



FAKULTA
CHEMICKÉ TECHNOLOGIE
VŠCHT PRAHA

Studentská Vědecká Konference

2023

23. 11. 2023

SBORNÍK ANOTACÍ

Fakulta chemické technologie

Organizační tým

FAKULTNÍ KOORDINÁTOR

doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOŘI

[101](#)

Ing. Hana Kotoučová, Ph.D.

[105](#)

doc. Ing. Miloslav Lhotka, Ph.D.

[106](#)

Ing. Jan Šerák, Ph.D.

[107](#)

Ing. Tereza Unger Uhlířová, Ph.D.

[108](#)

Ing. Eva Bedrnová

[110](#)

doc. Ing. Jan Budka, Ph.D., Ing. Michal Himl, Ph.D.

[111](#)

Ing. Iva Paterová, Ph.D.

[112](#)

Ing. Drahomír Čadek, Ph.D.

[126](#)

prof. Ing. Jindřich Leitner, DrSc.

[143](#)

Ing. Petr Čech, Ph.D.

[148](#)

Ing. Vítězslav Knotek, Ph.D.

Ústav anorganické chemie

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Hana Kotoučová, Ph.D.

SEZNAM SEKCI

1. [B1 - Ústav anorganické chemie](#)
2. [B2 - Ústav anorganické chemie](#)
3. [M1 - Ústav anorganické chemie](#)
4. [M2 - Ústav anorganické chemie](#)

B1 - Ústav anorganické chemie

MÍSTO: LABORATOŘ D1

KOMISE

Ing. Vít Jakeš, Ph.D. (předseda)

Ing. Hana Kotoučová, Ph.D.

Ing. Jiří Šturala, Ph.D.

Ing. Štěpán Huber

PROGRAM

09:30 **zahájení**

09:30 [Martin Brom](#) (B3, Ing. Jan Holub, Ph.D.)

Predikování vlastností koordinačních sloučenin s fotovolnitelnými ligandy, funkcionizovanými cytostatiky

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

Testing the possibility of organometallic coordination complexes in preparation of bifunctional ligands modifying protein-protein interaction

10:00 [Kateřina Hiršová](#) (B3, Ing. Irena Hoskovcová, CSc.)

Příprava ruthenium-sacharidových nanočástic jako selektivních inhibitorů lidského galektinu-1.

10:15 [Adéla Kubištová](#) (B2, doc. Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.)

Kompozitní materiály na bázi reaktivního oxidu hořečnatého s aditivami bohatými na uhlík

10:30 [Pavčina Malečková](#) (B3, Ing. Martin Pižl, Ph.D.)

Syntéza kobaltnatých komplexů odvozených od pyridoxalu a jeho 5C-substituentů

10:45 [Julie Slámová](#) (B4, doc. Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.)

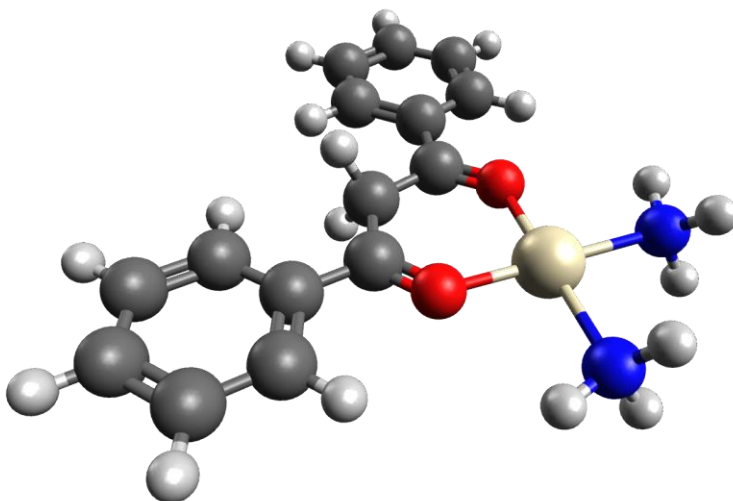
*Příprava a studium vlastností kodopovaných kompozitních materiálů s přídavkem
nanoaditiv na bázi uhlíku*

Predikování vlastností koordinačních sloučenin s fotouvolnitelnými ligandy, funkcionalizovanými cytostatiky

Martin Brom (B3)

Školitel: Ing. Jan Holub, Ph.D.

Pro doručení cytostatik při léčbě nádorových onemocnění je možné využít látky, které se do organismu vpravují v neaktivní formě a následně jsou aktivovány v místě potřeby. Pro tyto účely lze využít komplexy se schopností uvolnit ligand při excitaci světlem. Je ovšem nutné zvolit cytostatikum, či vhodný derivát cytostatika, schopné komplexace ke konkrétní částici, a také případný druhý ligand se schopností pohltit foton, a udržet a předat excitovaný elektron, který iniciuje uvolnění cytostatika. Jedná se tedy o velké množství faktorů, které je prakticky nemožné odhadnout. S využitím výpočetních metod (DFT) je však možné chování takovýchto systémů predikovat. Následně budou komplexy s nejvhodnějšími predikovanými vlastnostmi syntetizovány, jejich vlastnosti poté experimentálně ověřeny a klinicky testovány.

