



FAKULTA
CHEMICKÉ TECHNOLOGIE
VŠCHT PRAHA

Studentská Vědecká Konference

2025

20.11.2025

SBORNÍK ANOTACÍ

SPONZOŘI



lach:ner

MERCK

 LUMMUS
TECHNOLOGY

 VUAB pharma

 LIBER MENDEL
EURASIAN

 PRO.MED.CS
Praha a.s.

MARS

Formulace pevných lékových forem a topických přípravků

MÍSTO: A77C

KOMISE

doc. Mgr. Jarmila Zbytovská, Dr. rer. nat. (předsedkyně)

Ing. Tereza Školáková, Ph.D. (tajemnice)

Ing. Jan Patera, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **slavnostní zahájení v AI**

09:45 **zahájení soutěže v A77c**

Tereza Hudečková

Studium rychlosti uvolňování léčivé látky z pevných disperzí pomocí bifázické disoluce

Karolína Chalašová

Vývoj kombinovaných nanočástic pro topickou aplikaci

Martin Králík

Studium liqiusolid systémů indomethacinu

Tomáš Kuba

Vývoj experimentálního postupu pro hodnocení účinnosti mycích přípravků při čištění výrobního zařízení

Běla Lukavcová

Vliv typu ko-procesování na povrchové vlastnosti a stabilitu API

Tereza Ratajová

Organická syntéza neurosteroidů a jejich transdermální aplikace

Kristýna Šáková

(A)IDR jako nástroj pro hodnocení rozpouštění pevných disperzí candesartan cilexetil

vyhlášení výsledků

Studium rychlosti uvolňování léčivé látky z pevných disperzí pomocí bifázické disoluce

Bc. Tereza Hudečková

Ročník studia: M1

Školitel: Ing. Tereza Školáková, Ph.D.

Perorální podání léčiv patří mezi nejrozšířenější aplikační cesty. Z technologického hlediska však představuje značnou výzvu, a to zejména u látek s nízkou rozpustností ve vodném prostředí. Zlepšení jejich disolučního profilu lze dosáhnout různými technologickými přístupy, mezi nimiž má významné postavení tvorba pevných disperzí, v nichž je léčivá látka rovnoměrně rozptýlena v matrici tvořené polymerním nosičem.

Tato práce se zaměřuje na studium disolučního chování ternárních pevných disperzí telmisartanu s využitím polymerů Soluplus® a Kollidon® 30 v různých hmotnostních poměrech. Disoluční chování bylo hodnoceno pomocí bifázické disoluční zkoušky, která na rozdíl od běžných metod, umožňuje sledovat nejen rychlost rozpouštění, ale i přestup účinné látky do lipofilní fáze simulující absorpci přes biologické membrány. Připravené systémy byly dále charakterizovány práškovou rentgenovou difrakcí a hodnoceny z hlediska vlivu hmotnostního poměru složek, přísadky CaCO_3 a typu disolučního média na uvolňování účinné látky. Výsledky ukazují, že vhodná volba složení a prostředí může výrazně ovlivnit rychlost i rozsah disoluce a absorpce telmisartanu.

Vývoj kombinovaných nanočástic pro topickou aplikaci

Bc. Karolína Chalašová

Ročník studia: M2

Školitel: doc. Mgr. Jarmila Zbytovská, Dr.rer.nat.

Klíčovou výzvou topicky aplikovaných léčiv představuje překonání kožní bariéry, *stratum corneum*. Enkapsulace léčiv do vhodných nanočásticových systémů otevírá možnost překonat nejen tyto bariérové vlastnosti kůže. V současné době je vyvíjena řada nanočástic a právě polymerní nanočástice na bázi kopolymeru PLGA charakteristické svou biokompatibilitou a stabilitou je činí ideálními pro tvorbu pokročilých topických formulací.

Kombinované polymerní nanočásticové systémy představují moderní směr ve vývoji léčiv, který umožňuje inkorporaci více účinných látek do jedné nosné matrice. Tento přístup zvyšuje terapeutický efekt nejen díky možnému synergickému působení, ale také umožňuje jejich cílení a uvolnění přímo v místě aplikace. Výsledkem jejich topické aplikace je vyšší účinnost při nižší dávce, omezení negativních účinků při systémovém podání a zefektivnění léčby.

Tato práce se zaměřuje na optimalizaci přípravy kombinovaných PLGA nanočástic obsahujících indometacin a kofein metodou nanoprecipitace, přičemž primárním cílem bylo dosažení co nejvyšší enkapsulační účinnosti se současným zachováním dlouhodobé stability, která byla hodnocena pomocí měření velikosti a indexu polydisperzity nanočástic v čase. Účinnost nejstabilnějších formulací byla ověřena pomocí *ex vivo* permeační studie, která sledovala, jak ko-enkapsulace léčiv do PLGA nanočástic a samotný výběr polymeru pro tvorbu nanočástic ovlivňuje transdermální a dermální záchyt obou synergicky působících léčiv používaných k léčbě zánětlivých stavů kůže.

Studium liquisolid systémů indomethacinu

Bc. Martin Králík

Ročník studia: M2

Školitel: Ing. Tereza Školáková, Ph.D.

Liquisolid systémy (LSS), neboli systémy kapalina v pevné fázi, představují moderní lékovou technologii, která umožňuje zlepšit rozpustnost a biologickou dostupnost špatně rozpustné léčivé látky. V této práci byl pro jejich studium jako modelová léčivá látka zvolen špatně rozpustný indomethacin. Jako excipienty k přípravě LSS byly použity PEG 200, PEG 300 a PEG 400 jako rozpouštědla, Neusilin® US2 jako nosič a Aerosil® 200 jako obalovací materiál. Hlavním cílem formulace bylo, aby připravené systémy byly vhodnou náplní tvrdých želatinových tobolek. Z tohoto důvodu bylo nejprve připraveno několik LSS s různými hmotnostními poměry nosiče ku rozpouštědlu, které byly posouzeny z hlediska jejich sytného objemu. Vybrané systémy byly dále podrobeny disoluční zkoušce (konkrétně USP4). Bylo obecně pozorováno, že připravené LSS zvýšily rychlost uvolňování dané léčivé látky.

Vývoj experimentálního postupu pro hodnocení účinnosti mycích přípravků při čištění výrobního zařízení

Bc. Tomáš Kuba

Ročník studia: M2

Školitel: Ing. Adam Karaba, Ph.D.

Ve farmaceutickém průmyslu hraje křížová kontaminace velkou roli. Z tohoto důvodu se musí všechny výrobní zařízení po výrobě umýt, aby následná výroba nebyla kontaminována rezidui předchozího přípravku. Existují validované mycí postupy pro každý přípravek, při kterých se pomocí stěrů určuje obsah reziduí. K tomuto mytí se často využívají bazické průmyslové detergenty, ale některé látky se vzhledem ke své rozpustnosti stále myjí obtížně a obsah báze v nich obsažený se dle výrobce může pohybovat v určitém rozmezí. Vzhledem k tomuto byl určen obsah hydroxidu ve vzorku používaného detergentu, následně byl vytvořen zjednodušený postup mytí pro laboratorní použití a pomocí něho byly myty vzorky granulátu ibuprofenu poskytnuté společností Zentiva. Při mytí bylo měněno množství hydroxidu obsaženého v dávkovaném detergentu a sledována závislost množství zbylého ibuprofenu na obsahu hydroxidu. Tato závislost byla prokázána při vyšších koncentracích hydroxidu v detergentu. Výsledky této práce mají ukázat, zda a popřípadě jak moc může být ovlivněna účinnost mytí pro uváděné rozmezí obsahu báze v praxi ve farmaceutické výrobě.

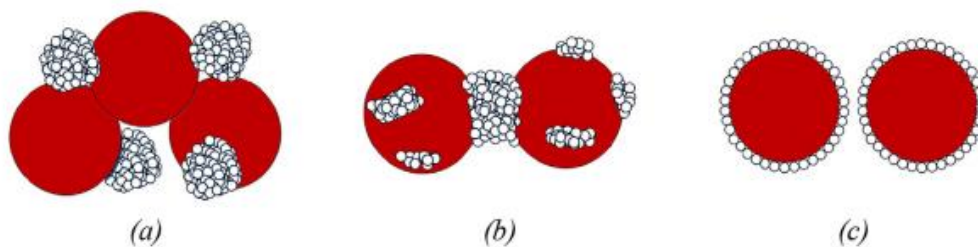
Vliv typu ko-procesování na povrchové vlastnosti a stabilitu API

Bc. Běla Lukavcová

Ročník studia: M2

Školitel: Ing. Jan Patera, Ph.D.

