FAKULTA
CHEMICKÉ TECHNOLOGIE
VŠCHT PRAHA

Studentská Vědecká Konference

2026

19. 11. 2026

SBORNÍK ANOTACÍ

Ústav anorganické chemie (101)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Hana Kotoučová, Ph.D.

SEZNAM SEKCÍ

1. S1 - Ústav anorganické chemie
2. S2 - Ústav anorganické chemie
3. S3 - Ústav anorganické chemie
4. S4 – Ústav anorganické chemie

SPONZOŘI - ÚSTAV ANORGANICKÉ CHEMIE

Silikátová společnost České republiky z.s.

Milan Kotouč - SAGA

S1 - Ústav anorganické chemie – laboratoř D1

KOMISE

doc. Ing. Kateřina Rubešová, Ph.D. (předseda)
Ing. Vítek Jakeš, Ph.D.
Ing. Tomáš Hartman, Ph.D.
Ing. Jan Havlíček, Ph.D. (Crytur, spol. s.r.o.)
Bc. Klára Křížová (Lach-Ner, s.r.o.)

PROGRAM

8:30 **zahájení – Laboratoř D1**

9:00 František Socha (B2, Ing. Tomáš Hartman Ph.D.)
Vliv elektrolytů na bázi Li/$NaBH_4$ na elektrochemické vlastnosti germananové elektrody v Li-ion a Na-ion bateriích

9:15 Arina Alieva (B3, Ing. Vlastimil Mazánek, Ph.D.)
Elektrochemická redukce aromatických nitrosloučenin na vrstevnatých materiálech

9:30 David Březák (B3, Ing. Anna-Marie Lauermannová, PhD.)
Analýza vlivu surfaktantů PAA a Triton X-100 na homogenizaci nanoaditiv ve stavebních materiálech na bázi MOC

9:45 Vít Budínský (B3, Ing. Vít Jakeš, Ph.D.)
Scintilátory na bázi $LuTaO_4$ a Gd_3TaO_7 dopované Ce^{III} a Mn^{V}

10:00 Petra Dlouhá (B3, Ing. Anna-Marie Lauermannová, Ph.D.)
Kompozity na bázi MOC obohacené o nanomateriály a recyklovaná plniva z křemičitých cihel

10:15 Matyáš Vejtruba (B3, Ing. Anna-Marie Lauermannová Ph.D.)
Studium kompozitních materiálů na bázi MOC dopovaných čedičovými vlákny povlakovanými nanostrukturovaným uhlíkem

10:30 Ngo Trung Kien (B3, prof. Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.)
Charakterizace a úprava NMC Black Mass pro aplikace v energetice

cca 13:00 **vyhlášení výsledků**

Vliv elektrolytů na bázi Li/$NaBH_4$ na elektrochemické vlastnosti germananové elektrody v Li-ion a Na-ion bateriích

František Socha

Ročník studia (kategorie): B2

Školitel: Ing. Tomáš Hartman Ph.D.

Cílem práce byla příprava a prozkoumání vlivu $LiBH_4$ a $NaBH_4$ pro Li-ion a Na-ion akumulátory složených z elektrod na bázi 2D materiálu germania – germananu. Tento materiál byl připraven z příslušné Zintlovy fáze $CaGe_2$, která má vrstevnatou strukturu a byla syntetizována vysokoteplotní syntézou z prvků. Její exfoliace (deinterkalace) pomocí HCl poskytuje jednotlivé listy germananu. Z tohoto materiálu byly spolu s vhodnými aditivy připraveny elektrody, které následně sloužily pro sestavení akumulátorů. V akumulátoru byla poté jako elektrolyt zvolena sůl $LiBH_4$ nebo $NaBH_4$ v bis(2-methoxyethyl)etheru (diglymu) jako rozpouštědle a jako protielektroda byly použity buď kovové fólie, či elektroda z aktivního uhlí. Sestavené akumulátory byly následně elektrochemicky studovány, zejména pak jejich závislost kapacity na napětí, což bylo zajištěno galvanostatickým cyklováním.

Elektrochemická redukce aromatických nitrosloučenin na vrstevnatých materiálech

Arina Alieva

Ročník studia (kategorie): B3

Školitel: Ing. Vlastimil Mazánek, Ph.D.

Elektrochemická redukce aromatických nitrosloučenin představuje perspektivní způsob jejich přeměny na průmyslově významné produkty. Průběh těchto reakcí je výrazně ovlivněn vlastnostmi elektrodových materiálů, které mohou zásadním způsobem ovlivňovat účinnost a selektivitu redukčních procesů. Mezi zajímavé kandidáty patří vrstevnaté thiophosfáty přechodných kovů typu MPX_3 (M = Fe, Mn, Co, Ni aj.), jejichž elektrochemické vlastnosti lze modifikovat změnou chemického složení.

Cílem této práce je studium elektrochemických vlastností materiálů $FePS_3$ a $MnPS_3$ a jejich směsných analogů o obecném složení $Fe_xMn_{1-x}PS_3$. Studovány jsou materiály s molárními poměry Fe:Mn = 1:0, 3:1, 1:1, 1:3 a 0:1. Připravené materiály byly exfoliovány pomocí hrotového ultrazvuku a následně charakterizovány metodami rentgenové práškové difrakce (XRD), skenovací elektronové mikroskopie s energiově disperzní rentgenovou spektroskopií (SEM-EDS) a rentgenové fotoelektronové spektroskopie (XPS). Připravené suspenze byly následně použity k modifikaci elektrod ze skelného uhlíku, na nichž byly studovány základní elektrochemické vlastnosti připravených materiálů.

Analýza vlivu surfaktantů PAA a Triton X-100 na homogenizaci nanoaditiv ve stavebních materiálech na bázi MOC

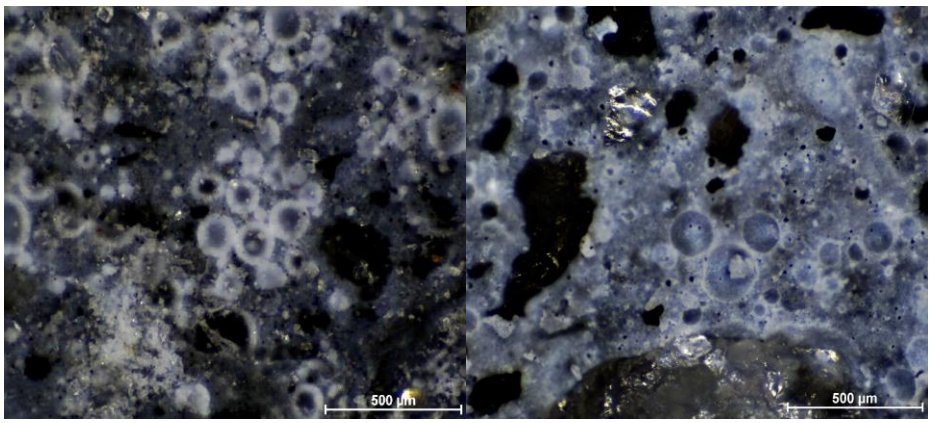
David Březák

Ročník studia (kategorie): B3

Školitel: Ing. Anna-Marie Lauermannová, PhD

Kompozitní materiály na bázi oxichlorid-hořečnatého cementu (MOC) jsou ekologickou alternativou ke kompozitům na bázi portlandského cementu, vykazují až 2× vyšší mechanické pevnosti a nižší emise CO_2. Jejich praktické využití je však limitováno nízkou odolností vůči vodě. Přídavkem grafenu 750, který zahušťuje strukturu matrice, lze voděodolnost i mechanické parametry zlepšit. Van der Waalsovy síly však způsobují aglomeraci nanočástic, čemuž brání přidání vhodných surfaktantů.

Cílem práce je nalezení optimálního poměru surfaktantů kyseliny polyakrylové (PAA) a Tritonu X-100 pro homogenní disperzi grafenu v MOC kompozitu. Celková dávka surfaktantů odpovídá hmotnosti aditiva (0,5 hm. % vůči MOC). Testovány byly poměry PAA:Triton X-100 1:3, 1:5, 3:1 a 5:1. Tyto poměry navazují na předchozí práci (viz obrázek níže), kde homogenizace suspenze Ultra-Turraxem vedla k její nadměrné aeraci. Proces byl modifikován na šetrné míchání skleněnou tyčinkou s cílem minimalizovat vnášení bublin. Výsledné kompozity byly charakterizovány z hlediska fyzikálních a mechanických vlastností, makro- i mikrostruktury a fázového složení.