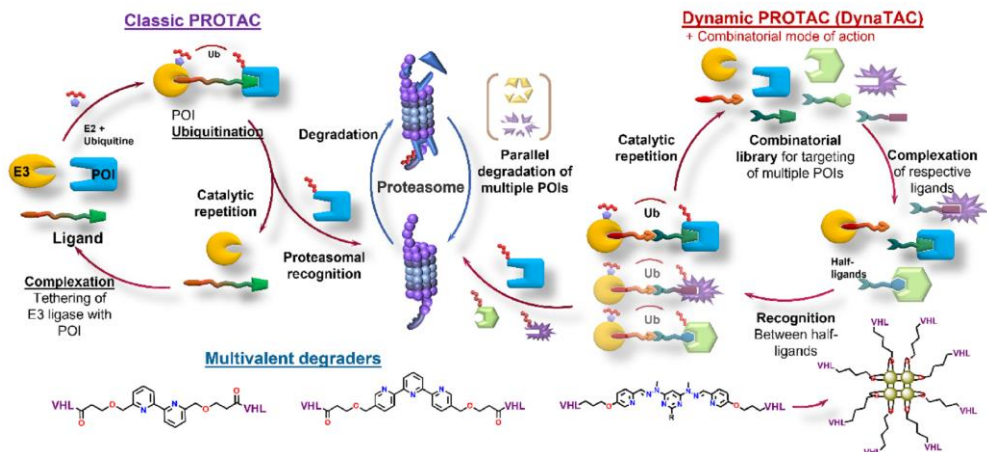


Testing the possibility of organometallic coordination complexes in preparation of bifunctional ligands modifying protein-protein interaction

Danylo Dementiev (B2)

Školitel: Ing. Jan Holub, Ph.D.

Multivalency, a key concept in molecular interactions, involves the simultaneous binding of a molecule to multiple sites. This principle finds innovative applications in metalloidal self-assembling coordination complexes. The synergistic coordination between metal nodes and ligands gives rise to well-defined multivalent structures, such as supramolecular grids. Moreover, the concept of multivalency extends beyond self-assembling grids, being used in emerging fields such as Proteolysis Targeting Chimeras (PROTACs). PROTACs work by simultaneously binding a target protein and E3 ubiquitin ligase to produce a ternary complex. To drive ubiquitination and degradation at low catalytic concentrations, degraders must form appropriately positioned complexes of sufficient stability, aided by intra-complex interactions. We hypothesized these molecular recognition features could be enhanced by increasing binding valency using coordination architectures as multivalent platforms. Currently we are synthesising model ligands based on pyridines, bipyridines and terpyridines, widely used ligands with a tunable affinity towards different metals providing various structures. Thus prepared motives will be finally tested in cell cultures, cooperating with Department of Biochemistry and Microbiology.



Příprava ruthenium-sacharidových nanočástic jako selektivních inhibitorů lidského galektinu-1.

Kateřina Hiršová (B3)

Školitel: Ing. Irena Hoskovcová, CSc.

Galektiny jsou intra- i extracelulární proteiny se specifickou afinitou k β -D-galaktóze a jejím glykokonjugátům. Nádorové buňky na svém povrchu a ve svém okolí zvyšují produkci některých galektinů a tím podporují růst nádoru. Příprava selektivních inhibitorů galektinů je tudíž aktuálním tématem medicínské chemie. Bylo popsáno celkem čtrnáct lidských galektinů, které mají rozmanitou funkci v organismu – od vývoje buňky přes regulaci buněčné aktivity až po apoptózu. Protože galektiny mají evolučně konzervované vazebné místo, je velmi obtížné připravit selektivní inhibitor vybraného galektinu, který má protumorní efekt. Tato práce navazuje na nedávný objev naší skupiny: unikátní 3D struktura rutheniových polosendvičových komplexů navázaných na sacharidový skelet cílí na drobné rozdíly ve vazebných místech galektinů a připravené organorutheniové komplexy jsou selektivní inhibitory galektinu-1. V tomto projektu byl pomocí jedenáctikrokové syntézy připraven derivatizovaný organorutheniový komplex s azido skupinou, vhodný pro navázání na multivalentní nosič pomocí azid-alkynové cykloadice za vzniku nanočástic s multivalentní prezentací selektivního inhibitoru galektinu-1.

Kompozitní materiály na bázi reaktivního oxidu hořečnatého s aditivy bohatými na uhlík

Adéla Kubištová (B2)

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

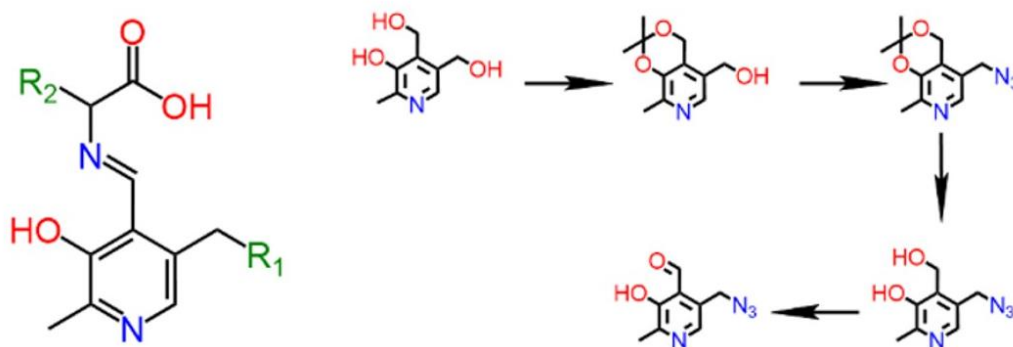
Kompozitní materiály na bázi reaktivního oxidu hořečnatého se ukazují jako slibná alternativa k široce využívanému Portlandskému cementu. Ve srovnání s Portlandským cementem mají lepší mechanické vlastnosti a s jejich procesem výroby je spojen nižší objem emisí CO₂. Tématem této práce byla příprava a charakterizace tohoto materiálu, konkrétně jeho fáze 5Mg(OH)₂·MgCl₂·8H₂O (MOC-518). Jako aditiva byly použity materiály bohaté na uhlík, a to uhlíkové sférické nanočástice (CNS) a fluorovaný grafen (FG) s cílem zlepšit vlastnosti daného kompozitního materiálu, pevnost v tlaku, ohybu a odolnost vůči vodě. Taktéž byly připraveny referenční vzorky MOC bez obsahu aditiv. U všech vzorků bylo analyzováno jejich chemické a fázové složení pomocí rentgenové fluorescenční (XRF) a rentgenové difrakční analýzy (XRD). Dále byla studována mikrostruktura pomocí skenovací elektronové mikroskopie (SEM) a zastoupení jednotlivých prvků pomocí energiově disperzní spektroskopie (EDS). Také byly analyzovány jejich mechanické parametry. U MOC s obsahem CNS 1.0 hm% a 3.0 hm% došlo ke zlepšení mechanických parametrů. Zlepšení mechanických vlastností se nejvíce projevilo u vzorku MOC s 3.0 hm% CNS, kde pevnost v tlaku stoupla zhruba o 5,5 % a v ohybu o 4,3 % ve srovnání s referencí.