Potahování částic představuje důležitý proces pro úpravu povrchových vlastností pevných materiálů, který nachází široké uplatnění zejména ve farmaceutickém průmyslu. Jeho cílem je modifikace vlastností částic, které může ovlivnit např. řízení uvolňování léčivé látky, její stabilitu, maskování její chuti nebo zlepšení tokových vlastností. Tradičně se těchto úprav dosahuje tzv. mokrým potahováním, které však vyžaduje sušení a je spojeno s vysokou tvorbou organických odpadů. Alternativou je suché potahování, proces probíhající bez použití kapalin, při němž dochází k mechanickému připevnění jemných částic na větší hostitelské částice. Oproti mokrému potahování tak odpadá nutnost sušení, čímž se tento proces zjednodušuje a snižuje se riziko degradace u látek citlivých na vlhkost. Suché potahování umožňuje cílenou úpravu povrchových vlastností, avšak není vhodný pro materiály náchylné k poškození působením vysokého mechanického stresu. Cílem této práce bylo porovnat dvě techniky suchého potahování (vibrační a planetový kulový mlýn) a zhodnotit vliv procesu na povrchové vlastnosti a stabilitu API, zejména na disperzní složku povrchové energie a změnu krystalinity. Výsledky ukazují, že délka i typ zpracování významně ovlivňují jak krystalickou strukturu, tak míru degradace léčivé látky.



Organická syntéza neurosteroidů a jejich transdermální aplikace

Tereza Ratajová

Ročník studia: B3

Školitel: doc. Mgr. Jarmila Zbytovská, Dr. rer. nat.

Práce se zaměřuje na organickou syntézu a charakterizaci vybraných neurosteroidů s možným využitím pro transdermální aplikaci. Neurosteroidy jsou skupinou látek, které ovlivňují centrální nervový systém prostřednictvím mnoha receptorů, jako jsou například GABA_A receptory a NMDA receptory. V současnosti jsou neurosteroidy zkoumány pro své možné terapeutické využití v oblasti poruch centrální nervové soustavy. Transdermální podání je perspektivním způsobem, jak obejít první průchod játry, a také jde o možnost, jak prodloužit uvolňování léčiva do organismu. Cílem práce bylo připravit sloučeniny pomocí deacetylace vhodných prekurzorů, purifikovat je a ověřit jejich struktury pomocí analytických metod. Další částí bylo provedení pilotního permeačního pokusu se zvoleným neurosteroidem a také příprava LNC nanočástic látek ve dvou formulacích. U LNC nanočástic byla sledována jejich velikost při různých teplotních podmínkách, za účelem posouzení jejich stability. Poznatky získané v této práci mohou přispět k dalšímu výzkumu transdermální aplikace neuroaktivních látek.

(A)IDR jako nástroj pro hodnocení rozpouštění pevných disperzí candesartan cilexetilu

Bc. Kristýna Šáková

Ročník studia: M2

Školitel: Ing. Tereza Školáková, Ph.D.

Cílem práce byla příprava pevných disperzí kryogenním mletím, tavením a odpařováním rozpouštědla a dále studium zdánlivé pravé rychlosti rozpouštění, (A)IDR, ve fosfátovém pufru. Jako modelová léčivá látka byl použit špatně rozpustný candesartan cilexetil a jako polymerní nosič byl zvolen Kollidon® VA 64. Pevné disperze byly připraveny v hmotnostním poměru API-nosič 1:1, 1:2, 1:3, 1:4 a 1:5. Pevné disperze byly poté charakterizovány XRPD. Rozpouštění bylo studováno pomocí metody pravé disoluce dle Wooda. Bylo zjištěno, že všechny pevné disperze připravované odpařováním rozpouštědla a tavením vykazovaly amorfni charakter. Zvýšení poměru polymeru tedy nevedlo k dalšímu zvyšování amorfniho podílu. Pevné disperze připravené kryogenním mletím naopak vykazovaly při nižším obsahu polymeru přítomnost krystalické fáze. Disolučními testy bylo zjištěno, že IDR čisté API je výrazně menší než IDR (získáno korelací na objemové zastoupení API) v pevných disperzích. Dále výsledky ukázaly, že IDR bylo nejvyšší při vyšším obsahu API, tedy poměrech 1:1 a 1:2 v případě disperzí připravených metodou tavení a odpařování rozpouštědla. U pevných disperzí, které byly připraveny kryogenním mletím, bylo IDR vyšší při vyšším obsahu polymeru.

Biologicky aktivní látky a pokročilé materiály pro jejich zachycení a analýzu

MÍSTO: Zasedací místnost děkanátu FCHT (B2414)

KOMISE

doc. Ing. Pavel Čapek, CSc. (předseda)

Ing. Lada Dolejšová Sekerová, Ph.D. (tajemnice)

prof. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.

Ing. Pavlína Komínová

PROGRAM

09:00 slavnostní zahájení v AI

09:45 zahájení soutěže v B2414

Beata Balicharová

Kyselina kávová v léčivých rostlinách: extrakce a kvantifikace pomocí LC-MS

Petr Danel

Polymery s pamětí: selektivní otisk thymolu vytvořený emulzní polymerací

Markéta Kněžková

Chytré sorpční materiály nové generace: suspenzní MIPy s templátem thymolu.

Aneta Nechutová

Kysele katalyzovaná esterifikace kyseliny kávové vybranými alkoholy

Lukáš Syrový

Příprava dimethylacetalu citralu

Eliška Zdráhalová

Od blokové polymerace ke srážecí: jak množství rozpouštědla ovlivňuje morfologii a adsorpční vlastnosti polymeru

vyhlášení výsledků

Kyselina kávová v léčivých rostlinách: extrakce a kvantifikace pomocí LC-MS

Bc. Beata Balicharová

Ročník studia: M2

Školitelka: Ing. Lada Dolejšová Sekerová, Ph.D.

Fenolické sloučeniny jsou významnými rostlinnými sekundárními metabolity, které mohou plnit řadu různých funkcí. Důležitým rostlinným fenolem je kyselina kávová, patřící do skupiny hydroxyskořicových kyselin. Kyselina kávová může působit proti úzkostem, trombocytopenii, dyspepsii, diabetu, obezitě nebo oxidačnímu stresu. Přirozeně se vyskytuje v řadě léčivých rostlin, mimo jiné v ibišku súdánském (*Hibiscus sabdariffa*) nebo šalvěji lékařské (*Salvia officinalis*). V této práci byly porovnávány čtyři extrakční metody (ultrazvuk, macerace, digesce a odvařování) s osmi různými rozpouštědly (aceton, 50% (v/v) aceton, diethylether, ethanol, 50% (v/v) ethanol, methanol, 50% (v/v) methanol a voda) s cílem vybrat nejvýtečnější metodu pro extrakci kyseliny kávové z květů ibišku súdánského. Také byla vyvinuta LC-MS metoda ke kvantifikaci množství kyseliny kávové. Nejefektivnější metodou bylo odvařování s vodou (14,6 µg/g po 30 min) a digesce při 60 °C s 50% (v/v) methanolem (12,8 µg/g po 24 h). Dále byl porovnáván obsah kyseliny kávové v ibišku a šalvěji při digesci za stejných podmínek. Šalvěj obsahovala mnohanásobně více kyseliny kávové (349,7 µg/g po 24 h) než ibišek (12,8 µg/g po 24 h).

Polymery s pamětí: selektivní otisk thymolu vytvořený emulzní polymerací

Bc. Petr Danel

Ročník studia: M2

Školitel: Ing. Lada Dolejšová Sekerová, Ph.D.