MOC-G PAA:Triton X-100 1:3 (MGPT 1:3)
Porozita: 24,02 %
Pevnost v tlaku: 43,51 MPa

MOC-G PAA:Triton X-100 3:1 (MGPT 3:1)
Porozita: 15,28 %
Pevnost v tlaku: 66,18 MPa

Scintilátory na bázi $LuTaO_4$ a Gd_3TaO_7 dopované Ce^{III} a Mn^{V}

Vít Budínský

Ročník studia (kategorie): B3

Školitel: Ing. Vít Jakeš, Ph.D.

Scintilátory na bázi směsných oxidů tantalu a kovů vzácných zemin jsou perspektivním materiálem v oblasti detekce ionizujícího záření. Díky své vysoké hustotě a vysokému efektivnímu atomovému číslu se jeví jako vhodná matrice pro zachycení záření. Samotné $LuTaO_4$ a Gd_3TaO_7 nevykazují scintilaci a tak je nutné je dopovat ionty. Nadějné jsou například opticky aktivní ionty ceru (Ce^{III}) a manganu (Mn^{V}), které by se mohlo podařit stabilizovat v těchto matricích. Pro luminiscenci je velmi důležitá také mikrostruktura materiálu, kterou lze ovlivnit metodou přípravy.

Cílem této práce je syntetizovat materiály $LuTaO_4$ a Gd_3TaO_7 o různých koncentracích Ce nebo Mn v matrici a dále testovat jejich ko-dopaci, která by mohla zvýšit světelný výtěžek luminiscence. Reakcí v pevné fázi a Pechiniho sol-gel metodou (Ce na pozici trojmocného kationtu; Mn na pozici Ta), byly připraveny vzorky s koncentracemi dopantů 1 a 0,1 at%, které byly následně analyzovány pomocí XRD a byla sledována jejich fázová čistota. Dalším krokem bude proměření jejich luminiscenčních vlastností a porovnání použitých metod syntézy. Na základě těchto poznatků pak bude následovat příprava a charakterizace dalších vzorků vedoucích k optimálnímu složení, které bude použito k pěstování monokrystalů těchto oxidů.

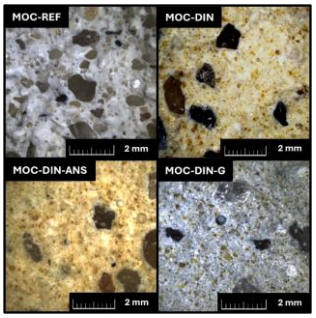
Kompozity na bázi MOC obohacené o nanomateriály a recyklovaná plniva z křemičitých cihel

Petra Dlouhá

Ročník studia (kategorie): B3

Školitel: Ing. Anna-Marie Lauermannová, Ph.D.

Recyklace keramických materiálů snižuje objem odpadu ukládaného na skládky a umožňuje částečně nahradit primární suroviny. Mezi tento keramický odpad patří například žáruvzdorný dinas (DIN), který tvoří vyzdívky v průmyslových pecích. Po skončení jeho životnosti se z něj stává sekundární surovina s vysokým obsahem SiO_2 (přes 93 %) využitelná jakožto plnivo do cementu na bázi reaktivního oxidu hořečnatého (MOC, z angl. Magnesium oxychloride cement). Tyto kompozity jsou známou alternativou k portlandskému cementu, jelikož dosahují vyšších mechanických pevností, pojmou různé druhy plniv a jejich výroba je ve výsledku ekologicky šetrnější. Hlavním nedostatkem MOC je však nízká odolnost vůči působení vody. Za účelem zlepšení materiálových vlastností se do MOC mohou přidávat různá aditiva. Tato práce se zabývá vlivem recyklovaného dinasového plniva a pokročilých 2D nanomateriálů s vynikajícími fyzikálně-chemickými vlastnostmi (grafenu – G, a hliníkových nanodesiček – ANS) v dávce 0,1 hm. % na mechanické vlastnosti, mikrostrukturu a odolnost vůči vodě MOC kompozitů. Z naměřených dat vyplývá, že nejvyšší hodnoty pevnosti v tahu za ohybu dosáhl vzorek s přídavkem ANS (18,77 MPa), zatímco nejnižší pevnost vykazoval vzorek s G (15,36 MPa). Pevnost v tlaku byla nejvyšší u kompozitu pouze s dinasovým plnivem (94,22 MPa). Odolnost vůči působení vody se v porovnání s referenčním materiálem výrazně zvýšila u všech modifikovaných vzorků, což potvrdil nárůst součinitele změkčení z 73,2 % u reference na 88,1 % u vzorku s ANS.



Studium kompozitních materiálů na bázi MOC dopovaných čedičovými vlákny povlakovanými nanostrukturovaným uhlíkem

Autor: Matyáš Vejtruba

Ročník studia (kategorie): B3

Školitel: Ing. Anna-Marie Lauermannová Ph.D.

Hořečnatý oxychloridový cement (MOC), známý jako Sorelův cement, je pojivo vznikající reakcí reaktivního oxidu hořečnatého a vodného roztoku chloridu hořečnatého. Vyznačuje se rychlým tuhnutím a vysokou mechanickou pevností, jeho využití ale omezuje nízká odolnost vůči vodě. Práce zkoumala vliv čedičových vláken potažených nanostrukturovaným uhlíkem (CBF) na mikrostrukturu, fázové složení, mechanické vlastnosti a odolnost MOC kompozitů vůči vodě.

V první fázi experimentu byla charakterizována samotná vlákna. Následně v druhé fázi byla vlákna přidána v množství 0,5, 1, 2 a 3 hm. % vzhledem k hmotnosti matrice do MOC kompozitů se standardním pískem jako plnivem. K charakterizaci vláken a kompozitů byly použity mikroskopické, spektroskopické a difrakční metody. Kompozity byly porovnány s referencí bez vláken z hlediska otevřené porozity, nasákavosti a mechanických vlastností před působením vody a po něm.

Nejlepší kombinaci pevnosti a odolnosti vůči vodě vykazoval vzorek s 0,5 hm. % CBF. Pevnost v tlaku byla v suchém stavu srovnatelná s referencí (74,71 oproti 74,56 MPa) a po 24 hodinách ve vodě mírně vyšší (55,38 oproti 53,02 MPa). U vyšších přídavků rostly otevřená porozita a nasákavost, což se negativně projevilo na užitných vlastnostech kompozitů.

Charakterizace a úprava NMC Black Mass pro aplikace v energetice

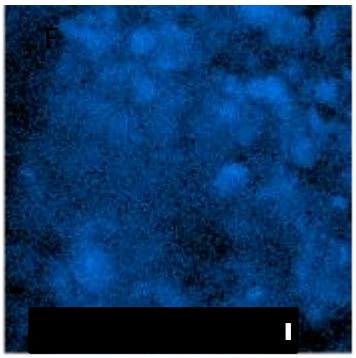
Ngo Trung Kien

Ročník studia (kategorie): B3

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

NMC Black Mass je materiál v podobě černého prášku, který obsahuje oxidy niklu, manganu a kobaltu a další složky, jako jsou grafit, lithium a zbytky fluorovaného elektrolytu. Cílem této práce bylo analyzovat a modifikovat NMC Black Mass do formy vhodné pro využití jako katalyzátor v plazmovém reaktoru pro pyrolýzu uhlovodíků. Elementární složení materiálu bylo analyzováno pomocí metod XRF, XPS a EDS, přičemž ke stanovení lithia byla využita analýza ICP-OES. Pro analýzu fázového složení byla použita rentgenová difrakční analýza (XRD). Z morfologického hlediska byla hodnocena velikost a distribuce částic pomocí laserové difrakce, zatímco specifický povrch a porozita byly stanoveny sorpčním analyzátorem(BET). Tepelná stabilita byla studována pomocí STA-MS.Z výsledků EDS a XRF analýz vyplynulo, že NMC Black Mass obsahuje vysokou koncentraci fluoru. Jeho přítomnost by při přímém dávkování do plazmového reaktoru mohla způsobovat korozi zařízení a představovat potenciální zdravotní riziko.

Za účelem odstranění fluoru z materiálu byla provedena kalcinace při různých teplotách a časových intervalech, a dále pokusy o selektivní rozpouštění a louhování ve vodě a ve zředěné kyselině dusičné. Jako nejúčinnější se ukázala metoda louhování ve zředěnékyselině dusičné, po které koncentrace fluoru klesla pod detekční limit metod EDS a XRF, zároveň dochází pouze k zanedbatelnému rozpouštění kovů Takto modifikovaný materiál představuje vhodný prekurzor pro zamýšlenou katalytickou aplikaci.