Syntéza kobaltnatých komplexů odvozených od pyridoxalu a jeho 5C-substituentů

Pavλίna Malečková (B3)

Školitel: Ing. Martin Pižl, Ph.D.

Pyridoxal (PL) je jednou ze tří forem vitamínu B6, jehož aktivní formou je pyridoxal-5'-fosfát (PLP), který je zároveň koenzymem při metabolismu aminokyselin. PLP na sebe reverzibilně váže aminokyselinu, čímž vzniká Schiffova báze (imin). Obecně Schiffova báze vzniká reakcí aminů se sloučeninou obsahující karbonylovou skupinu. Tato práce se zabývá syntézou kobaltnatých komplexů odvozených od pyridoxalu a jeho derivátů připravených substitucí OH skupiny v poloze 5 - fosfátovou (PLP) a azidovou (PLN3) skupinou (R1 na Obr.1A). Z těchto variant substituovaného pyridoxalu lze následně připravit Schiffovy báze reakcí s aminokyselinami (R2 na Obr.1A), v této práci konkrétně s alaninem (Ala) a tyrosinem (Tyr). Z těchto ligandů a vhodné kobaltnaté soli budou poté připraveny příslušné komplexy. Prozatím jsem úspěšně syntetizovala většinu ligandů a modifikovaný pyridoxal PLN3 (Obr. 1B). Momentálně pracuji na syntéze zbývajících ligandů a kobaltnatých komplexů.



Obrázek 1 A (vlevo) Obecná struktura ligandu; B (vpravo) Schéma postupné syntézy PLN₃

Příprava a studium vlastností kodopovaných kompozitních materiálů s přidavkem nanoaditiv na bázi uhlíku

Julie Slámová (B4)

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

Cílem této práce byla příprava a analýza kompozitů na bázi reaktivního oxidu hořečnatého. Byly studovány změny vlastností Sorelova cementu po přidavku 1D a 2D nanomateriálů do směsi. Pro přípravu byl použit vysoce reaktivní oxid hořečnatý, chlorid hořečnatý, voda, nanoaditiva na bázi uhlíku (grafen, vícevrstvé uhlíkové nanotrubic), písek jako plnivo a kyselina třísllová jako surfaktant. Bylo připraveno pět sad vzorků, jedna referenční, jedna s kyselinou třísllovou a tři s obsahem grafenu, vícevrstevných uhlíkových nanotrubic a kyseliny třísllové jednotlivě i jejich kombinací. Po 28 dnech zrání byly výsledné kompozity podrobeny těmto analýzám: rentgenová difrakční analýza, rastrovací a transmisní elektronová mikroskopie, energiově disperzní spektrometrie a optická mikroskopie. Dále byly změřeny fyzikální a mechanické vlastnosti. K největšímu nárůstu hodnot pevnosti v tlaku došlo u vzorku s obsahem 1D i 2D nanomateriálů a kyseliny třísllové současně, konkrétně o 30,2 %. Dále všechny připravené kompozity vykazaly zvýšení koeficientu měknutí, což dokazuje jejich zvýšenou voděodolnost.

B2 - Ústav anorganické chemie

MÍSTO: LABORATOŘ D2

KOMISE

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

Ing. Blanka Kopecká, Ph.D.

Ing. Vilém Bartůněk, Ph.D.

Ing. Tomáš Hlásek, Ph.D.

PROGRAM

09:30 **zahájení**

09:30 [Karolína Česneková](#) (B3, Ing. Jan Holub, Ph.D.)

Příprava rutheniových komplexů, jejich imobilizace na C₃N₄ nanočásticích a studium jejich katalytické aktivity

09:45 [Oskar Chmel](#) (B4, doc. Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.)

Integrace umělých pinningových center do GdBCO/Ag supravodičů připravených novou SDMG metodou

10:00 [Rebeka Morvaiová](#) (B3, Ing. Jan Holub, Ph.D.)

Funkcionalizácia supramolekulárnych gridov a ich využitie v elektrochémií

10:15 [Jiří Prikner](#) (B3, doc. Ing. Kateřina Rubešová, Ph.D.)