Konzultant: Ing. Anna Šmídová

Molekulárně otištěné polymery (MIPy) nacházejí široké uplatnění v separačních procesech, při řízeném uvolňování léčiv i v katalýze. Tato práce byla zaměřena na optimalizaci přípravy MIPů s využitím thymolu jako templátu emulzní polymerací. Byl sledován vliv funkčních monomerů (metakrylová kyselina – MA a 2-hydroxyethylmetakrylát – HEMA), síťovacích činidel (ethylenglykol dimetakrylát – EGDMA a 1,4-butandiol dimetakrylát – BDDMA) a nepolárních rozpouštědel (toluen – TOL, 1,1-dichlormethan – DCM) na vlastnosti připravených polymerů. Hodnocena byla adsorpční kapacita vůči thymolu při extrakci na pevné fázi (SPE) a morfologie připravených částic. Na výtěžky měla výrazný vliv kombinace monomeru a síťovacího činidla – systémy s HEMA a BDDMA v toluenu dosahovaly výtěžků vyšších než 93 %, což je o více než 20 % více než u kombinace MAA–EGDMA. MIPy připravené emulzní polymerací tvořily průhledné mikročástice a výrazně se lišily od analogu vzniklého blokovou polymerací. Všechny testované polymery adsorbovaly více než 99 % naneseného thymolu a zároveň jej bylo možné plně eluovat methanolem. Emulzní polymerace se prokázala jako perspektivní přístup k přípravě MIPů s dobře definovanou morfologií a vynikajícími adsorpčními vlastnostmi.

Chytré sorpční materiály nové generace: suspenzní MIPy s templátem thymolu

Bc. Markéta Kněžková

Ročník studia: M2

Školitel: Ing. Lada Dolejšová Sekerová, Ph.D.

Tato práce se zabývá přípravou molekulárně otištěných polymerů (MIPů) metodou suspenzní polymerace za využití thymolu jako templátové molekuly. Na základě dostupné literatury byly zvoleny reakční podmínky, které byly dále optimalizovány s cílem ověřit vliv použitého funkčního monomeru na vlastnosti polymeru. Následně byl templát odstraněn a ověřena adsorpční účinnost připravených polymerů v extrakci na pevné fázi (SPE).

Připravené polymery byly charakterizovány vybranými metodami. Bylo zjištěno, že největší podíl částic tvořila frakce velikostí nad 425 μm , přičemž pro SPE byla použita frakce 45–75 μm . Vzniklé MIPy vykazovaly dostatečnou tepelnou stabilitu až do teplot okolo 260 $^{\circ}\text{C}$ a také poměrně velký specifický povrch ($S_{\text{BET}} = 270 \text{ m}^2/\text{g}$).

Všechny syntetizované polymery vykazovaly vysokou adsorpční účinnost (až 94 %) při zachycení thymolu z vodného roztoku. Dále bylo prokázáno téměř úplné uvolnění thymolu (nad 99 %) při eluci methanolem. Výsledky ukazují, že suspenzně připravené MIPy představují perspektivní adsorbenty. Práce přináší důležité podklady pro optimalizaci syntézy MIPů a jejich další testování v selektivních analytických aplikacích.

Kysele katalyzovaná esterifikace kyseliny kávové vybranými alkoholy

Bc. Aneta Nechutová

Ročník studia: M1

Školitel: doc. Ing. Eliška Vyskočilová, Ph.D.

Kyselina kávová patří mezi přírodní fenolové kyseliny s antioxidačními a protizánětlivými účinky, jejíž estery nacházejí potenciální uplatnění ve farmaceutickém, kosmetickém a potravinářském průmyslu. Tyto estery vykazují oproti kyselině kávové zlepšenou lipofilitu, stabilitu a biologickou dostupnost. Cílem této práce byla optimalizace podmínek kysele katalyzované esterifikace kyseliny kávové alkoholy, přičemž byl zkoumán vliv druhu a množství katalyzátoru, reakční teploty a poměru reaktantů. Nejvhodnějším katalyzátorem se ukázala být homogenní kyselina p-toluensulfonová (PTSA), která při přípravě methylesteru poskytla 78% konverzi a 78% výtěžek s 100% selektivitou. Přestože s kyselinou sírovou bylo dosaženo 100% konverze, výtěžek činil jen 81 %, což naznačuje vznik vedlejších produktů, a heterogenní Amberlyst-15 projevoval rychlou deaktivaci. Statistické vyhodnocení potvrdilo, že nejvýznamnější vliv na průběh reakce má teplota a množství katalyzátoru. Optimální podmínky byly: 5 mol. % PTSA, reakční teplota odpovídající refluxu alkoholu a poměr reaktantů 1:10. Optimalizované podmínky byly následně aplikovány na esterifikaci ethanolem, propanolem a 2-fenylethanolem, přičemž při reakcích s propanolem a 2-fenylethanolem byla dosažena vysoká konverze, přes 90 %. Získané výsledky přinášejí základ pro další výzkum a vývoj bioaktivních esterů kyseliny kávové.

Příprava dimethylacetalu citralu

Bc. Lukáš Syrový

Ročník studia: M2

Školitelka: doc. Ing. Eliška Vyskočilová, Ph.D.

Citral je jednou z vonných látek obsažených v různých rostlinách např.: myrtovníku citronovém. Pro své vonné vlastnosti je vyhledáván pro aplikaci do různých kosmetických přípravků či ho lze využít jako antimikrobiální činidlo. Stejně jako jiné aldehydy je citral nestálou látkou a v kyselých a bazických podmínkách je náchylný k nežádoucím reakcím, které vedou k produktům postrádající požadované vlastnosti citralu.

Cílem této práce byla optimalizace přípravy dimethylacetalu citralu, který má stejné vonné vlastnosti a je více stabilní v různých prostředích. Zkoumán byl především vliv teploty a množství použitého katalyzátoru na průběh reakce. Současně byla zkoumána výtěžnost reakce a čistota získaného produktu. Tento výzkum prokázal, že pro acetalizaci není třeba vysokých teplot a je dosahováno vysoké výtěžnosti. Díky této skutečnosti lze citral jednoduše přeměnit na stálejší dimethylacetal při zachování jeho vonných vlastností.

Od blokové polymerace ke srážecí: jak množství rozpouštědla ovlivňuje morfologii a adsorpční vlastnosti polymeru

Bc. Eliška Zdráhalová

Ročník studia: M1

Školitelka: Ing. Lada Dolejšová Sekerová, Ph.D.

Množství rozpouštědla použitého při polymeraci může zásadně ovlivnit strukturu a adsorpční vlastnosti výsledného polymeru. Výchozím krokem této práce byla příprava molekulárně otištěného polymeru (MIPu) s thymolem jako templátem blokovou polymerací. Při této metodě je množství rozpouštědla minimální, vzniká pevný, celistvý blok, který je nutno následně mechanicky upravit. Naopak při použití dostatečného množství rozpouštědla dochází ke srážecí polymeraci, kdy v reakční směsi vznikají izolované částice, které není třeba dále mechanicky upravovat a tím se snižují ztráty produktu. Ověření adsorpční účinnosti MIPů vůči thymolu bylo hodnoceno na základě extrakce na pevné fázi (SPE). Výsledky SPE ukázaly, že MIP připravený srážecí polymerací vykazoval srovnatelnou adsorpční účinnost jako blokový MIP. Blokový MIP zachytil 88 % thymolu z vodného roztoku a srážecí MIP zachytil 91 %. Výsledky potvrzují potenciál srážecí polymerace pro přípravu MIPů s vysokou separační účinností a bez nutnosti mechanické úpravy polymerních částic. Srážecí MIP si zachoval vysokou adsorpční účinnost i po změně způsobu přípravy, přičemž jeho morfologie je výhodnější pro praktické aplikace, např. jako výplň HPLC kolon.

Studium acidobazických reakcí

MÍSTO: A01

KOMISE

doc. Ing. Eliška Vyskočilová, Ph.D. (předsedkyně)

Ing. Iva Paterová, Ph.D. (tajemnice)

Ing. Martina Pitínová, Ph.D.

Ing. Martin Zapletal, Ph.D.

