu se věnuje pozornost výzkumu jejich nelineárních optických vlastností (up-konverze, down-konverze). Typickým příkladem je hexagonální NaYF_4 dopovaný ytterbiem a erbiem, který má up-konverzní vlastnosti využitelné v biomedicinálním výzkumu. Cílem práce je otestovat různé možnosti přípravy podobných sloučenin fluoračními solvotermálními reakcemi. Připravené produkty jsou nejprve charakterizovány práškovou rentgenovou difrakcí a vybrané vzorky jsou dále charakterizované elektronovou mikroskopií a dalšími metodami.

Reakce karbidu křemíku ve vodou stabilizovaném plazmatu

Bc. Marek Jankovský (M1)

Školitel: Ing. Mastný Libor, CSc.

Karbid křemíku je keramický materiál, známý svojí tepelnou stabilitou a chemickou odolností. Tato práce se zabývá studiem chování karbidu křemíku za teplot vysoko nad jeho rozkladnou teplotou, dosahovanou za pomoci vodou stabilizovaného plazmového hořáku WSP-H500, v různých prostředích. Je známo, že se SiC rozkládá při teplotách nad 2300 °C, ale již není přesně zjištěno, jaké produkty v různých prostředích tento rozklad přináší. Proto bylo provedeno několik experimentů v prostředí bohatém na kyslík, nebo v inertní atmosféře tvořené za pomoci plynného dusíku. Získané vzorky byly podrobeny fázové a strukturní analýze a vyhodnoceny rentgenovou difrakční analýzou (XRD) a skenovací elektronovou mikroskopií (SEM).

Vliv sintrovacího činidla a programu SPS na $\text{Lu}_2\text{Hf}_2\text{O}_7$

Bc. Jiří Prikner (M1)

Školitel: Ing. Vít Jakeš, Ph.D.

Scintilátor je materiál, který dokáže přeměnit vysokoenergetické záření, například rentgenové nebo gama záření, na viditelné světlo. Při interakci částice vysokoenergetického záření se scintilačním materiálem dojde ke vzniku páru elektron-díra. Při následném scintilačním mechanismu dojde k jejich rekombinaci a emisi krátkého záblesku viditelného záření – a právě ten nám umožňuje vysokoenergetické záření detekovat. Tato vlastnost scintilátorů je klíčová v řadě aplikací, od lékařského zobrazování přes detekci radiace v průmyslu a bezpečnostním sektoru až po vědecké experimenty, kde slouží k přesnému měření a sledování radiace.

Příspěvek se zaměřuje na vliv slinovacího činidla LiF a režimů procesu SPS (spark plasma sintering) na vlastnosti $\text{Lu}_2\text{Hf}_2\text{O}_7$, materiálu se strukturou pyrochloru, který je perspektivní jako matrice pro scintilační aplikace. U připravených vzorků bylo charakterizováno fázové složení pomocí rentgenové difrakce a mikrostruktura pozorována pomocí skenovací elektronové mikroskopie.

Třídění exfoliovaných částic WSe₂ pomocí hustotního gradientu v centrifugálním poli

Bc. Petr Kupka (M2)

Školitel: Ing. Jan Luxa, Ph.D.

WSe₂ je vrstevnatý materiál ze skupiny dichalkogenidů přechodných kovů. Tyto materiály je možné dobře rozdělit na jednotlivé vrstvy. Tyto vrstvy pak mají zajímavé aplikace jako bateriové materiály, katalyzátory a další specializované aplikace.

Tato práce se zabývala optimalizací exfoliace WSe₂ a následným třídění takto získaných částic. Exfoliace byla provedena kombinací elektrochemické a mechanické exfoliace. Mechanická exfoliace byla usnadněna předchozí elektrochemickou interkalací velkého kationtu tetrabutylamonium hexafluorofosfátu. Samotné oddělení vrstev bylo provedeno pomocí hrotového ultrazvuku a jejich stabilizace pomocí surfaktantu Tween 80.

Takto rozdělené částice a jejich velikosti odpovídají datům zjištěným pomocí analyzítpru velikosti částic. Skutečné chování částic závisí na jejich tvaru, a je tedy potřeba komplikovanější postup kombinující více analytických technik pro stanovení skutečných rozměrů částice z teoretické velikosti koule o ekvivalentním objemu.

Studium vlivu aditiv na vlastnosti koncentrovaných elektrolytů pro vodné baterie

Bc. Tomáš Chvojka (M2)

Školitel: doc. Ing. Kateřina Rubešová, Ph.D.

Vodné dual-iontové baterie představují perspektivní alternativu pro udržitelné ukládání energie k Li-ion bateriím. V dual-ion bateriích do elektrochemické reakce vstupují jak kationty, tak anionty. Jejich hlavními výhodami je možnost dosáhnout vysokého výstupního napětí a hustoty energie, problematická je nicméně cyklizační stabilita užívaných elektrodových materiálů. Vodný elektrolyt představuje levné a bezpečné prostředí, zároveň ale komplikuje užití některých elektrodových materiálů kvůli svému úzkému elektrochemickému oknu. Cílem této práce je modifikace vlastností elektrolytu typu „voda v soli“ pomocí polymerních aditiv, surfaktantů a zásad. Hlavním studovaným parametrem je vliv těchto aditiv na šíři elektrochemického okna a sledování elektrochemické stability u systémů, které lze s těmito elektrolyty zkonstruovat.

Defekty v monokrystalickém a nanokrystalickém ZnO

Bc. Sára Ryvolová (M2)

Školitel: doc. Ing. Pavla Nekvindová, Ph.D.

ZnO je v současnosti jedním z nejstudovanějších materiálů, a to díky jeho ojedinělým vlastnostem. Monokrystalický ZnO krystalizuje ve dvou uspořádáních, jejichž základem je hexagonální (wurtzit), nebo kubická struktura (sfalerit a halit). Jedná se o polovodič typu II-VI s vysokou energií zakázaného pásu (3,37 eV za pokojové teploty). V současnosti se ZnO uplatňuje ve fotodetektorech, katalyzátorech či plynových senzorech. Jeho neschopnost absorbovat viditelné světlo, špatný transport náboje a nízká vodivost však omezují jeho použití v popsáných součástkách. Nedávno bylo zjištěno, že zavedení defektů jako jsou kyslíkové a zinkové vakance do ZnO může účinně zlepšit stávající vlastnosti nebo vést k jiným novým a velmi zajímavým. K detekci defektů lze využít společně s luminiscencí také metodu TEM a EPR, avšak jejich charakterizace není snadná. Tato práce se zaměřuje na studium identifikace defektů ve struktuře monokrystalu ZnO společně se simulací nedefektních i defektních struktur a výpočet jejich kohezních energií. Navíc byla vyzkoušena také možnost růstu nanokrystalického ZnO metodu hydrotermálního růstu.