Rekrystalizace Y:HfO₂ metodou Optical Floating Zone

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

Chování systému flavin-hexafluoridofosfátový anion-skandité ionty

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

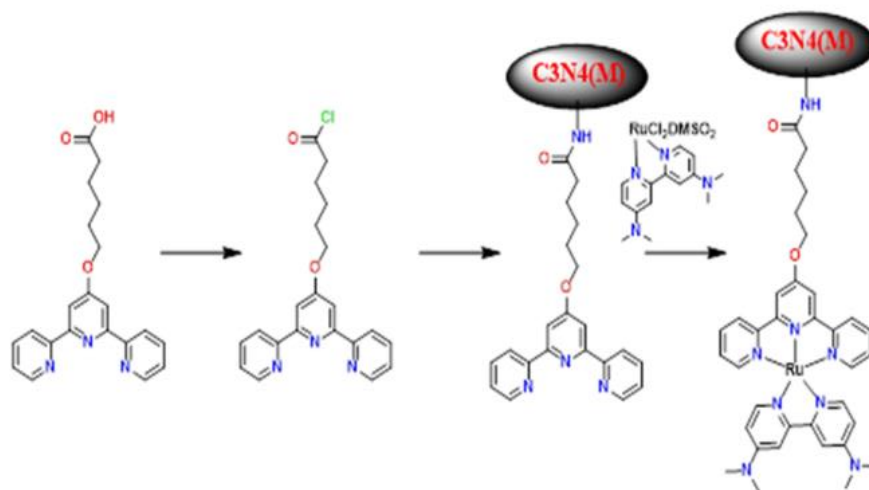
Interkalátory DNA na bázi α -diiminových komplexů ruthenia: Elektrochemické a spektroeletrochemické vlastnosti

Příprava rutheniových komplexů, jejich imobilizace na C_3N_4 nanočásticích a studium jejich katalytické aktivity

Karolína Česneková (B3)

Školitel: Ing. Jan Holub, Ph.D.

Příprava rutheniových komplexů, jejich imobilizace na C_3N_4 nanočásticích a studium jejich katalytické aktivity. Karolína Česneková, Alice Kulagová, Jan Holub. Jednou z největších výzev současné vědy je boj proti oteplování planety výzkumem zelených zdrojů energie, nahrazením fosilních paliv a snimi spojeným CO_2 . Jednou z velmi perspektivních náhrad se jeví vodík. Bylo prokázáno, že určité aromatické komplexy přechodných kovů, jsou schopny elektrochemické oxidace molekul amoniaku a vody, za uvolňování protonů, které jsou posléze redukovány na plynný vodík. Tento vodík lze využít jako efektivní zdroj alternativní energie – tzv. Green hydrogen. V mojí práci, jsem se zabývala přípravou různě modifikovaných terpyridinových komplexů Rutheniaa jejich ukotvením na C_3N_4 nanočástice. Následně, jsem připravené látky a nanočástice ocharakterizovala pomocí cyklické voltametrie. Pro ověření katalytické aktivity jsem testovala vzorky jak v čisté vodě, tak i s přidávkou amoniaku. Předmětem dalšího zkoumání práce, bude, kromě dalších syntéz, detailnější studium jejich katalytické aktivity a případně i zapojení fotokatalýzy.



Integrace umělých pinningových center do GdBCO/Ag supravodičů připravených novou SDMG metodou

Oskar Chmel (B4)

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

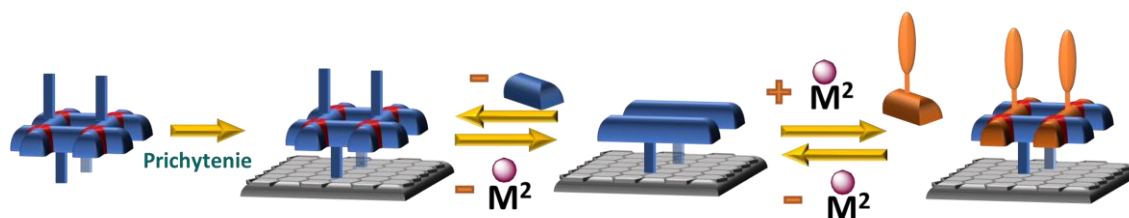
Vysoká robustnost SDMG růstu v porovnání s konvenčním umožňuje integraci většího množství pinningu, který je klíčový pro aplikace supravodičů v silných magnetických polích. Na základě literární rešerše byly vybrány potenciálně vhodné pinningové fáze pro GdBCO/Ag systém a připraveny reakcí v pevné fázi. Syntetizovaná pinningová fáze byla přidána do GdBCO/Ag prekursoru v různých hmotnostních koncentracích, které byly podrobeny SDMG růstu a porovnány s referencí. Dle analýzy laserovou difrakcí byla připravena dvoufrakční pinningová fáze o velikosti částic 10-100 nm a 3-50 μm . S touto fází byly úspěšně připraveny supravodiče s vyšší hmotnostní koncentrací než v referenci. Vzorky vykazují vhodné růstové parametry pro integraci do průmyslové výroby supravodičů, kde naleznou uplatnění především v oblastech, kde jsou kladeny vysoké nároky na jejich vlastnosti, například v magnetických rezonancích nebo v undulátorech.

Funkcionalizácia supramolekulárnych gridov a ich využitie v elektrochémii

Rebeka Morvaiová (B3)

Školiteľ: Ing. Jan Holub, Ph.D.

Supramolekulárne gridy sú organokovové zlúčeniny tvorené štyrmi kationmi kovov s tetraédrickou alebo oktaédrickou koordinačnou geometriou a na ne vhodnými nakoordinovanými ligandami. Ako už názov „grid“ napovedá, výsledná zlúčenina sa vďaka samoskladbe skladá do tvaru pravoúhlej mriežky. Supramolekulárne gridy majú potenciálne široké využitie, ako vo forme jednotlivých molekúl, tak aj oligomérov, vďaka možnosti funkcionálizácie ich ligandov. Vhodne zvoleným dizajnom organických ligandov s odlišnými funkčnými skupinami na ich koncoch potom budeme schopní nielen kontrolovať a fixovať pozíciu kovových iónov, ale aj kontrolovať ďalšie chemicko-fyzikálne parametre, medzi ktoré patrí aj ich využitie v cyklickej voltametrii a elektrochémii všeobecne. Je známe, že grid funkcionalizovaný tiofénom na elektróde oxidatívne polymerizuje a vytvára tenkú vrstvu, vďaka čomu je vhodný na elektrochemické aplikácie. V súčasnosti mám pripravené gridy s ligandami funkcionalizovanými ako tiofénom, tak ferocénom a pyrénom, na ktorých prevádzam elektrochemické merania, najmä v oblasti cyklickej voltametrie. Jedným z mojich cieľov je aj dosiahnutie zámieny ligandov a využitie tak novo pripravených gridov v elektrokatalýze.