PROGRAM

09:00 slavnostní zahájení v A1

09:45 zahájení soutěže v A01

Tereza Berthová

Příprava cyklických vonných acetalů na bázi 1,3-dioxolanu

Tereza Červenková

Studium bazických vlastností hydrotalcitových katalyzátorů a jejich aplikace v aldolové kondenzaci citralu s acetonem

Ludmila Kolářová

Heterogenní katalyzátory pro izomeraci limonenoxidu

Thi Thanh Hang Le

Příprava chemických specialit pomocí Prinsovy reakce

Timea Orsághová

Heterogenní katalyzátory na bázi hlinek pro Prinsovu reakci indenu s paraformaldehydem

Michal Špindler

Transesterifikace myrtenolu alkyl-acetáty za kyselé heterogenní katalýzy

Eliška Vozdecká

Optimalizace reakčních podmínek aldolové kondenzace anisaldehydu s propanalem – příprava prekursoru Canthoxalu

vyhlášení výsledků

Příprava cyklických vonných acetalů na bázi 1,3-dioxolanu

Bc. Tereza Berthová

Ročník studia: M2

Školitel: Ing. Eva Zapletalová, Ph.D.

Práce se zabývala přípravou vonných cyklických acetalů na bázi 1,3-dioxolanu, zejména sloučeniny 2-hexyl-4-methyl-1,3-dioxolan, vznikající reakcí heptanalů s propylenglykolem. Bylo potvrzeno, že pro průběh reakce je nutný katalyzátor, proto byla testována katalytická aktivita heterogenních kyselých zeolitů (β -25, β -38 a USY), které jsou na základě literatury v acetalizaci účinné již v malém množství. Nejvyšší konverze bylo dosaženo při použití zeolitu β -38, který byl dále použit k optimalizaci reakčních podmínek.

Byl studován vliv teploty, poměru reaktantů, typu rozpouštědla, množství katalyzátoru a jeho modifikace oxidy kovů. Teplota měla největší vliv na počáteční reakční rychlost (např. 75 % konverze heptanalů po 15 min při 20 °C vs. 97 % při 50 °C). Při použití silně polárních aprotických rozpouštědel (DMF, DMSO) nevznikal požadovaný cyklický acetal, zatímco v nepolárních aprotických rozpouštědlech (*n*-hexan, *n*-heptan, cyklohexan, toluen) byly dosaženy vysoké konverze heptanalů.

Byly nalezeny optimální reakční podmínky: pokojová teplota (20 °C), 2 hm. % zeolitu β -38, poměr reaktantů 1:1,4 (propylenglykol v přebytku) a toluen jako rozpouštědlo. Za těchto podmínek byla dosažena téměř totální konverze heptanalů a 100% selektivita tvorby žádaného acetalu.

Studium bazických vlastností hydrotalcitových katalyzátorů a jejich aplikace v aldolové kondenzaci citralu s acetonem

Jméno: Bc. Tereza Červenková

Ročník studia: M1

Školitel: Ing. Iva Paterová, Ph.D.

Hydrotalcity jsou podvojně vrstevnaté hydroxidy využívané v katalýze i farmacii. Cílem této práce byla optimalizace podmínek aldolové kondenzace citralu s acetonem a studium vlivu složení hydrotalcitů na jejich bazické vlastnosti a katalytickou aktivitu. Optimalizace byla zaměřena na molární poměr reaktantů, vliv rozpouštědla, teplotu a množství použitého katalyzátoru. Hydrotalcity byly pro reakci aktivovány kalcinací za vzniku směsných oxidů s převahou Lewisových bazických center a následnou rehydratací, při níž se obnovila struktura za vzniku Brønstedových bazických center. Rehydratované hydrotalcity byly rozděleny do skupin podle složení a mezi skupinami byly porovnány na základě hodnot specifických povrchů, celkové bazicity a velikosti částic. Zn_xAl materiály modifikované cínem nebyly katalyticky aktivní pro tuto reakci a vykazovaly nízkou bazicitu, zatímco přídavek Mg do struktury vedl ke zvýšení bazicity, specifického povrchu a tím i ke zvýšení katalytické aktivity. Nejvyšší katalytickou aktivitu (konverze citralu 99-100 %) vykazovaly Mg_2Al materiály s přídavkem Fe, pravděpodobně díky vyšší hodnotě bazicity a vyššímu specifickému povrchu. Podobně aktivní byly i Mg_2Al materiály obsahující ve struktuře Sn a Fe. Selektivita k tvorbě pseudoiononu byla u všech reakcí 100 %.

Heterogenní katalyzátory pro izomeraci limonenoxidu

Bc. Ludmila Kolářová

Ročník studia: M2

Školitel: doc. Ing. Eliška Vyskočilová, Ph.D.

Konzultant: Ing. Anna Rejzková, Ph.D.

V rámci této práce byly připraveny a testovány kyselé heterogenní katalyzátory pro izomeraci limonenoxidu. Touto reakcí vzniká především cis- a trans-dihydrokarvon, karveol a limonendiol, které se používají jako vonné látky. Karveol by mohl mít využití při léčbě diabetu nebo jako hepatoprotektivum a neuroprotektivum.

Testované katalyzátory na bázi SBA-15 s oxidem kovu (např. Mo, Al) byly připraveny metodou sol-gel nebo mokrou impregnací a porovnány s komerčním zeolitem β 25. Cílem práce bylo studium závislosti selektivity k produktům na vlastnostech katalyzátoru a reakčních podmínkách. Maximální selektivita ke karveolu byla 20 % při použití zeolitu β 25. cis-Dihydrokarvon vždy vznikal ve větším množství než jeho trans-izomer. Nejvíce dihydrokarvonu vznikalo při reakcích s katalyzátory obsahujícími MoO₃, pravděpodobně díky přítomnosti většího množství Lewisových kyselých center. S katalyzátory obsahujícími MoO₃ bylo dosaženo přibližně 30% selektivity k limonendiolu. Katalyzátor s MoO₃ na povrchu byl aktivnější než s MoO₃ ve struktuře (konverze po 1 h přibližně o 10 % vyšší). Vhodnou volbou katalyzátoru lze ovlivnit selektivitu k žadaným produktům. Získané poznatky přispívají k optimalizaci syntézy vonných látek a látek s možným využitím v medicíně, jako je například karveol.

Příprava vonných látek Prinsovou cyklizací hexanalů s isoprenem

Bc. Hang Le Thi Thanh

Ročník studia: M2

Školitel: Ing. Eva Zapletalová, Ph.D.

Prinsovou cyklizací isoprenolu a hexanalů vzniká 4-methyl-2-(1-pentyl)-tetrahydro-2*H*-pyran-4-ol (THPol), po jeho následné esterifikaci acetanhydridem je připraven 4-methyl-2-(1-pentyl)-tetrahydro-2*H*-pyran-4-ol acetát, který je žádaným produktem tohoto projektu. Tento acetát tetrahydropyranolu patří do skupiny vonných látek s možným využitím nejen v parfumérském/kosmetickém, ale i farmaceutickém průmyslu.

V první části projektu byla zkoumána reakce isoprenolu s hexanem za cílem optimalizace reakčních podmínek prvního kroku syntézy žádaného acetátu. Sledovanými parametry byla konverze hexanalů a selektivita tvorby žádaného THPolu. Během reakce dochází k dehydrataci žádaného tetrahydropyranolu na nežádoucí dihydropyrany, které snižují selektivitu reakce. V rámci práce byl studován vliv teploty (50-90 °C), rozpouštědla, přídavku vody, typu (kyselina sírová, kyselina *p*-toluensulfonová) a množství použitého katalyzátoru na průběh reakce. Bylo zjištěno, že přídavek vody pozitivně ovlivňuje selektivitu, neboť potlačuje dehydrataci THPolu na dihydropyrany. Nejvyšší konverze (100 %, 5 h) a selektivita (61 %) bylo dosaženo při reakci bez rozpouštědla, s využitím katalyzátoru *p*-toluensulfonové kyseliny a teploty 70°C.

Heterogenní katalyzátory na bázi hlinek pro Prinsovu reakci indenu s paraformaldehydem

Bc. Timea Orsághová

Ročník studia M1

Školitel: Ing. Eva Zapletalová, Ph.D.