S2 - Ústav anorganické chemie – laboratoř D2

KOMISE

doc. Ing. Pavla Nekvindová, Ph.D. (přeseda)
Ing. Irena Hoskovcová, CSc.
Ing. Kateřina Szökölová, Ph.D.
Ing. Radka Guldanová, Ph.D. (CXI TUL)
Ing. Kateřina Kovaříčková (Odd. pro výzkum a transfer technologií VŠCHT)

PROGRAM

8:30 **zahájení – Laboratoř D1**

9:00 Adam Šťastný (B3, Ing. Adéla Jiříčková Ph. D.)
Studium kinetiky hydratace a fázového složení M-S-H cementů

9:15 Jáchym Skrbek (B3, Ing. Filip Antončík, Ph.D.)
Yb-substituce pro kontrolu pinningu v GdBCO supravodivých bulcích připravených metodou SDMG

9:30 Jamila Safarli (B3, Ing. Martin Pižl, Ph.D.)
Photo-electrochemical Reduction of CO_2 by Re(I) complexes

9:45 Sarina Kohen (B3, Dr. Irina Alexandra Vlčková Kühne)
Functional Coordination Complex Thin Layer Films: From Preparation and Characterization to Gas Sensing Application

10:00 Benan Sağcan (M1, M.Sc. Bing Wu, Ph.D.)
Recent Advances in Proton Storage Materials and Electrochemical Characterization

10:15 Bc. Přemysl Dobrý (M1, doc. Ing. Kateřina Rubešová, Ph.D., doc. Ing. Jan Bárta, Ph.D.)
Fotochemická příprava vícesložkových jednoklonných oxidů $\{RE\}_4\neg Al_2O_9$

10:30 Bc. Jan Fujera (M1, Ing. Filip Antončík, Ph.D.)
Příprava a vlastnosti vysokoteplotních REBCO fází pro zárodkování jednodoménových supravodivých krystalů

10:45 Bc. Eduard Leitner (M1, doc. Ing. Kateřina Rubešová, Ph.D.)
Příprava a charakterizace kompozitů na bázi scintilačních částic a skel

Cca 13:00 **vyhlášení výsledků**

Studium kinetiky hydratace a fázového složení M-S-H cementů

Adam Šťastný

Ročník studia (kategorie): B3

Školitel: Ing. Adéla Jiříčková Ph. D.

Výroba tradičního portlandského cementu je energeticky velmi náročná a celosvětově zodpovídá za 7–8 % emisí oxidu uhličitého. Pojiva na bázi hydrátů křemičitanu hořečnatého (M-S-H) proto představují slibnou nízkoemisní alternativu. Oproti portlandskému cementu vykazují M-S-H materiály nižší pH (kolem hodnoty 10), což otevírá nové možnosti jejich uplatnění, například při imobilizaci radioaktivního odpadu. Širšímu využití těchto materiálů však zatím brání neúplné poznání mechanismů a kinetiky jejich vzniku.

Tato práce si klade za cíl sledovat kinetiku hydratace M-S-H fáze pomocí rentgenové difrakce (XRD) a posoudit vliv molárních poměrů Mg/Si na její formování. Výchozí vzorky s různymi poměry Mg/Si byly syntetizovány s využitím lehkého oxidu hořečnatého, koloidního roztoku oxidu křemičitého (LUDOX) a hexametafosforečnanu sodného jako plastifikátoru. U vybraných vzorků (Mg/Si 0,9 a 1,05) byla následně měřena kinetika pomocí XRD. Získané difraktogramy potvrdily, že při hydrataci dochází ke vzniku gelové fáze M-S-H a také brucitu, který následně reaguje s SiO_2 za vzniku téže fáze M-S-H. Podle získaných výsledků lze říct, že vznik M-S-H fáze trvá přibližně 8 dní. Získané poznatky o kinetice reakce poslouží jako odrazový můstek pro další optimalizaci pojiva s využitím levnějšího průmyslového MgO a pro ladění reologických vlastností směsí určených pro 3D tisk stavebních prvků.

Yb-substituce pro kontrolu pinningu v GdBCO supravodivých bulcích připravených metodou SDMG

Jáchym Skrbek

Ročník studia (kategorie): B3

Školitel: Ing. Filip Antončík, Ph.D.

Primárním kritériem v řadě aplikací REBCO supravodičů je kritická proudová hustota, jejíž maximalizace závisí především na efektivitě umělých pinningových center. V tenkých vrstvách se jako velmi efektivní nástroj ukázala RE-RE substituce Yb do Gd-Ba-Cu-O (GdBCO) systému. Cílem práce je tudíž příprava Yb substituovaných bulků Gd-Yb-Ba-Cu-O (GdYbBCO) růstem z taveniny. Prekurzory systémů GdYbBCO a GdBCO byly připraveny syntézou v pevné fázi, která zahrnovala šest kalcinací. Následné analýzy XRD, XRF a STA prokázaly vznik požadovaných fází, vhodných pro růst bulků. Navzdory úspěšné přípravě prekurzorů se růst GdYbBCO bulku pomocí metody jednosměrného růstu z taveniny (SDMG) v molárním poměru 1:1 opakovaně nepodařilo úspěšně realizovat. Pro objasnění růstového mechanismu byl proto použit nový postup, spočívající v postupném přidávání Yb do GdBCO prekurzoru. Tímto způsobem se dosud podařilo narůst bulk GdYbBCO až s 10 mol. % Yb o průměru 21 mm. Další výzkum bude zaměřen na optimalizaci růstu GdYbBCO s cílem maximalizace podílu Yb a na charakterizaci supravodivých vlastností. Optimalizované GdYbBCO bulky mohou najít uplatnění v náročných aplikacích, které vyžadují maximalizaci proudové hustoty pro dosažení silných zachycených polí při nízkých teplotách.

Photo-electrochemical Reduction of CO_2 by Re(I) complexes

Jamila Safarli

Ročník studia (kategorie): B3

Školitel: Ing. Martin Pižl, Ph.D.

Reducing greenhouse gases, especially CO_2, is one of today's major challenges. CO_2 reduction is usually carried out by electrocatalysis or photocatalysis, and rhenium(I) complexes are frequently chosen to study both. Conventional rhenium(I) polypyridyl catalysts convert CO_2 predominantly to CO. However, they require high overpotentials and tend to deactivate by dimerization. A widely used strategy to address these limits is to replace the polypyridyl ligand with an α-diimine ligand (NN), such as bis(imino)acenaphthene (BIAN) or 1,4-diazabutadiene (DAB). These ligands are easily accessible and readily tuned with bulky or fluorinated substituents. Bulky groups sterically isolate the metal centre and prevent deactivation, while electron-withdrawing fluorinated groups shift the reduction potential to less negative values. Together, these features are expected to improve electrocatalytic turnover, reduce the energy input, and maintain high Faradaic efficiency for CO_2-to-CO conversion. Therefore, this work aims to synthesize and characterize fac-[Re(NN)$(CO)_3$Cl] complexes bearing trityl-substituted and fluorinated DAB and BIAN ligands.

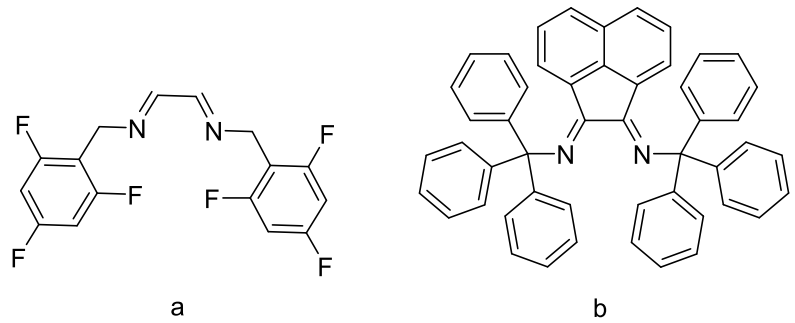


Figure 1 Structure of a) N,N'-bis(2,4,6-trifluorobenzylidene)DAB and b) N,N'-bis(trityl)BIAN

Functional Coordination Complex Thin Layer Films: From Preparation and Characterization to Gas Sensing Application

Sarina Kohen

Ročník studia (kategorie): B3

Školitel: Dr. Irina Alexandra Vlčková Kühne

Fe(III) spin crossover (SCO) complexes can reversibly switch between low-spin (LS) and high-spin (HS) states in response to temperature, light or pressure. The switching changes their magnetic and electrical properties and their color, making them promising for molecular sensors, data storage, displays and molecular electronics.