Rekrystalizace Y:HfO₂ metodou Optical Floating Zone

Jiří Prikner (B3)

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

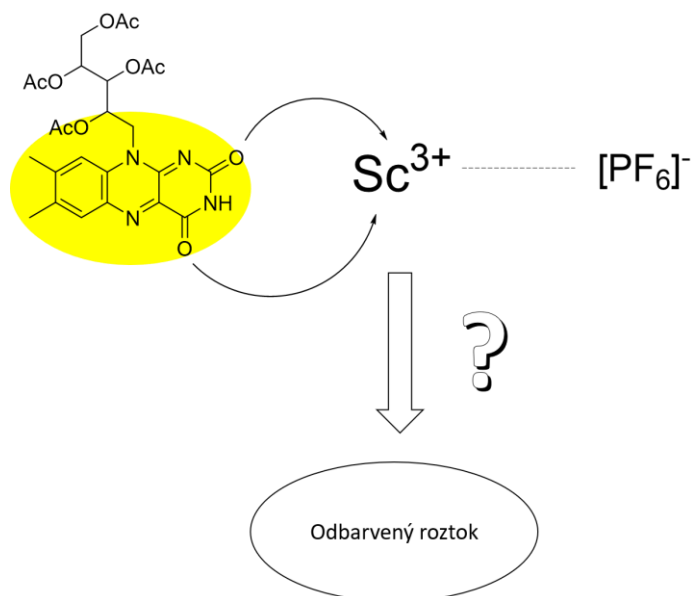
Hafnium, jakožto prvek s vysokým efektivním protonovým číslem, je vhodný pro záchyt a následnou detekci vysokoenergetického záření. HfO₂ nebo směsné hafnáty jsou vhodným materiálem pro tyto aplikace z důvodu radiační odolnosti a vysoké materiálové hustoty. Oxid hafničitý má monoklinickou krystalovou strukturu, ovšem po dopaci yttriem dochází ke stabilizaci kubické struktury. Z důvodu vysokého bodu tání je příprava monokrystalů HfO₂ možná pouze tzv. bezkelímkovými metodami, např. přetavením v optické peci metodou OFZ (Optical Floating Zone). V této metodě se nejdříve připravují keramické preformy, které se následně zpracují pomocí OFZ. V této práci je prezentována příprava yttriem dopovaného HfO₂ v koncentracích od 11 % do 20 %, navíc dopovaného ionty Ce³⁺, které mají rychlý dosvit luminiscence ve VIS. Tyto preformy byly připraveny pomocí reakcí v pevné fázi několika násobným žíháním, kde byla pomocí XRD sledována krystalová struktura, mikrostruktura pomocí SEM a měřena radioluminiscenční spektra. Následně byly preformy zpracovány přetavením na monokrystaly pomocí metody OFZ. Monokrystaly byly podrobeny analýze pomocí XRD. Ramanově spektroskopii a byla změřena absorpční a radioluminiscenční spektra.

Chování systému flavin-hexafluoridofosfátový anion-skandité ionty

Václav Špička (B3)

Školitel: Ing. Hana Kotoučová, Ph.D.

Nečekané chování systému flavin-hexafluoridofosfátový anion-skandité ionty Pro molekuly flavinů je charakteristická přítomnost alloxazinového nebo isoalloxazinového skeletu. Tento konjugovaný elektronový systém dává flavinům nejen charakteristické žluté zbarvení, ale rovněž zprostředkovává přenos elektronů či malých molekul jako je např. kyslík. Není tedy divu, že jsou flaviny součástí řady enzymů, kde hrají důležitou roli prostetické skupiny. Jejich redoxní aktivita byla inspirací pro derivatizaci a následné testování jako redoxních organokatalyzátorů. Je známo, že v organismech dochází k interakcím mezi kovy a organickými molekulami, a isoalloxaziny tak mohou vystupovat při interakci s přechodnými kovy jako ligandy. Zajímavá je interakce těchto látek se skanditými ionty, které mají významnou afinitu k tvrdým nukleofilům. Interakci skanditých iontů a isoalloxazinů lze sledovat prostřednictvím UV/VIS spektrofotometrie. V přítomnosti hexafluoridofosforečnanového aniontu a skanditých kationtů se původně typicky žlutý roztok isoalloxazinu odbarví a ve spektru pozorujeme vznik nového absorpčního pásu. To nás vede k domněnce, že tyto přítomné látky mezi sebou navzájem interagují a vznikající adukt má odlišné spektrofotometrické vlastnosti.

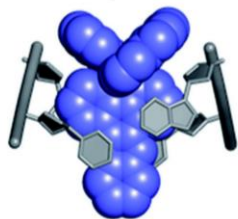


Interkalátory DNA na bázi α -diiminových komplexů ruthenia: Elektrochemické a spektroelektrochemické vlastnosti

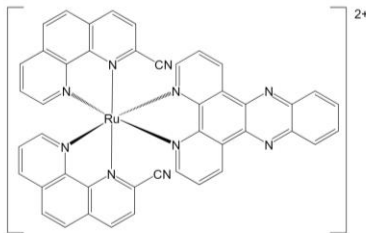
Anna Mašková (B3)

Školitel: Ing. Martin Pižl, Ph.D.