Tato práce se zabývá studiem Prinsovy reakce paraformaldehydu s indenem, katalyzované montmorillonitovými katalyzátory. Produktem reakce je Indolarome® - vonná látka obsahující 1,3-dioxanový kruh, která díky své struktuře představuje potenciální využití ve farmaceutickém průmyslu. Cílem práce bylo ověřit možnost využití komerčního montmorillonitu (MMT-K10) a jeho modifikované formy, připravené pomocí úpravy kyselinou sírovou, jako katalyzátorů pro uvedenou reakci a optimalizovat reakční podmínky s ohledem na konverzi a selektivitu. Bylo zjištěno, že jak komerční, tak modifikovaný katalyzátor vykazuje v této reakci velmi dobrou katalytickou aktivitu, přičemž nejlepší výsledky byly dosaženy při teplotě 80–100 °C, použití rozpouštědla pentan-2-on a 1,4-dioxan a molárním přebytku paraformaldehydu. Nejlepší dosažený výsledek byla 98% konverze indenu a 83% selektivita tvorby žádaného produktu (6 h) při použití rozpouštědla 1,4-dioxan, teplotě 80 °C a molárního poměru reaktantů IN:PA = 1:3. Významným zjištěním bylo, že katalyzátor lze opakovaně použít. Popsaná metoda tak představuje ekologicky a ekonomicky výhodnou syntetickou strategii pro přípravu dioxanových derivátů, potenciálně využitelných v oblasti farmaceutického výzkumu či parfumářského průmyslu.

Transterifikace myrtenolu alkyl-acetáty za kyselé heterogenní katalýzy

Bc. Michal Špindler

Ročník studia: M1

Školitel: doc. Ing. Eliška Vyskočilová, Ph.D.

Konzultant: Ing. Anna Rejzková

Myrtenyl-acetát je ester kyseliny octové a myrtenolu ze skupiny monoterpenů. V přírodě je obsažen v několika druzích rostlin (myrta, citrusové plody). Díky své vůni se používá v kosmetických a hygienických přípravcích. Má potenciál využití jako akaricidum u včel a byly u něj prokázány antidepressivní účinky. Cílem této práce je nalezení vhodného kyselého heterogenního katalyzátoru pro transesterifikaci myrtenolu alkyl-acetáty. Byly připraveny heterogenní katalyzátory s různými nosiči impregnované vybranými kyselinami. Silika impregnovaná kyselinou methansulfonovou v množství 40 hm. % vzhledem ke katalyzátoru byla vybrána jako vhodný katalyzátor. Dále byl studován vliv molárního poměru reaktantů, teploty a alkyl-acetátů s různou strukturou na průběh reakce. Optimální podmínky byly: teplota 50 °C, ethyl-acetát a molární poměr reaktantů 1:5. Za těchto podmínek bylo po 5 hodinách dosaženo 86% konverze se 78% selektivitou pro myrtenyl-acetát. Získané poznatky rozšiřují znalosti o transesterifikaci allylalkoholů, jejichž zástupcem je myrtenol.

Optimalizace reakčních podmínek aldolové kondenzace anisaldehydu s propanalem – příprava prekursoru Canthoxalu

Bc. Eliška Vozdecká

Ročník studia: M1

Školitel: Ing. Iva Paterová, Ph.D.

Práce se zabývá optimalizací reakčních podmínek homogenní bazicky katalyzované aldolové kondenzace *p*-anialdehydu s propanalem k přípravě 3-(4-methoxyfenyl)-2-methylprop-2-enalu, prekursoru vonné látky Canthoxalu. Canthoxal se využívá v parfumerii a chemických specialitách a má antibakteriální a amébicidní účinky. Cílem práce bylo stanovit optimální podmínky s ohledem na konverzi *p*-anialdehydu a selektivitu k produktu. Zkoumanými parametry byly teplota, typ a koncentrace katalyzátoru, použité rozpouštědlo, molární poměr výchozích látek a způsob přidávání propanalu. Zjištěné optimální podmínky byly laboratorní teplota, methanolové prostředí, molární poměr *p*-anialdehyd:propanal 1:2 a postupné přikapávání propanalu. Vhodným katalyzátorem byl hydroxid draselný (10 hm. %, molární poměr k *p*-anialdehydu 0,3). Za těchto podmínek byla dosažena konverze 90 % a selektivita 86 %, přičemž výtěžnost izolace dosáhla 52 % při čistotě 95 %.

Studium a využití heterogenních katalyzátorů

MÍSTO: AS31a

KOMISE

doc. Ing. Jiří Trejbal, Ph.D. (předseda)

Ing. Eva Zapletalová, Ph.D. (tajemnice)

Ing. Martin Veselý, Ph.D.

PROGRAM

09:00 slavnostní zahájení v AI

09:45 zahájení soutěže v AS31a

Lucie Broklová

Hydrogenace anisylpropenalů

Mariia Khover

Hydroformylace 1-oktenu pomocí heterogenních rhodiových katalyzátorů

Jáchym Kučera

Oxidace benzylalkoholu pomocí měděných katalyzátorů využívající 2D materiály jako nosiče

Nikolas Letzel

Syntéza Ge nanočástic jako fluorescenčních sond pro studium dostupnosti porézních systémů heterogenních katalyzátorů

Lucie Růžicková

Hydrogenace Levosandalu na Pd katalyzátorech

Sofiia Zadnyprianska

Graphene oxide supported metal nanoparticles for CO₂ activation

Zhuldyzai Zhazykbayeva

Immobilization of Wilkinson Catalyst for Hydroformylation and Hydrogenation Reactions

vyhlášení výsledků

Hydrogenace anisylpropenalu

Bc. Lucie Broklová

Ročník studia: M2

Školitel: Ing. Iva Paterová, Ph.D.

Cílem práce bylo studovat, jak reakční podmínky ovlivňují průběh reakce a jak se mění selektivita vytvářených produktů při hydrogenaci 3-(4-methoxyfenyl)-2-methylprop-2-enalu, anisylpropenalu, který našel využití v parfumářském průmyslu jako meziprodukt při výrobě Canthoxalu. Ten je žádaný pro svou ovocnou a květinovou vůni. Byl zkoumán vliv teploty, tlaku, rozpouštědla a typu katalyzátoru na studovanou reakci. Nejprve byl připraven anisylpropenal aldolovou kondenzací anisaldehydu a propanalu dle dříve optimalizovaných podmínek. Poté byl anisylpropenal hydrogenován za vzniku několika produktů. Majoritním produktem na počátku reakce byl žádaný Canthoxal, který se postupnou hydrogenací redukoval na nežádoucí alkohol, 3-(4-methoxyfenyl)-2-methylpropanol. Jako vhodné podmínky, které vedly k totální konverzi anisylpropenalu se selektivitou ke Canthoxalu 83 %, byly vybrány následující: teplota 110 °C, tlak 6 MPa, 130 ml methanolu a 5 hm.% katalyzátoru NiSAT330.

Hydroformylace 1-oktenu a styrenu pomocí heterogenních rhodiových katalyzátorů

Bc. Mariia Khover

Ročník studia:M2

Školitel: Ing. Martina Pitínová, Ph.D.

Dichalkogenidy přechodných kovů (TMD) představují důležitou třídu vrstevnatých materiálů, které v poslední době přitahují pozornost v oblasti elektrochemie. Do té skupiny patří sloučeniny jako MoS₂, WS₂, WSe₂. Bylo popsáno, že TMD materiály mají potenciál v oblasti katalýzy, především jako nosiče pro zlepšení katalytické aktivity.

Cílem této práce je charakterizace a příprava heterogenních rhodiových katalyzátorů využívající TMD nosič, konkrétně MoS₂ a WS₂. Dále je v rámci experimentální části zkoumána katalytická aktivita připravených katalyzátorů v hydroformylaci 1-oktenu a styrenu, přičemž zvláštní pozornost je věnována studiu vlivu katalyzátorů na selektivitu k žádaným aldehydům. Vedle komerčních WS₂ a MoS₂, jsou dále testovány jejich exfoliované nanovrstvy a zkoumán vliv použití exfoliovaných nosičů na výsledky hydroformylace. Připravené katalyzátory jsou charakterizovány metodami XRD, XRF, SEM-EDS a N₂-fyzisorpce.

Oxidace benzylalkoholu pomocí měděných katalyzátorů využívající 2D materiály jako nosiče

Jáchym Kučera

Ročník studia: B3

Školitel: Ing. Martina Pitínová, Ph.D.