In this project, we will synthesize Fe(III) complexes using a hexadentate Schiff base ligand with various substituents and investigate their SCO behavior. We aim for complexes that remain low-spin near room temperature while being sensitive enough to undergo a spin transition. Upon interaction with guest molecules, a transition is accompanied by a color change from blue (LS) to red (HS) together with changes in electrical properties due to the change of the electronic configuration.

The complexes will be deposited as thin films to study their surface morphology and sensing response to volatile and hazardous gases. As the complexes are ionic and highly resistive, they will also be incorporated into polymer hosts to obtain homogeneous solution-processed films. The aim is to explore Fe(III) SCO thin films as gas sensors combining visible color changes with electrical responses, enabling both optical and chemiresistive detection.

Recent Advances in Proton Storage Materials and Electrochemical Characterization

Benan Sağcan

Ročník studia (kategorie): M1

Supervisor: M.Sc. Bing Wu, Ph.D.

The growing demand for high-performance electrochemical energy storage has intensified research into alternative charge-storage mechanisms and advanced electrode materials, aiming to achieve high reversible capacity, rapid charge–discharge kinetics, and long-term cycling stability while overcoming transport limitations and structural degradation. In this context, aqueous proton batteries offer the potential for ultrafast charging and high-rate operation, benefiting from rapid H^+ transport through hydrogen-bond networks. MoO_3 is particularly attractive among proton-storage materials because it can deliver high reversible capacities even at high charge-discharge rates. The material hosts H^+ insertion coupled to Mo reduction, forming H_xMoO_3; however, poor electronic conductivity, structural changes, and dissolution impair cycling. To address these limitations, MXene-derived MoO_3 and Mo–Ti MXene-based composites are studied to enhance electron transport and redox-site accessibility. Electrolyte acidity and water activity affect insertion, MoO_3 dissolution, and hydrogen evolution. CV probes redox peaks and scan-rate response; GCD measures reversible capacity, rate capability, and retention; EIS probes ohmic and charge-transfer resistance; GITT assesses polarization and estimates apparent proton diffusivity. Collectively, these techniques provide insight into how electrode architecture governs proton transport, charge-transfer kinetics, and cycling stability.

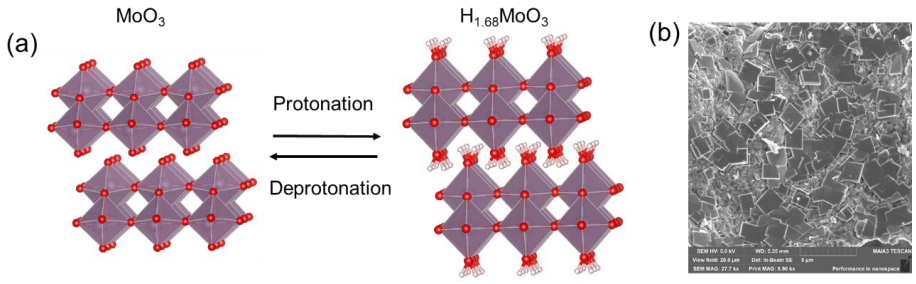


Figure 1. *(a) Schematic illustration of proton insertion into layered MoO_3 to form H_xMoO_3 and (b) an SEM image showing the plate-like MoO_3 on Mo_2CT_x MXenes.*

Fotochemická příprava vícesložkových jednoklonných oxidů $\{RE\}_4Al_2O_9$

Bc. Přemysl Dobrý

Ročník studia (kategorie): M1

Školitel: doc. Ing. Kateřina Rubešová, Ph.D.,
doc. Ing. Jan Bárta, Ph.D. (FJFI)

Anotace: Vlastnosti jednoklonných hlinitých oxidů vzácných zemin $\{RE\}_4Al_2O_9$ nejsou, na rozdíl od příbuzných granátů $\{RE\}_3Al_5O_{12}$ a perovskitů $\{RE\}AlO_3$, příliš prozkoumané, s čímž souvisí i jejich velmi nízké uplatnění. Současný výzkum ukazuje na potenciální využití těchto materiálů jako žáruvzdorných a ochranných vrstev nebo scintilačních materálů s krátkým dosvitem. Pro optimalizaci těchto vlastností se ukazuje výhodné využít principů materiálů s vysokou entropií. Teoretická část této práce se zabývá sloučeninami v termodynamickém systému $\{RE\}_2O_3$ - Al_2O_3, jejich luminiscenčními vlastnostmi a principem materiálů s vysokou entropií. Experimentální část se zabývá přípravou vícesložkových $\{RE\}_4Al_2O_9$ fotochemickou spolusrážecí metodou. Fázová analýza vzorků pomocí rentgenové difrakce potvrdila vysoké zastoupení jednoklonné fáze ve většině připravených vzorků. U žádného vzorku nebylo ovšem dosaženo úplné fázové čistoty. Změřené luminiscenční vlastnosti připravených vzorků převážně přísluší právě sekundárním fázím.

Příprava a vlastnosti vysokoteplotních REBCO fází pro zárodkování jednodoménových supravodivých krystalů

Bc. Jan Fujera

Ročník studia (kategorie): M1

Školitel: Ing. Filip Antončík, Ph.D.

Úspěšnost růstu krystalů vysokoteplotních REBCO systémů (např. Nd-Ba-Cu-O) pomocí konvenčních zárodků je silně limitována peritektickou teplotou daných systémů. Nedostatečná chemická odolnost běžných zárodků vůči REBCO tavenině vede k jejich rozkladu ještě před zahájením krystalového růstu. Cílem je tedy připravit REBCO fáze s vyšší peritektickou teplotou, než mají současné zárodky při současném udržení vyhovujících mřížkových parametrů. Reakcí v pevné fázi z příslušných oxidů a uhličitanů byla syntetizována řada modifikovaných REBCO fází. Na základě diferenční termické analýzy bylo u dvou z nich potvrzeno zásadní zvýšení peritektické teploty: systémy La-Ba-Cu-O (teplota tání cca 1073 °C) a Nd-Ba-Sr-Cu-O (cca 1086 °C), které převyšují teplotu tání standardního Nd-Ba-Cu-O až o 20 °C. Následné testy nukleace ukázaly, že fáze vykazují vyšší termickou stabilitu, ale zatím nedochází ke krystalizaci zrn použitelných jako zárodky. U systému Nd-Ba-Sr-Cu-O byla dále zkoumána závislost teploty tání na stechiometrickém poměru barya a stroncia. Dalšími kroky výzkumu bude vyzkoušení jiných metod růstu těchto fází (např. růst taveniny za použití tavidla). Dále bude probíhat růst fáze Nd-Ba-Sr-Cu-O s upraveným složením pro maximalizaci teploty tání.

Příprava a charakterizace kompozitů na bázi scintilačních částic a skel

Bc. Eduard Leitner

Ročník studia (kategorie): M1

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

Scintilátory jsou materiály, které převádějí ionizující záření na viditelné nebo ultrafialové záření. Uplatňují se například jako důležité součásti radiačních detektorů. Scintilátory se často používají ve formě monokrystalů, které mají výborné optické vlastnosti, ale jejich výroba je finančně náročná. Alternativu představují skelné scintilátory, jejichž produkce není tak nákladná a na rozdíl od monokrystalů je lze snadno tvarovat. Významnou nevýhodu ale představuje jejich amorfní struktura, která snižuje účinnost scintilace. Další možností jsou kompozity, u kterých scintilaci zajišťují krystalické částice ve skelné matrici. Tento přístup umožňuje levně připravit scintilátory libovolných tvarů s vhodnými scintilačními vlastnostmi.

Tato práce se zabývá přípravou skelných kompozitů metodou *micro-pulling-down* (μ-PD), která by měla zajišťovat homogenní distribuci částic ve skelné matrici. K počátečnímu zkoumání byly zvoleny částice YAG:Ce a matrice z borosilikátového skla. Následně byly testovány i další druhy částic (GGAG:Ce, LuAG:Ce, YAP:Ce) ve spojení s borosilikátovou nebo borofosfátovou matricí. Rovněž byla provedena detailní charakterizace výchozích materiálů a připravených kompozitů. Zkoumány byly především luminiscenční vlastnosti a jejich souvislost s mikrostrukturou vzorků.