Koordinační sloučeniny s dlouhotrvajícím excitovaným stavem jsou zajímavé pro své foto-oxidační účinky. Často studovanými komplexy jsou ty, které obsahují α -diiminové ligandy jako jsou bpy (2,2'-bipyridin), phen (1,10-fenantrolin) a také dppz ligand (dipyridofenazin), které se všechny mohou interkalovat do DNA (Obr. č. 1). Ru(II) komplexy v kombinaci s těmito ligandy se převážně studují pro jejich vhodné foto-fyzikální a elektrochemické vlastnosti, které v kombinaci s DNA interkalací poskytují látky pro studium a medicínální cílení DNA. V této práci jsem se zaměřila na komplexy Ru(II) obsahující rozdílné α -diiminové ligandy - phen-CN (2-kyano-1,10-fenantrolin), dicnq (6,7-dikyanodipyridoquinoxalin), dppz (dipyridofenazin) a dppz-CN (11-kyanodipyridofenazin). Ligandy dppz, dppz-CN a dicnq jsou využívány díky jejich schopnosti vázat se na sekvence DNA (Obr. č. 2) a phen-CN pro ovlivnění oxidační síly excitovaného stavu. Připravené ligandy byly charakterizovány pomocí ^1H NMR, UV-Vis a FTIR. Nyní budu syntetizovat heteroleptické komplexy $[\text{Ru}(\text{phen-CN})_2(\text{NN})]^{2+}$, kde NN je dppz, dppz-CN nebo dicnq. Elektrochemické a spektroelektrochemické vlastnosti této skupiny komplexů budou ukázány na $[\text{Ru}(\text{phen-CN})_2(\text{dppz})]^{2+}$ (Obr. č. 2).



Obr. č. 1: Interkalace komplexu $[\text{Ru}(\text{phen})_2(\text{dppz})]^{2+}$ do sekvence DNA [1]



Obr. č. 2: Struktura komplexu $[\text{Ru}(\text{phen-CN})_2(\text{dppz})]^{2+}$

1. Cardin, C.J., J.M. Kelly, and S.J. Quinn, *Photochemically active DNA-intercalating ruthenium and related complexes – insights by combining crystallography and transient spectroscopy*. Chemical Science, 2017. 8(7): p. 4705-4723.

M1 - Ústav anorganické chemie

MÍSTO: MÍSTNOST A211

KOMISE

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

Ing. Irena Hoskovcová, CSc.

Ing. Vlastimil Mazánek, Ph.D.

Ing. Tomáš Blažek

PROGRAM

09:30 **zahájení**

09:30 [Bc. Oldřich Cicvárek](#) (M2, Ing. Štěpán Huber, Ph.D.)

Příprava a charakterizace vybraných solí kovů vzácných zemin a jejich oxidů.

09:45 [Bc. Ivana Faltysová](#) (M2, doc. Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.)

Využití odpadních anorganických materiálů v kompozitech na bázi reaktivního oxidu hořečnatého pro udržitelnou budoucnost

10:00 [Adam Fiedler](#) (M1, doc. Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.)

Optimalizace přípravy REBCO targetů infiltrační metodou

10:15 [Bc. Petr Kupka](#) (M1, Ing. Jan Luxa, Ph.D.)

Elektrochemická exfoliace WSe_2 a separace na základě tloušťky exfoliovaných vrstev

10:30 [Bc. Karin Paurová](#) (M2, doc. Ing. Kateřina Rubešová, Ph.D.)

Studium zachytu nábojů v telluričitých sklech

10:45 [Bc. Kateřina Sinevičová](#) (M2, Ing. Štěpán Huber, Ph.D.)

ZnO tetrapody a jejich aplikace

Příprava a charakterizace vybraných solí kovů vzácných zemin a jejich oxidů.

Bc. Oldřich Cicvárek (M2)

Školitel: Ing. Štěpán Huber, Ph.D.

Mimo enviromentálních dopadů je oxid uhličitý nežádoucí složkou v některých výrobních procesech, kde kyslíkaté sloučeniny mohou být katalytickými jedy, příkladem takového procesu je výroba amoniaku. Vlastnosti těchto katalyzátorů lze ovlivnit přidáním oxidů kovů vzácných zemin. Ty svou přítomností zlepšují termální stabilitu katalyzátoru nebo zamezují deponování uhlíku. Kromě toho mohou ovlivňovat počet aktivních míst na katalyzátoru a také konverzi obou plynů. Tyto oxidy lze mimo jiné připravit rozkladem organických solí kovů vzácných zemin. Práce je zaměřena na přípravu a charakterizaci vybraných organických solí kovů vzácných zemin. Látky jsou připravovány neutralizační reakcí a poté různými způsoby krystalizovány. Připravené látky jsou charakterizovány například práškovou rentgenovou difrakcí či Ramanovou spektroskopií. Sloučeniny jsou zkoumány metodou TG-MS a dále jsou studovány pevné dekompoziční produkty těchto látek z hlediska složení i morfologie pomocí skenovací elektronové mikroskopie a energiově disperzní spektroskopie.

Využití odpadních anorganických materiálů v kompozitech na bázi reaktivního oxidu hořečnatého pro udržitelnou budoucnost

Bc. Ivana Faltysová (M2)

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

Tématem této práce byla příprava a charakterizace hořečnatých pojiv na bázi reaktivního oxidu hořečnatého, která zahrnovala využití odpadního žáruvzdorného materiálu na bázi MgO-C jako alternativního plniva místo tradičního písku. Nejprve byly z výchozích surovin MgO, MgCl₂, písku a vody připraveny čisté referenční materiály obsahující čistou fázi 5 (5Mg(OH)₂·MgCl₂·8H₂O). Následně byly syntetizovány kompozitní materiály s různým obsahem dvou velikostních frakcí MgO-C (0-1mm a 1-3 mm). Všechny připravené kompozitní materiály byly analyzovány širokým spektrem analytických metod – rentgenovou fluorescenční analýzou (XRF), rentgenovou difrakční analýzou (XRD), skenovací elektronovou mikroskopií (SEM), energiově disperzní spektroskopií (EDS), optickou mikroskopií (OM) a simultánní termickou analýzou (STA). Na závěr byly testovány mechanické vlastnosti vzorků, jako je pevnost v tlaku, v ohybu a Youngův modul pružnosti. Tyto materiály by mohly být použity ve stavebním průmyslu jako ekologická náhrada portlandského cementu. Z navržených kompozitů měl nejlepší výsledky vzorek, u kterého byl písek nahrazen ze 100 % menší frakcí MgO-C (0-1 mm). Jeho pevnost v tlaku dosáhla 74,83 MPa a pevnost v ohybu 16,15 MPa.