Oxidace benzylalkoholu v práci slouží jako modelová reakce pro testování heterogenních nosičových Cu katalyzátorů v oxidaci alkoholu na aldehyd s využitím peroxidu vodíku jako oxidačního činidla.

V rámci práce byly připraveny různé měděné katalyzátory pomocí vlhké impregnace. Jako nosiče byly použity grafen oxid, germanan a silican a cílený obsah mědi byl 5 a 10 hm.%. Připravené katalyzátory byly charakterizovány za pomoci rentgenové fluorescence (XRF), skenovací elektronové mikroskopie (SEM) a energiově disperzní spektroskopie (EDS). Následně byly katalyzátory testovány v modelové oxidaci při různých reakčních teplotách.

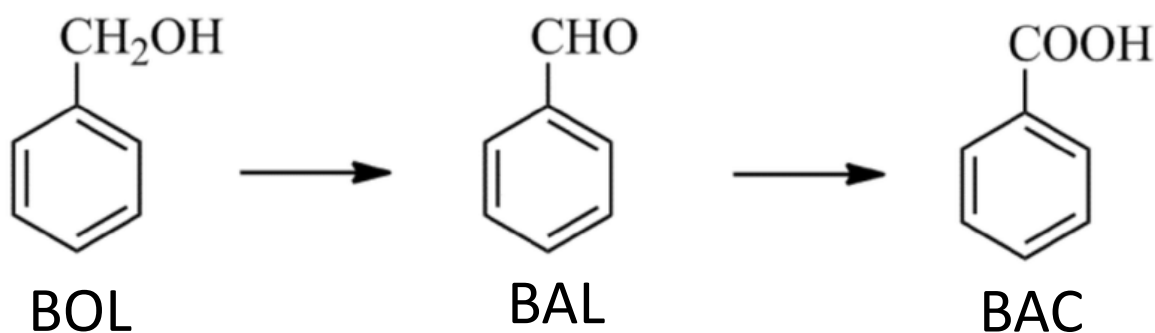


Schéma 1: Oxidace benzylalkoholu (BOL) na benzaldehyd (BAL) s následnou oxidací na benzoovou kyselinu (BAC)

Syntéza Ge nanočástic jako fluorescenčních sond pro studium dostupnosti porézních systémů heterogenních katalyzátorů

Nikolas Letzel

Ročník studia:M1

Školitel: Ing. Martin Veselý, Ph.D.

V heterogenní katalýze dostupnost pórů určuje, zda jsou reagenty schopny dostat se k aktivním místům a produkty systém pórů efektivně opustit, aby nedocházelo k blokaci či nežádoucím následným reakcím. Studium tohoto aspektu je proto nezbytné pro racionální design a optimalizaci katalytických systémů.

Jedním ze způsobů zkoumání dostupnosti porézního systému je zavedení fluorescenčních sond různých charakteristických velikostí a jejich následná vizualizace na konfokálním fluorescenčním mikroskopu, který umožňuje zobrazení třírozměrných distribucí pórů dostupných pro konkrétní velikostní frakce uvnitř katalytické částice. Svými unikátními optickými a fyzikálními vlastnostmi představují Ge nanočástice atraktivní fluorescenční sondy pro tento účel.

Tento příspěvek se proto zaměřuje na syntézu nanočástic odvozených z dvoudimenzionálních materiálů germania: exfoliací Zintlovy fáze a následnou solvotermální reakcí byl připraven koloid s uniformní populací sférických částic o průměru ~ 2 nm, jak ukázala transmisní elektronová mikroskopie. Dle fluorescenční spektroskopie částice vykazují emisní maximum při 450 nm a excitační maximum při 395 nm. Dále byla demonstrována schopnost těchto částic zobrazit prostorové rozložení dostupné porézní sítě na γ -aluminových extrudátech o známé distribuci velikosti pórů.

Hydrogenace Levosandalu na Pd katalyzátorech

Bc. Lucie Růžičková

Ročník studia: M1

Školitel: Ing. Iva Paterová, PhD.

Cílem práce bylo studium parametrů majících vliv na průběh hydrogenace Levosandalu. Levosandal je komerční název pro 2-ethyl-4-(2,2,3-trimethyl-cyklopent-3-en-1-yl)-but-2-enal, který nachází své využití převážně v parfumářském průmyslu pro svou vůni připomínající santalové dřevo nebo je používán jako intermediát při syntéze léčiv. Mezi zkoumanými parametry byl vliv tlaku, teploty, rozpouštědla a typu katalyzátoru. Levosandal může být v prvním stupni hydrogenován na Levosandol nebo dihydro-Levosandal, z nichž žádanějším produktem je Levosandol. Prvním krokem práce byla příprava Levosandalu aldolovou kondenzací kamfolenického aldehydu s butanalem. Výsledný produkt byl použit k hydrogenaci. Jako optimální podmínky vedoucí k nejvyšší selektivitě k Levosandolu byly určeny následující: 1 MPa, 100 °C, 80 ml cyklohexanu a 1 hm. % katalyzátoru MGS 5 (2 % Pd na $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$). V experimentu provedeném za těchto podmínek bylo dosaženo 48% selektivity k Levosandolu při 17% konverzi Levosandalu.

Graphene oxide supported metal nanoparticles for CO₂ activation

Sofiia Zadnyprianska

Ročník studia: B3

Školitel: Ing. Martin Veselý, Ph.D.

Konzultant: Ing. Iryna Danylo, Ph.D.

The study on the activation of carbon dioxide (CO₂) and its further conversion towards valuable fuels and precursors is considered as one of the most promising studies in sustainable catalysis. Graphene oxide supported metal catalysts are known for their potentially wide application due to their high surface area and ability to stabilize highly dispersed metal nanoparticles. In addition, the oxide supports provide oxygen vacancies to activate CO₂ and that is the main reason for their efficiency. Nevertheless, research on control of nanoparticles size and dispersion, metal-support interactions, stability under reaction conditions should be done. For this reason, in this work, graphene oxide prepared by the Hummer's method (HUGO) supported metal nanoparticles catalysts were synthesized and analyzed. Used metal was copper (Cu) in different loadings due to its proven efficiency in the heterogeneously catalyzed CO₂ activation. To determine morphology, chemical composition and adsorption behavior, SEM, SEM/EDS and in-situ DRIFT/MS methods were used as the most advanced and sensitive tools capable of surface measurements and detecting intermediates during the CO₂/surface interaction.

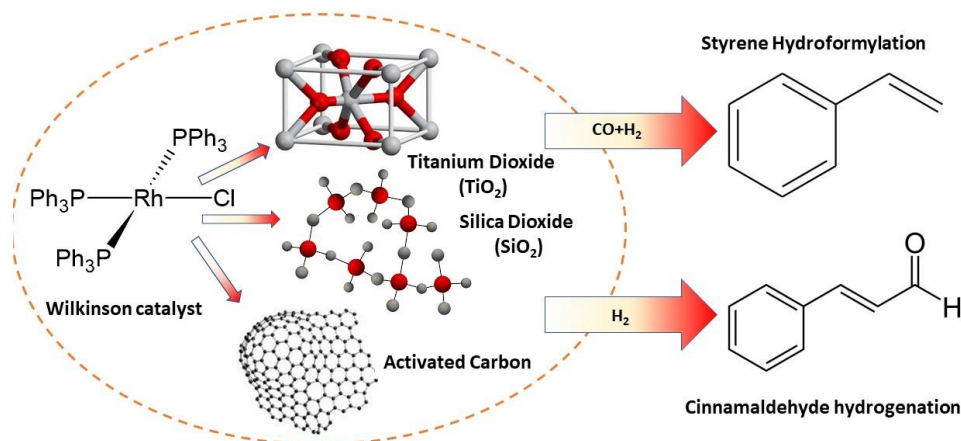
Immobilization of Wilkinson Catalyst for Hydroformylation and Hydrogenation Reactions

Zhuldyzai Zhazykbayeva

Ročník studia: M2

Školitel: Ing. Bc. Martina Pitínová, Ph.D.