S3 - Ústav anorganické chemie – místnost A211

KOMISE

Ing. Jan Luxa, Ph.D. (předseda)
Ing. Jiří Šturala, Ph.D.
Ing. Tomáš Hlásek, Ph.D. (CAN Superconductors, s.r.o.)
Ing. Anna-Marie Lauermannová, Ph.D.
Ing. Marie Černá (ATG s.r.o.)

PROGRAM

8:30 **zahájení – Laboratoř D1**

9:00 Medet Madiyarov (M1, Ing. Martin Pižl, Ph.D.)
Fotoaktivní Cu(I) komplexy pro oxidaci DNA

9:15 Bc. Alžběta Picková (M1, Ing. Jan Luxa, Ph.D.)
Exfoliace směsných MAX fází pro elektrokatalytické aplikace

9:30 Bc. Adriana Hačková (M1, Ing. Jiří Šturala, Ph.D.)
Exfoliace Zintlovy fáze CaGe2

9:45 Bc. Tereza Tůmová (M1, Ing. Martin Pižl, Ph.D.)
Nové nikelnaté komplexy pro katalytický vývoj vodíku

10:00 Bc. Jan Abrham (M2, doc. Ing. Pavla Nekvindová, Ph.D.)
Příprava transparentního nano-sklokeramického kompozitu $RE_3Al_5O_{12}$:Ce pro UV/Vis/NIR scintilátory

10:15 Bc. Veronika Bárta (M2, prof. Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.)
Využití odpadu z vláknocementových desek v kompozitech na bázi MOC

10:30 Bc. Martin Brom (M2, Ing. Holub Jan Ph.D.)
Příprava a charakterizace multivalentních supramolekulárních gridů

10:45 Bc. Radovan Fojt (M2, prof. Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.)
Využití odpadní skelné strusky z plazmového zplyňování vyřazených lopatek větrných elektráren v ekologických MOC stavebních kompozitech

Cca 13:00 **vyhlášení výsledků**

Fotoaktivní Cu(I) komplexy pro oxidaci DNA

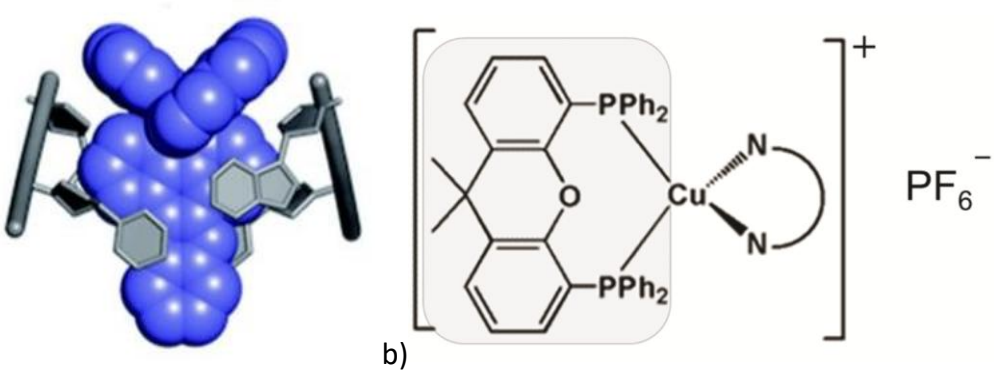
Medet Madiyarov (M1)

Ročník studia (kategorie):

Školitel: Ing. Martin Pižl, Ph.D.

Interakce koordinačních sloučenin s DNA je předmětem intenzivního studia, protože umožňuje vyvíjet látky využitelné například ve fototerapii. Jedním z hlavních způsobů této interakce je interkalace, při níž se aromatická část ligandu vsouvá mezi páry bází DNA (Obr. č. 1a). U vhodných fotoaktivních komplexů může po ozáření světlem následovat fotooxidace DNA. K tomuto účelu se mimo jiné zkoumají ruthenaté komplexy. Jejich vysoká cena však motivuje hledání alternativ založených na dostupnějších kovech, například mědi.

Tato práce je zaměřena na syntézu a charakterizaci mědných komplexů (Obr. č. 1b) obsahujících difosfinový ligand a α-diiminový ligand dipyrido[3,2-a:2',3'-c]fenazin (dppz) nebo jeho nitrilem substituované analogy, konkrétně 11-CN-dppz a 11,12-diCN-dppz. Difosfinový ligand stabilizuje měď v oxidačním stavu +I a její tetraedrické okolí. Jako π-akceptor navíc snižuje elektronovou hustotu na kovu. Komplexy proto vykazují absorpci ve viditelné oblasti spektra, která odpovídá přenosu náboje z mědi na α-diiminový ligand.



a) b)

Obr. č. 1: (a) Schematické znázornění interkalace komplexu do DNA; (b) obecná struktura studovaných mědných komplexů s ligandem xantphos a deriváty dppz

Exfoliace směsných MAX fází pro elektrokatalytické aplikace

Bc. Alžběta Picková

Ročník studia (kategorie): M1

Školitel: Ing. Jan Luxa, Ph.D.

MXeny představují skupinu dvourozměrných karbidů a nitridů připravovaných selektivním leptáním vrstevnatých prekurzorů, tzv. MAX fází. Díky elektrické vodivosti a povrchovým a chemickým vlastnostem nacházejí uplatnění například v superkapacitorech, bateriích a elektrokatalýze. Jednu z podskupin představují směsné MAX fáze, ve kterých jsou dva různé kovové prvky pravidelně uspořádány v rámci jednotlivých atomárních vrstev.

Práce se zaměřuje na přípravu MXenů z komerčních MAX fází $(W_{2/3}Y_{1/3})_2AlC$ a $(Mo_{2/3}Y_{1/3})_2AlC$ a na porovnání dvou způsobů chemického leptání: koncentrovanou kyselinou fluorovodíkovou (HF) a mírnější metodou, která využívá in-situ připravenou HF. Po exfoliaci byly pro další delaminaci MXeny interkalovány pomocí tetrabuthylamonium hexafluorofosfátu. Připravené materiály byly charakterizovány z hlediska jejich fázového složení pomocí metody RTG difrakce, jejich morfologie byla stanovena pomocí skenovací elektronové mikroskopie a složení charakterizováno pomocí energiově disperzní spektroskopie a fotoelektronové spektroskopie. Elektrokatalytické vlastnosti byly hodnoceny pro reakci vývoje vodíku v kyselém a zásaditém prostředí. Výsledky ukazují, že obě metody přípravy lze použít pro přípravu MXenů a že u obou materiálů dochází ke zvýšení elektrokatalytické aktivity pro vývoj vodíku.

Exfoliace Zintlovy fáze $CaGe_2$

Bc. Adriana Hačková

Ročník studia (kategorie): M1

Školitel: Ing. Jiří Šturala, Ph.D.

Cílem práce je vyvinout nové katalytické systémy na bázi germananu. Základem těchto materiálů bude exfoliovaná Zintlova fáze $CaGe_2$, která poskytuje vrstevnatý germananový skelet s navázanými organickými funkčními skupinami. Ten bude následně dekorován katalyticky aktivními přechodnými kovy, především kobaltem, platinou a rhodiem, jejichž katalytické vlastnosti mohou zásadně ovlivnit reaktivitu a selektivitu výsledných katalytických systémů. Pozornost bude věnována nejen přípravě a charakterizaci těchto materiálů, ale i vztahu mezi jejich strukturou a katalytickou aktivitou. Hlavní zaměření připravených katalyzátorů bude na hydroformylační reakce v kapalné fázi, např. modelová reakce styrenu v toluenu za použití CO/H_2 na cinnamaldehyd (skořicový aldehyd). Práce tak otevírá možnost využití funkcionalizovaných germananů jako nové platformy pro heterogenní katalyzátory.

Nové nikelnaté komplexy pro katalytický vývoj vodíku

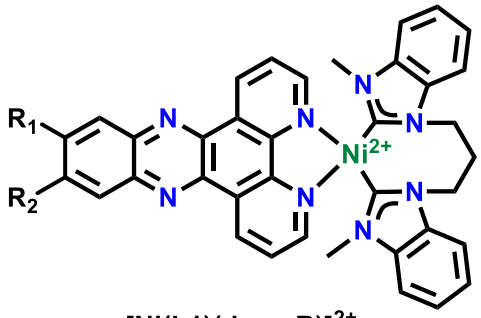
Bc. Tereza Tůmová

Ročník studia (kategorie): M1

Školitel: Ing. Martin Pižl, Ph.D.