Optimalizace přípravy REBCO targetů infiltrační metodou

Adam Fiedler (M1)

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

Pro naprašování tenkých vrstev vysokoteplotních supravodivých materiálů typu REBCO (RE = Y, Eu, Gd, ...) se používají targety a granuláty. Targety připravené infiltrační metodou jsou vhodné díky lepší mikrostruktuře a homogenitě dispergace nesupravodivých fází. Další klíčový faktor, fázové složení targetů, byl optimalizován v systému GdBCO změnami teplotních profilů a tlaku lisování v rozmezí 6–65 MPa. Ke stanovení zastoupení supravodivé fáze Gd-123 v připravených targetech bylo použito XRD a vybrané vzorky byly detailněji charakterizovány pomocí XRF, OM a SEM-EDS. Na základě provedených analýz byl nalezen optimální teplotní profil zvyšující zastoupení fáze Gd-123 a potlačující podíl nesupravodivých fází. Zásadní vliv tlaku při lisování na fázové složení připravených targetů nebyl potvrzen, avšak lisovací tlak podmiňuje množství makroskopických defektů ve struktuře. Pro optimalizaci depozičních technik je tak k dispozici rychlá metoda přípravy supravodivých targetů s vylepšenými vlastnostmi.

Elektrochemická exfoliace WSe_2 a separace na základě tloušťky exfoliovaných vrstev

Bc. Petr Kupka (M1)

Školitel: Ing. Jan Luxa, Ph.D.

Exfoliace WSe_2 v 0,1 M roztoku tetrabutylamoniumhexafluorofosfátu v dimethylformamidu. A následná separace získaných nanovloček pomocí centrifugace v dvoukrokovém hustotním gradientu sacharózy a polyethylenglykolu. Termodynamicky stálé rozhraní umožňuje jednoduché odebrání separovaných vloček a následné vymytí surfaktantu.

Studium záchyty nábojů v telluričitých sklech

Bc. Karin Paurová (M2)

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

Telluričitá skla jsou v posledních letech předmětem zájmu díky svým jedinečným optickým, fyzikálním a chemickým vlastnostem. Zároveň jsou technologicky zajímavá poměrně jednoduchou metodou přípravy – přímou syntézou při teplotách do 1000 °C. Díky těmto vlastnostem jsou telluričitá skla atraktivní pro širokou škálu aplikací v optice a elektronice. Jejich optické vlastnosti jsou značně ovlivněny nečistotami a centry záchyty nábojů. V rámci této práce byly práškové vzorky telluričitých skel o složení $\text{TeO}_2\text{:ZnO} \cong 60\text{:}40$ a $\text{TeO}_2\text{:ZnO:BaO} \cong 60\text{:}20\text{:}20$ ozářeny rentgenovým zářením. Pomocí metody elektronové paramagnetické rezonanční spektroskopie byla studována přirozeně se vyskytující i zářením indukovaná centra záchyty nábojů a byla hodnocena jejich časová a teplotní stabilita. Tato měření byla korelována s fotoluminiscencí, radioluminiscencí a termoluminiscencí. Luminiscenční vlastnosti skel byly přítomnými centry záchyty náboje zlepšeny u vzorku o složení $\text{TeO}_2\text{:ZnO} \cong 60\text{:}40$ a naopak negativně ovlivněny u vzorku o složení $\text{TeO}_2\text{:ZnO:BaO} \cong 60\text{:}20\text{:}20$. Na základě tohoto protichůdného efektu byl studován a navržen vliv oxidu barnatého ve složení na centra záchyty nábojů a jejich následnou roli v optických vlastnostech telluričitých skel.

ZnO tetrapody a jejich aplikace

Bc. Kateřina Sinevičová (M2)

Školitel: Ing. Štěpán Huber, Ph.D.

Nanostruktury tvořené oxidy kovů jsou v současnosti studovány pro své výjimečné strukturní, elektrické a piezoelektrické vlastnosti, díky nimž se mohou uplatnit v mnoha oblastech nanotechnologií. Významnými zástupci této skupiny materiálů jsou mikrostruktury a nanostruktury oxidu zinečnatého. Tetrapodický oxid zinečnatý lze z práškové podoby převést do kompaktní formy o požadovaném tvaru a porozitě, která se může libovolně pohybovat v rozmezí mezi 50 a 98 %. Tuto porézní strukturu pak lze mimo jiné využít jako obětovanou šablonu pro přípravu nanostruktur z dalších materiálů. Nanesením vrstvy kovového materiálu by potenciálně mohla vznikat porézní kovová struktura o velké ploše s uplatněním v elektrochemii a elektronice. Tato práce je zaměřena na bezproudé pokovení ZnO tetrapodických tablet o různých porozitách niklem a stříbrem a studium vlastností vzniklých struktur pomocí metod SEM a EDX.

M2 - Ústav anorganické chemie

MÍSTO: MÍSTNOST A210B

KOMISE

prof. Ing. David Sedmidubský, Ph.D. (předseda)

Ing. Jan Holub, Ph.D.

Ing. Tomáš Hartman

Ing. Tomáš Hartman, Ph.D.