Wilkinson's catalyst, $\text{RhCl}(\text{PPh}_3)_3$, is a benchmark homogeneous catalyst widely applied in hydrogenation and hydroformylation reactions. Although highly active and selective, its homogeneous nature limits recyclability and leads to metal leaching. Therefore, this work focuses on the heterogenization of Wilkinson's catalyst to enable catalyst reuse and reduce Rh losses. The catalyst was immobilized on TiO_2 , activated carbon, and SiO_2 via incipient wetness impregnation, depositing a chloroform solution of the Rh complex onto the supports and drying at room temperature. Rh loadings ranged from 0.3–3.0 wt.%. The materials were characterized by N_2 physisorption (BET), XRF, XRD, TEM, SEM, and FTIR to assess metal support interactions, and fresh vs. spent catalysts were compared. All catalysts showed high activity in styrene hydroformylation with good conversion and minimal by-products. Catalyst reuse was successfully demonstrated. Cinnamaldehyde hydrogenation was also used to study selectivity in α,β -unsaturated aldehyde conversion, providing insights into structure activity relationships of the immobilized Wilkinson-type systems.



Látky, reakce a materiály v organické technologii

MÍSTO: A081a

KOMISE

prof. Ing. Libor Červený, DrSc. (předseda)

Ing. Adam Karaba, Ph.D. (tajemník)

doc. Ing. Bohumír Dvořák, CSc.

Ing. Tomáš Sommer, Ph.D.

PROGRAM

09:00 slavnostní zahájení v AI

09:45 zahájení soutěže v A081a

Ihar Astanin

Využití Buchwaldovy–Hartwigovy aminace pro přípravu azosloučenin

David Ivan

Zefektivnění procesu termo-katalytické dekompozice sulfanu

Tereza Maierová

Výzkum v oblasti separace alifatických uhlovodíků v technologii toluenu

Lukáš Městka

Měření VLE směsi isobutylakrylát-isobutanol

Aneta Pospíšilová

Využití frakcí výroby DCPD pro výrobu uhlovodíkových pryskyřic

Štěpán Ryba

Zpracování produktu pyrolýzy použitých rostlinných olejů pro průmyslové využití

Žaneta Vrbová

Ethery 2-fenylethanolu

vyhlášení výsledků

Využití Buchwaldovy–Hartwigovy aminace pro přípravu azosloučenin

Bc. Ihar Astanin

Ročník studia: M1

Školitel: Ing. Martina Pitínová, Ph.D. – VŠCHT

Doc. doc. Ing. Jiří Váňa, Ph.D. - UPCE

Teoretická část této práce se věnuje možnostem syntézy symetrických i nesymetrických azosloučenin s důrazem na využití Buchwaldovy-Hartwigovy aminace. Experimentální část je pak věnována testování limitů této reakce, kdy byly testovány celkem tři oblasti substrátů. Jedná se o farmakochemicky zajímavé látky, stericky bráněné substráty a substráty obsahující heterocyklický skelet. Ve dvou případech se látky podařilo připravit a popsat pomocí NMR spektroskopie.

Zefektivnění procesu termo-katalytické dekompozice sulfanu

David Ivan

Ročník studia: M1

Školitel: Ing. Jaroslav Kocík, Ph.D.

Vedoucí: doc. Ing Pavel Čapek CSc.

Tato práce se zabývá problematikou zefektivnění termo-katalytické dekompozice sulfanu (H_2S) jako perspektivního způsobu výroby vodíku z druhotných surovin. V kontextu rostoucí poptávky po čistých energetických nosičích a nutnosti využívání odpadních látek představuje dekompozice sulfanu významnou alternativu ke konvenčním metodám získávání vodíku.

Práce se zaměřuje na optimalizaci reakčních podmínek termo-katalytického procesu s cílem maximalizovat výtěžnost vodíku a účinnost celého procesu. Pozornost je věnována vlivu klíčových parametrů, zejména reakční teploty v intervalu 500–800 °C, složení nástríku 5–50 hm. % H_2S v dusíku, zatížení katalyzátoru 6 l/h/g a přítomnosti příměsi CO_2 , na průběh reakce. Jako katalyzátor byla použita alumina se specifickým povrchem 255 m^2/g , neboť byla v předešlém výzkumu určena jako nejaktivnější z testované skupiny. Konverze sulfanu a výtěžek vodíku jakožto klíčové složky. Koncentrace sulfanu v plynu ovlivňuje výslednou konverzi sulfanu.

Výzkum v oblasti separace alifatických uhlovodíků v technologii toluenu

Bc. Tereza Maierová

Ročník studia: M1

Školitel: Ing. Tomáš Sommer, Ph.D.

Toluen má řadu průmyslových využití, z nichž některá vyžadují jeho vysokou čistotu. V průmyslově vyráběném čistém toluenu se však vyskytuje řada obtížně oddělitelných alifatických nečistot, mezi které patří i dimethylcyklohexany. Pro návrh vhodných technologií separace těchto nečistot je nezbytná znalost fázového chování kapalina-pára jejich binárních směsí s toluenem. Data popisující rovnováhu kapalina-pára jsou pro systémy toluenu s mnoha alifatickými uhlovodíky v literatuře dostupná, avšak systémy toluenu s dimethylcyklohexany dosud nebyly popsány.

Existuje celkem šest izomerů dimethylcyklohexanu. Předmětem této práce bylo experimentální studium rovnováhy kapalina-pára v binárním systému obsahujícím toluen a *cis*-1,3-dimethylcyklohexan. Rovnováha kapalina-pára byla studována při třech různých tlacích a ve všech případech byl zjištěn výskyt azeotropu s minimem bodu varu. K ověření termodynamické konzistence, které je nedílnou součástí zpracování experimentálních dat, byla využita v současnosti nejpokročilejší v literatuře používaná metoda – Van Nessova metoda modifikovaná podle Fredenslunda. Získaná experimentální data poslouží jako vhodný základ k navazujícím procesním simulacím, které průmyslový partner využije k optimalizaci výroby čistého toluenu.

Měření rovnováhy kapalina–pára směsi isobutylakrylát–isobutanol

Bc. Lukáš Městka

Ročník studia M2

Školitel Ing. Martin Zapletal, Ph.D.

Destilace patří mezi nejvýznamnější jednotkové operace chemického průmyslu. Pro návrh destilačních a rektifikačních aparatur je nezbytné disponovat termodynamicky konzistentními experimentálními daty rovnováhy kapalina–pára (VLE).

V této práci bylo studováno rovnovážné chování binárního systému isobutylakrylát–isobutanol, který představuje směs esteru a příslušného alkoholu vznikající při syntéze isobutylakrylátu. Tento monomer může být průmyslově využitelný jak pro přípravu homopolymerů, tak pro kopolymery s dalšími akryláty.

V první části experimentální práce byl isobutylakrylát syntetizován a následně přečištěn na požadovanou čistotu pro měření. Následovala měření tenze par a rovnováhy kapalina–pára v závislosti na tlaku, jejichž cílem bylo získat data využitelná pro modely, jako jsou NRTL či UNIQUAC.

Využití frakcí výroby DCPD pro výrobu uhlovodíkových pryskyřic

Aneta Pospíšilová

Ročník studia: B3

Školitel: prof. Ing. Tomáš Herink Ph.D.

Nenasycené uhlovodíky C₉, C₁₀, dicyklopentadien (DCPD) a methyl-dicyklopentadien (MeDCPD) představují významné meziprodukty v petrochemickém průmyslu, které vznikají při zpracování produktů pyrolýzy uhlovodíkových směsí. Frakce obsahující nenasycené uhlovodíky, zejména cyklické a alicyklické sloučeniny, představují cenné surovinové zdroje pro výrobu vysoce kvalitních polymerních materiálů. Díky svému specifickému chemickému složení mohou být tyto frakce efektivně využity k syntéze uhlovodíkových pryskyřic s přesně definovanými vlastnostmi. Tato práce se zaměřuje na zhodnocení frakcí vznikajících při pyrolýze uhlovodíků a jejich potenciál pro přípravu uhlovodíkových pryskyřic, které nacházejí široké uplatnění v průmyslové výrobě, zejména v oblasti nátěrových hmot, lepidel, tmelů a kompozitních materiálů. Uhlovodíkové pryskyřice vycházející speciálně z DCPD jsou známé svou vysokou tepelnou a chemickou stabilitou, dobrou adhezí a odolností vůči oxidaci, což je činí vhodnými pro aplikace v náročných provozních podmínkách. Součástí práce je podrobná analýza chemického složení výchozích frakcí, studium polymerizačních mechanismů a hodnocení fyzikálně-chemických vlastností vzniklých pryskyřic. Důraz je kladen také na optimalizaci polymerizačních podmínek a identifikaci faktorů ovlivňujících výslednou kvalitu a strukturu polymeru. Získané poznatky mohou přispět k vývoji nových typů uhlovodíkových pryskyřic s rozšířeným aplikačním potenciálem, zejména v oblasti moderních kompozitních a funkčních materiálů.