S ohledem na environmentální aspekty se v současné době dostávají do popředí snahy o udržitelné a efektivní zapojení obnovitelných zdrojů do energetiky. Jednou z perspektivních cest je přeměna světelné energie na energii uloženou v chemických vazbách. Reakce vývoje vodíku (Hydrogen Evolution Reaction, HER) a redukce oxidu uhličitého (CO_2RR) za vzniku energeticky bohatých paliv tak patří mezi klíčové fotokatalytické procesy. Molekulární fotokatalytické systémy obvykle využívají fotosenzitizátor a katalyzátor, mezi nimiž dochází k přenosu elektronů. Jejich propojení v rámci jedné struktury, například dvoujaderného komplexu, může zefektivnit přenos elektronů a podpořit tak efektivitu katalýzy.

Dosavadní práce je zaměřená na nalezení vhodné katalytické části takovéhoto dvoujaderného komplexu, zejména pak vhodných ligandů k cenově dostupnému nikelnatému centrálnímu atomu. Za tímto účelem byla připravena série tří *N*-heterocyklických karbenových (NHC) ligandů, z nichž ligand L1 byl dále využit k přípravě nikelnatého prekurzoru a série komplexů $[Ni(L1)(dppz\text{-}R)]^{2+}$ s různě substituovanými deriváty ligandu dppz (=dipyrido[3,2-a:2‘,3‘-c]fenazin). Připravené komplexy byly následně charakterizovány pomocí elektrochemických a spektroelektrochemických metod s cílem posoudit vhodnost jejich využití.



$[Ni(L1)(dppz\text{-}R)]^{2+}$

$[Ni(L1)(dppz)]^{2+}$:	**R_1=H**	**R_2=H**
$[Ni(L1)(dppz\text{-}CN)]^{2+}$:	**R_1=H**	**R_2=CN**
$[Ni(L1)(dppz\text{-}diCN)]^{2+}$:	**R_1=CN**	**R_2=CN**

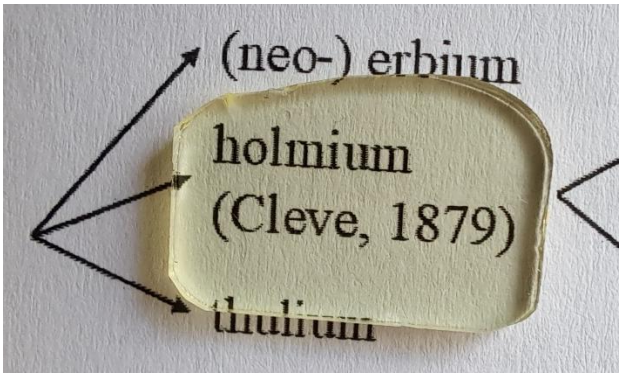
Příprava transparentního nano-sklokeramického kompozitu $RE_3Al_5O_{12}$:Ce pro UV/Vis/NIR scintilátory

Bc. Jan Abrham

Ročník studia (kategorie): M2

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

V dnešním světě jsou scintilátory neodmyslitelnou součástí moderních diagnostických přístrojů a pokročilých analytických metod. Jedná se o materiály schopné převádět vysokoenergetické záření do UV/Vis/NIR oblasti, kde je snadné signál detekovat. Cílem práce je příprava transparentních sklokeramických vzorků s nanočásticemi vykazujícími scintilaci ve Vis/NIR oblasti. Metodou sol-gel byla připravena série nanočástic $RE_3Al_5O_{12}$:Ce, kde RE = Y, La, Ho, Er, Tm, Yb a Lu, které byly vhazovány do sklářského kmene, jehož základem byla směs SiO_2 a K_2O. Vzorky byly charakterizovány z hlediska složení a struktury (XRD, XRF, Ramanova spektroskopie, DTA), dále velikosti a struktury nanočástic (TEM, NBD, EDS), optických vlastností jako index lomu a absorpce. V neposlední řadě byla zkoumána fotoluminiscence v VUV/UV/Vis/NIR oblasti a scintilační vlastnosti. Připravená sklokeramika (viz obrázek) obsahovala nanočástice s velikostí mezi 1 – 20 nm, ve VIS oblasti byla transparentní a vykazovala luminiscenci i scintilaci.



Obr. Ukázka připraveného nano-sklokeramického materiálu ($Ho_3Al_5O_{12}$:Ce)

Využití odpadu z vláknocementových desek v kompozitech na bázi MOC

Autor: Bc. Veronika Bárta

Ročník studia (kategorie): M2 (FCHI)

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

Vzhledem k rostoucímu množství stavebního odpadu se tato práce zabývá možností využít odpad z vláknocementových desek (FCBW z angl. *fibercement board waste*) jako plnivo do kompozitů na bázi hořečnatého oxychloridového cementu (MOC z angl. *magnesium oxychloride cement*). FCBW byl použit jako částečná, úplná, nebo nadbytečná náhrada nejjemnější frakce křemičitého písku. Jeho vliv na složení, mikrostrukturu, mechanické vlastnosti a odolnost kompozitů vůči vodě byl hodnocen pomocí komplementárních metod XRF, XRD, SEM, EDS, optické mikroskopie, STA-MS a materiálových zkoušek.

Hlavní pojivová fáze 5 MOC se vytvořila ve všech vzorcích; při vyšším obsahu FCBW byly zjištěny také fáze 3 a brucit. Přídavek odpadu snížil objemovou hmotnost o 7,4–8,2 %, zatímco otevřená pórovitost vzrostla z 13,4 % na 19,8–22,5 %. Současně klesala pevnost v tlaku i odolnost vůči vodě. Nejlepší poměr mezi využitím odpadu a vlastnostmi kompozitu vykázala částečná náhrada písku nižší dávkou FCBW. Jeho využití je proto možné zvážit pro aplikace s omezeným působením vlhkosti. Další výzkum by se měl zaměřit na stanovení optimálního množství a způsobu přidávání FCBW do kompozitů tak, aby se omezil nárůst otevřené pórovitosti a zlepšila se odolnost vůči vodě při co největším zachování mechanických vlastností materiálu.

Příprava a charakterizace multivalentních supramolekulárních gridů

Bc. Martin Brom

Ročník studia (kategorie): M2

Školitel: Ing. Holub Jan Ph.D.

Supramolekulární gridy představují vysoce uspořádanou architekturu organických ligandů a kovových iontů. Díky vysoce selektivní přípravě samoskladbou a možností periferní substituce aktivními substituenty mohou být snadno modifikovány pro celou řadu aplikací. [1] V tomto projektu jsou periferie substituovány takzvanými PROTACs (proteolysis-targeting chimeras). PROTACs jsou skupinou léčiv schopných vyvolat specifické odbourávání nežádoucích proteinů. Toto odbourávání je zprostředkováno nevazebnými interakcemi mezi cílovým proteinem, PROTACem a E3 ubiquitin ligázou, což vede k ubiquitinaci cílového proteinu a jeho následnému odbourání proteasomem. Nevýhodami klasických organických PROTAC jsou náročná syntéza a nepříznivá závislost jejich účinnosti na koncentraci (hook effect). [2] V tomto projektu bychom rádi studovali vliv substituce na samoskladbu gridů a vliv vícevaznosti (multivalence) a specifického uspořádání aktivních PROTAC center na rychlost odbourávání proteinů.

[1] John G. Hardy; Metallosupramolecular grid complexes: towards nanostructured materials with high-tech applications. *Chem. Soc. Rev.* 2013; 42 (19): 7881–7899. https://doi.org/10.1039/c3cs60061k

[2] Zhong, G., Chang, X., Xie, W. *et al.* Targeted protein degradation: advances in drug discovery and clinical practice. *Sig Transduct Target Ther* **9**, 308 (2024). https://doi.org/10.1038/s41392-024-02004-x

Využití odpadní skelné strusky z plazmového zplyňování vyřazených lopatek větrných elektráren v ekologických MOC stavebních kompozitech

Bc. Radovan Fojt

Ročník studia (kategorie): M2

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

Potřeba snižovat emise se nevyhnutelně týká i stavebního průmyslu, kde jen výroba portlandského cementu (PC), při započtení využité elektřiny a tepla, vyprodukuje zhruba 4.2 Gt emisí CO_2 ročně. Celkově je tak PC zodpovědný za zhruba 7.8 % světových emisí CO_2. Mnoho pozornosti je proto věnováno hledání alternativního pojiva a jedním ze slibných kandidátů je chlorid-oxid hořečnatý (magnesium oxychloride, MOC), kde lze při využití takzvané mokré cesty dosáhnout snížení až na 311 kg CO_2 na tunu MOC, tedy na pouhých 31 %.

MOC vykazuje lepší mechanické vlastnosti, odolnost vůči abrazi, tepelně a zvukově izolační vlastnosti a ohnivzdornost. Excelentní adheze a nižší *pH* pak umožňují využití rozličných alternativních plniv jako jsou dřevo, industriální odpad a sklo. Zároveň je také často umožněn jejich vyšší obsah vzhledem k matrici. Klíčovou překážkou je však nízká voděvzdornost. Jedním ze způsobů jejího zvýšení je přidání skla, se kterým může MOC reagovat na gelové fáze a nerozpustný forsterit. Tyto produkty poté chrání krystality matrice před vodou a blokují póry, čímž omezují její penetraci a transport.

Zkoumané plnivo (PPWB) – skelná struska – vzniká jako vedlejší odpadní produkt plazmového zplyňování lopatek větrných elektráren, kde primárním produktem je syntézní plyn určený hlavně pro výrobu energie. Sklo-vlákenný laminát z nějž jsou lopatky vyrobeny se recykluje velmi obtížně, zmíněné zplyňování je tak efektivním využitím tohoto odpadu. Nicméně odpadní struska je taktéž komplikovaný odpad. Obsahuje široké spektrum prvků, v němž mohou být přítomny i toxické těžké kovy a sklený prach navíc obecně způsobuje podráždění kůže a může způsobit poškození plic. Struska tím pádem není vhodná pro výrobu nového skla ani pro využití jakožto volného sypkého materiálu. Využití v MOC stavebních kompozitech se proto nabízí jako vhodné nejen skrz přirozenou tuhost skla a možné zvýšení voděvzdornosti formací nerozpustných fází, ale i skrz využití a současnou imobilizaci potenciálně nebezpečného sekundárního odpadu.

Byly připraveny 4 typy vzorků MOC kompozitů, jeden referenční s křemenným pískem, dva s různou náhradou písku odpovídajícími velikostními frakcemi PPWB a jeden s úplnou náhradou písku PPWB a zvýšeným obsahem plniva vzhledem k matrici. Vzorky byly následně charakterizovány z hlediska chemického složení (XRD, EDS), mikrostruktury (SEM, EDS) a mechanických (UTM) a fyzikálních vlastností. Plnivo bylo analyzováno z hlediska morfologie (OM), mikrostruktury (CLSM), distribuce velikosti částic (LD) a chemického složení (XRD, XRF).

S4 - Ústav anorganické chemie – místnost A210b

KOMISE

prof. Dr. Ing. David Sedmidubský (předseda)
Ing. Martin Pižl, Ph.D.
Ing. Vlastimil Mazánek, Ph.D.
Ing. Václav Bumbálek (S.P.T. spol. s.r.o.)
Ing. Michal Kamrádek, Ph.D. (ÚFE AV ČR, v. v. i.)

PROGRAM

8:30 **zahájení – Laboratoř D1**

9:00 Bc. Martin Jakšík (M2, Ing. Jan Luxa, Ph.D.)
Tranzistory řízené polem na bázi MoS_2 a SmOCl jako hradlového dielektrika

9:15 Bc. Adéla Kubištová (M2, Ing. Anna-Marie Lauermannová, Ph.D.)
Kompozity na bázi MOC se struskou z plazmového zplyňování čistírenských kalů

9:30 Bc. Hana Marková (M2, Ing. Petr Vařák, Ph.D.)
Nanočástice přechodných kovů ve skelných matricích

9:45 Bc. Matouš Řezníček (M2, Ing. Vilém Bartůněk, Ph.D.)
Syntéza a polymerní stabilizace palladiových nanočástic

10:00 Bc. Alisa Sosnovskikh (M2, prof. Ing. Zdeněk Sofer, Ph.D.)
Strukturní a anizotropní optické vlastnosti exfoliovaného VOCl

10:15 Bc. Radek Šifalda (M2, Ing. Vlastimil Mazánek, Ph.D.)
WSe_2 jako materiál pro fotodetekci: od exfoliace k tenkým vrstvám

10:30 Bc. Sára Šimčáková (M2, doc. Ing. Pavla Nekvindová, Ph.D.)
Nanokrystalický ZnO a jeho dopování lanthanoidy

Cca 13:00 **vyhlášení výsledků**

Tranzistory řízené polem na bázi MoS_2 a SmOCl jako hradlového dielektrika

Bc. Jakšík Martin

Ročník studia (kategorie): M2

Školitel: Ing. Jan Luxa, Ph.D.

2D polovodiče představují slibnou alternativu ke klasické křemíkové technologii, která v současnosti naráží na fyzikální limity miniaturizace. Jedním z těchto materiálů je sulfid molybdenu (MoS_2), který představuje perspektivní polovodič, ale pro jeho integraci do elektronických obvodů je zapotřebí nalézt kompatibilní dielektrický materiál.

Tato práce se zabývá mechanickou exfoliací tenkých vrstev MoS_2 a SmOCl pro využití v tranzistorech řízených polem. Tenké vrstvy byly připraveny pomocí tzv. „scotch-tape“ metody a následně složeny do tranzistorové struktury s využitím polykarbonátové (PC) přenosové techniky. Tranzistor byl testován z hlediska elektronických vlastností a bylo ukázáno, že s využitím SmOCl jako hradlového dielektrika lze dosáhnout vysokých I_{ON}/I_{OFF} poměrů, nízkého prahového napětí při současném zachování lineární závislosti proudové odezvy. Tyto výsledky celkově poukazují na skutečnost, že SmOCl může sloužit jako efektivní 2D hradlový materiál pro novodobé tranzistory.

Kompozity na bázi MOC se struskou z plazmového zplyňování čistírenských kalů

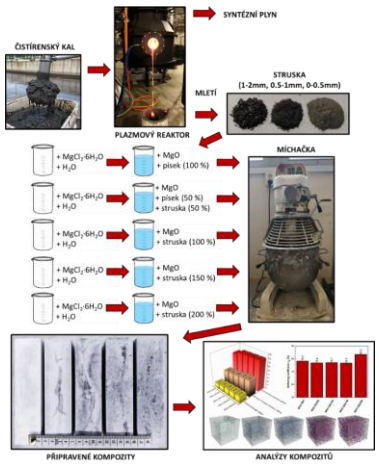
Bc. Adéla Kubištová

Ročník studia (kategorie): M2

Školitel: Ing. Anna-Marie Lauermannová, Ph.D.

V této práci byla využita struska z čistírenských kalů jako náhrada pískového plniva v kompozitech na bázi MOC (magnesium oxychloride cement). Kompozity na bázi MOC se ukazují jako ekologičtější alternativa k portlandskému cementu. Tento charakter kompozitů na bázi MOC dále posilujeme využitím odpadního materiálu, jako náhrady pískového plniva, které je nutné těžit jako primární surovinu.

Pro srovnání byly připraveny referenční vzorky MOC bez strusky a vzorky s rostoucím podílem strusky jako náhrady písku. U připravených vzorků a strusky bylo analyzováno chemické a fázové složení pomocí rentgenové fluorescenční (XRF) a difrakční (XRD) analýzy. Mikrostruktura skenovací elektronovou mikroskopií (SEM) a zastoupení prvků energiově disperzní spektroskopií (EDS). Také byly analyzovány porozita, mechanické vlastnosti kompozitů a odolnost vůči působení vody. Výsledky analýzy mechanických vlastností ukázaly, že i při využití dvojnásobku množství strusky oproti písku jako plniva v kompozitu, došlo ke zlepšení pevnosti v tlaku o 11,9 %, modulu pružnosti o 25,2 % a pevnosti v ohybu o 33,6 %. Tyto výsledky prokazují, že cement na bázi MOC v kombinaci se struskou představuje vysoce perspektivní kompozitní materiál. Kombinuje redukci uhlíkové stopy s valorizací odpadního materiálu, a to nejen bez degradace užitných vlastností, ale naopak jejich vylepšení.



Nanočástice přechodných kovů ve skelných matricích

Bc. Hana Marková

Ročník studia (kategorie): M2

Školitel: Ing. Petr Vařák Ph.D.