Zpracování produktu pyrolýzy použitých rostlinných olejů pro průmyslové využití

Bc. Štěpán Ryba

Ročník studia: M1

Školitel: doc. Ing. Jiří Trejbal, Ph.D.

Použité rostlinné oleje představují perspektivní obnovitelnou surovinu, která díky rostoucím ekologickým požadavkům a technologickému rozvoji nachází uplatnění v petrochemickém a oleochemickém průmyslu.

Jednou z progresivních metod jejich zpracování je pyrolýza, při níž dochází k termickému rozkladu organických látek bez přístupu kyslíku. Produktem tohoto procesu je směs obsahující převážně alkany, alkeny a mastné kyseliny. Z hlediska struktury se jedná zejména o lineární uhlovodíkové řetězce, doplněné o menší podíl rozvětvených, cyklických a aromatických forem. Díky rozdílné těkavosti jednotlivých složek lze produkty pyrolýzy separovat frakční kondenzací.

Tato práce se zaměřuje na studium kapalného produktu pyrolýzy rostlinných olejů. Cílem je detailně analyzovat jeho chemické složení, zejména zastoupení mastných kyselin, a posoudit možnosti jejich oddělení od směsi rektifikací nebo extrakcí. Získané poznatky mohou přispět k optimalizaci procesu pyrolýzy a k širšímu využití pyrolýzních produktů při výrobě biopaliv, leteckých paliv či jako suroviny pro ethylenovou pyrolýzu.

Ethery 2-fenylethanolu

Bc. Žaneta Vrbová

Ročník studia: M2

Školitel: doc. Ing. Eliška Vyskočilová, Ph.D.

Ethery 2-fenylethanolu mají široké využití v parfumářství a potravinářství. Tyto nesymetrické ethery lze připravit Williamsonovou syntézou nebo dehydratací alkoholů katalyzovanou silnými kyselinami, např. kyselinou sírovou.

Cílem této práce bylo optimalizovat podmínky etherifikace 2-fenylethanolu s různými primárními alkoholy (methanol, ethanol, *n*-propanol, *n*-butanol a isoamylalkohol). Kromě kyseliny sírové byly reakce s *n*-butanolem a isoamylalkoholem katalyzovány také kyselinou chlorovodíkovou a kyselinou *p*-toluensulfonovou. Reakce byly prováděny na olejové lázni pod zpětným chladičem nebo azeotropickým nástavcem a byl sledován vliv reakčního uspořádání na konverzi 2-fenylethanolu. Bylo zjištěno, že vyšší konverze bylo dosaženo s použitím azeotropického nástavce z důvodu odstraňování vznikající vody. Díky odstranění vody je rovnováha reakce posunuta ve směru produktů. Dále byly reakce provedeny ve vialkách na vyhřívaném bloku na magnetické míchačce. Bylo zjištěno, že s methanolem a ethanolem se ether za použitých podmínek nevznikal, ale s vyššími alkoholy ano. Například s isoamylalkoholem bylo za reakční dobu 5 hodin dosaženo 85% konverze. S vyššími alkoholy však vznikaly vedlejší produkty (dibenzylether, diisoamylether).

V dalších experimentech je plánováno využití molekulových sít pro zachycení vody za použití Soxhletova nástavce a také využití kyselých heterogenních katalyzátorů, jako například zeolity, montmorillonit a další. Tento postup má potenciál průmyslového použití, ale bude třeba ještě další optimalizace.



ZENTIVA

**Přinášíme zdraví a wellbeing pro více než
100 milionů lidí po celé Evropě.**

VYVÍJÍME



Inovujeme a hledáme nové způsoby výroby vysoce kvalitních a dostupných léků.

VYRÁBÍME



Přímo v Praze vyrábíme více než 1500 kvalitních generických léčivých přípravků.

SLOUŽÍME



Přinášíme zdraví a wellbeing pro všechny generace. Naším lékům ročně důvěřuje více než 100 milionů lidí po celé Evropě.

STARÁME SE



O naše lidi, naše partnery a naši planetu. Vytváříme skvělé místo pro práci.



Staňte se součástí našeho týmu. Nascanujte QR kód a prozkoumejte aktuálně otevřené pozice.

top
EMPLOYER

Česká republika
Czech Republic
2025

FOR A BETTER WORLD OF WORK



www.zentiva.cz

INOVACE V GENERIKÁCH: JAK MŮŽE CHEMIK MĚNIT SVĚT PACIENTŮ

S PAVLEM ŠEBKEM



Zentiva patří mezi největší výrobce léčiv v České republice. Každý rok přímo v Praze vyrobí téměř 140 milionů balení generických léků. Zentiva působí ve více než 30 evropských zemích, jejím srdcem ale zůstává Praha – nejen sídlo vedení firmy, ale také centrum pro výzkum a vývoj. Právě zde vznikají inovace, které posouvají generická léčiva o úroveň výš. Co obnáší vývoj generik a kde je prostor pro mladé chemiky a farmaceuty? Odpovídá Pavel Šebek, ředitel výzkumu a vývoje v Zentivě.

Proč by měli studenti chemie a farmacie přemýšlet o kariéře v generickém průmyslu?

Současný generický průmysl stojí na inovacích, které skutečně zlepšují život pacientů. Už dávno nejde jen o „kopírování“ originálních léčiv, ale o vytváření nových, dostupnějších a účinnějších řešení. Mladí odborníci zde mají obrovskou příležitost skutečně něco změnit.

Jak se tedy v generikách inovuje?

Inovace v generickém průmyslu probíhají na třech úrovních. Na první úrovni je cílem uvést generikum na trh co nejdříve po vypršení patentu originálního léčiva. To vyžaduje nalézt vlastní produktová a technologická řešení, která neporušují duševní vlastnictví třetích stran. Díky včasnému vstupu generického léčiva na trh se pak moderní terapie stávají dostupnější pro širší okruh pacientů. Druhá úroveň se zaměřujeme na efektivnější

a udržitelnější výrobní procesy. Tyto inovace umožňují snížit výrobní náklady, ale zároveň i ekologickou stopu léčiva. Na třetí úrovni vytváříme novou přidanou hodnotu pro pacienta – hledáme způsoby, jak vylepšit existující terapie.

Co může být taková přidaná hodnota pro pacienta?

Zaměřujeme se například na eliminaci nežádoucích účinků, zvýšení klinické účinnosti, nové indikace pro existující molekuly, rychlejší nástup účinku, nebo naopak na protrahovaný účinek tam, kde je to pro pacienta vhodnější, popřípadě na změnu režimu podávání léčiva. Příkladem může být analgetikum, které dnes pacient bere každé čtyři hodiny. Lék jsme upravili tak, aby účinek nastoupil okamžitě a vydržel celých osm hodin. Pacient tudíž může v klidu prospat celou noc.

Takže inovace v generikách mají i sociální dopad?

Obrovský. Nejde jen o to, aby lék

fungoval. Například inovace vedoucí ke zlepšení adherence s medikací prokazatelně zlepšují terapeutický výsledek, snižují celkové náklady na léky či hospitalizace nebo operace, a tak šetří zdravotnímu systému značné množství prostředků.

Jak vypadá vývoj v Zentivě?

Právě dokončujeme rozšíření vývojových kapacit v Praze. Nyní máme v laboratořích 230 spolupracovníků a 20 kolegů pracuje v Ankleshwaru v Indii. Chystáme také další rozšíření vývojových kapacit otevřením nového vývojového centra. Pracovní prostředí je mezinárodní, pracovník jazykem je angličtina. Kromě generik spolupracujeme také s partnerskými startupovými firmami na vývoji originálních léčiv. Stále hledáme mladé talentované vědce, kteří mají ambici dělat špičkovou farmaceutickou vědu na světové úrovni.