Nanočástice kovů vykazují nelineární optické vlastnosti díky efektu lokalizované povrchové plasmonové rezonance. Tyto unikátní vlastnosti nacházejí uplatnění ve fotonice, ale i například jako jedna z možností barvení skla pro bižuterní aplikace. Značné problémy ovšem existují na poli technologie výroby kovových nanočástic ve skelných matricích, kde dochází k problémům především s optickou homogenitou a řízeným růstem nanočástic.

Tato práce se zabývá přípravou nanočástic zlata ve skelné matrici systému Y_2O_3-Al_2O_3-SiO_2. V práci je porovnávána klasická technologie přípravy skel v kelímku s bezkelímkovou metodou aerodynamické levitatace s laserovým ohřevem (ADL). Cílem je vyvinout metodu umožňující přípravu skla s homogenním rozložením nanočástic zlata a omezit jejich odpařování a shlukování. Zkoumán je vliv tavících podmínek a aditiv, které ovlivňují vznik, růst a velikost nanočástic. Pozornost je soustředěna především na homogenitu a optické vlastnosti výsledného skla. Pozorován byl pozitivní vliv přídavku SnO_2 na tvorbu nanočástic. Popisován je také vhodný technologický postup pro přípravu skla metodou ADL.



Porovnání vlivu přídavku cínu na výsledné optické vlastnosti skla vyrobeného metodou ADL

Syntéza a polymerní stabilizace palladiových nanočástic

Bc. Matouš Řezníček

Ročník studia (kategorie): M2

Školitel: Ing. Vilém Bartůněk, Ph.D.

Palladiové nanočástice představují cenné nanomateriály se širokým uplatněním v heterogenní katalýze. Vysoká cena primárních zdrojů palladia nutí z ekonomického a ekologického hlediska hledat cesty možné recyklace, například extrakcí odpadního materiálu do lučavky královské. Tato práce popisuje syntézu nanočástic palladia se zaměřením na optimalizaci redukce z lučavky královské a následnou koloidní stabilizaci nanočástic. Samotná redukce byla prováděna šetrnými redukčními činidly (kyselina askorbová, citrát sodný) a jako sterický stabilizátor byl použit polyethylenglykol a dextran. Využití biokompatibilních látek pro syntézu a stabilizaci navíc umožňuje širší použití takto připravených nanočástic i pro biomedicínské využití.

Strukturní a anizotropní optické vlastnosti exfoliovaného VOCl

Bc. Alisa Sosnovskikh

Ročník studia (kategorie): M2

Školitel: prof. Ing. Zdeněk Sofer, Ph.D.

Dvourozměrné materiály kombinující silné elektronové korelace s praktickou funkčností jsou stále vzácné. Chybí zejména systémy stabilní na vzduchu a snadno exfoliovatelné, které si při malé tloušťce zachovávají své vlastnosti a umožňují integraci do zařízení. Oxychlorid vanadu (VOCl), vrstevnatý Mottův izolátor se slabou mezivrstvovou interakcí a dielektrickou konstantou ~11,7, propojuje korelovanou fyziku s aplikacemi ve van der Waalsových heterostrukturách.

VOCl lze snadno exfoliovat na tenké vločky se silným optickým kontrastem a identifikovatelnou krystalografickou orientací. Ramanova spektroskopie odhaluje minimální závislost vibračních módů na tloušťce, v souladu se slabými mezivrstvovými interakcemi a zachováním objemového chování ve dvourozměrném limitu. Polarizačně rozlišená Ramanova měření ukazují směrovou závislost s kontrasty intenzity vybraných fononových módů blížícími se dvěma řádům mezi ortogonálními krystalografickými osami.

Tyto vlastnosti odlišují VOCl od mnoha van der Waalsových materiálů s výraznou tloušťkovou závislostí elektronických či optických vlastností a slabou anizotropií v rovině. V kombinaci se svou mírnou dielektrickou odezvou se VOCl jeví jako univerzální materiál pro zkoumání anizotropních korelovaných jevů a integraci do dvourozměrných zařízení.

WSe_2 jako materiál pro fotodetekci: od exfoliace k tenkým vrstvám

Bc. Radek Šifalda

Ročník studia (kategorie): M2

Školitel: Ing. Vlastimil Mazánek, Ph.D.

Práce se zabývá přípravou tenkých vrstev selenidu wolframičitého (WSe_2), který se díky svému přímému zakázanému pásu v monovrstvě, vysoké stabilitě a silné absorpci světla jeví jako perspektivní materiál pro optoelektroniku a fotodetektory. Krystal WSe_2 je zpracován metodou kapalné exfoliace, při níž dochází k oddělování jednotlivých vrstev tohoto materiálu. Následná centrifugace umožňuje separaci částic podle jejich velikosti a tloušťky, čímž lze získat suspenze obsahující vrstvy s odlišnými rozměrovými charakteristikami. Z připravených suspenzí jsou následně vytvářeny tenké filmy pomocí Langmuir–Schaeferovy depozice, která umožňuje kontrolované uspořádání materiálu na substrátu. Připravené vrstvy jsou dále zkoumány z hlediska jejich využitelnosti ve fotodetektorech.

Cílem této práce je optimalizovat proces separace nanovrstev podle velikosti a tloušťky. Z takto vzniklých suspenzí se dále připravily tenké vrstvy na substrát s předpřipravenými kontakty a dále se provedlo měření časové odezvy na záření v UV, viditelné a NIR oblasti.

Nanokrystalický ZnO a jeho dopování lanthanoidy

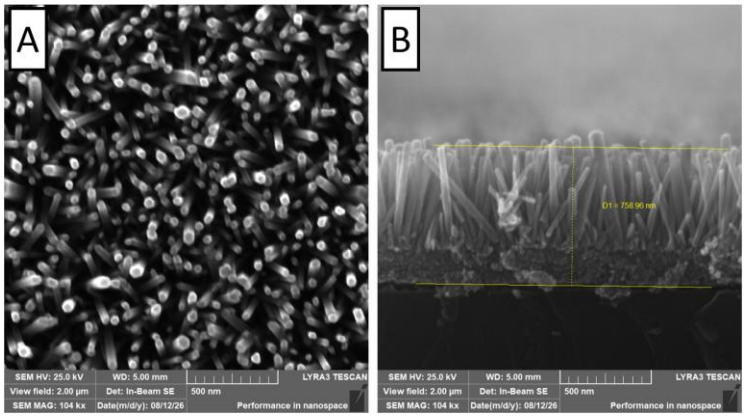
Řešitel: Bc. Sára Šimčáková

Ročník studia (kategorie): M2

Školitel: doc. Ing. Pavla Nekvindová, Ph.D., Mgr. Roman Yatskiv, Ph.D.

Oxid zinečnatý patří mezi polovodiče. Za běžných podmínek je nejstabilnější jeho hexagonální krystalová konfigurace, tj. strukturní typ wurtzit. Díky svým optickým a elektrickým vlastnostem našel uplatnění v nejrůznějších polovodičových technologiích. Jeho vlastnosti se dají ovlivňovat jak tvarem a velikostí nanobjektů, tak přidáním dopantů, které otvírají nové možnosti použití v elektronice, spintronice, optoelektronice nebo fotokatalýze. Velký vědecký zájem si jako dopanty získaly prvky vzácných zemin.

Tato práce je zaměřena na přípravu nanotyček ZnO metodou krystalizace z roztoku (CBD) a metodou hydrotermálního růstu. Zkoumána bude možnost dotování nanokrystalických struktur Holmiem. Připraveny byly zárodečné vrstvy ZnO na podložkách z monokrystalického křemíku a amorfního oxidu křemičitého metodou sol-gel. Následně byly na těchto vrstvách pěstovány nanotyčky ZnO, které vykazovaly různé parametry podle použité technologie a podmínek růstu. Připravené vzorky byly charakterizovány pomocí skenovací elektronové mikroskopie, rentgenové difrakce, Ramanovy spektroskopie, UV-VIS spektroskopie a fotoluminiscenční spektroskopie. Z výsledků je zřejmé, že se podařilo připravit nanotyčky s průměrem od 30 do 100 nm, které vykazují charakteristickou luminiscenci pro ZnO materiál, která bude v příspěvku diskutována.



Obr. 1: Snímek ZnO nanotyček, připravených metodou krystalizace z roztoku pořízený skenovací elektronovou mikroskopií; A) pohled na vzorek shora, B) pohled na hranu vzorku (rozlišit je možné Si substrát, zárodečnou vrstvu a nynotyčky)