Ing. Šárka Lipnická, Ph.D.

PROGRAM

09:30 **zahájení**

09:30 [Bc. Herbert Kindl](#) (M2, doc. Ing. Kateřina Rubešová, Ph.D.)

Příprava oxidových vrstev hydrotermální metodou

09:45 [Bc. Anastasiia Korzhova](#) (M2, Ing. Vilém Bartůněk, Ph.D.)

Kompozity s nanočásticemi elementárního selenu

10:00 [Bc. Jan Sklenka](#) (M2, doc. Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.)

Vliv různých podílů recyklované suroviny na růst a vlastnosti jednodoménových YBCO disků

10:15 [Bc. Vojtěch Svoboda](#) (M2, Ing. Tomáš Hartman, Ph.D.)

Chemická exfoliace CrSBr a jeho využití pro lithium-iontové baterie

10:30 [Bc. Ivana Venkrbcová](#) (M2, doc. Ing. Pavla Nekvindová, Ph.D.)

Dekoratивní tenké vrstvy na bázi chromu připravené metodou magnetronového naprašování

10:45 [Bc. Vojtěch Ševčík](#) (M2, Ing. Vít Jakeš, Ph.D.)

Scintilátory na bázi aluminátů kovů alkalických zemin

Příprava oxidových vrstev hydrotermální metodou

Bc. Herbert Kindl (M2)

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

Rychlý rozmach v oblasti elektroniky s sebou přináší velké požadavky na vývoj a zdokonalování nových elektronických součástek. Tyto požadavky jsou kladeny zejména na miniaturizaci a zvyšování jejich výkonu. Jednou z možností zlepšování vlastností materiálů je příprava kompozitů, které efektivně kombinují vlastnosti dvou či více vhodných materiálů. V mé práci se věnuji optimalizaci přípravy oxidových vrstev hydrotermálním růstem. Hydrotermální růst je poměrně nenáročný postup, který je zajímavou alternativou pro jiné metody vycházející z kapalné fáze jako je sol-gel, neboť jde o syntézu za relativně nízkých teplot. Tím se odemyká možnost použití teplotně citlivých materiálů jako součásti kompozitu. V této fázi práce byly vybrány oxidy BaTiO_3 a LiNbO_3 , které mají fyzikální vlastnosti vhodné ke kombinaci s jinými funkčními materiály. Titaničitan barnatý je hojně využívaným materiálem ve výrobě kondenzátorů pro svou vysokou permitivitu, niobát lithný vykazuje zajímavé elektro-optické vlastnosti, pro které se využívá například ve vlnových modulátorech. Cílem práce byla optimalizace růstu těchto dvou materiálů z kovových vrstev deponovaných pomocí PVD na safírové substráty. Byl sledován vliv koncentrace a složení alkalického roztoku, přítomnost pevné fáze, teploty a doby reakce.

Kompozity s nanočásticemi elementárního selenu

Bc. Anastasiia Korzhova (M2)

Školitel: Ing. Vilém Bartůněk, Ph.D.

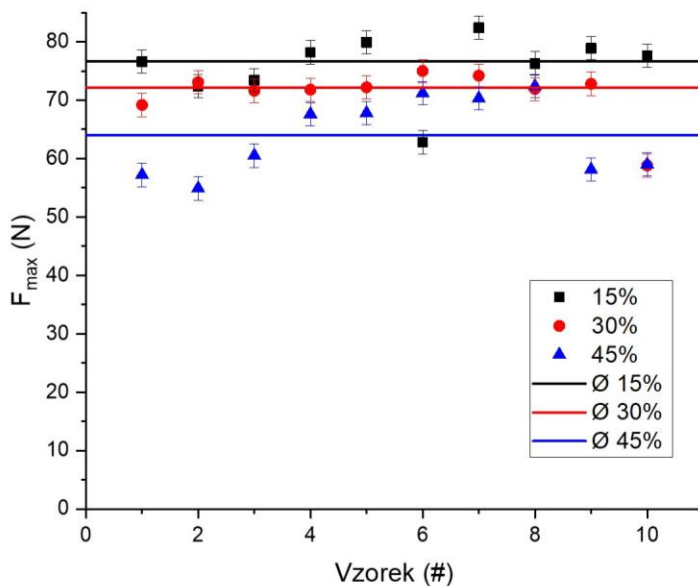
Tato práce se zabývá výzkumem antimikrobiálních vlastností nanočástic amorfního selenu. Nanočástice selenu byly připraveny redukcí pomocí kyseliny askorbové. Pro charakterizaci byly použity analytické metody, jako jsou Ramanova spektroskopie a rentgenová prášková difrakce. Antibakteriální účinky selenu byly testovány různými metodami. Následně se výzkum zaměřil na formulaci tekuté a polotuhé lékové formy.

Vliv různých podílů recyklované suroviny na růst a vlastnosti jednodoménových YBCO disků

Bc. Jan Sklenka (M2)

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

YBCO disky jsou vyráběny růstem z taveniny metodou TSMG, během růstu ale vznikají u nezanedbatelné části disků defekty. Defektní disky z průmyslové výroby byly zpracovány skrze námi vyvinutou recyklační metodu a získaná recyklovaná surovina byla následně z 15 hm. %, 30 hm. % a 45 hm. % využita při výrobě částečně recyklovaných YBCO disků. Hlavním cílem bylo zjistit, jak různý obsah recyklované složky ovlivní růst krystalů a jejich výsledné vlastnosti. Analýzou mikrostruktury krystalů bylo zjištěno, že s přibývajícím obsahem recyklované složky klesá objem narostlého krystalu a roste četnost defektů v krystalu, což pak negativně ovlivňuje vlastnosti disku. Z těchto vlastností je klíčová hlavně maximální levitační síla, u které výsledky prokázaly pouze její minimální pokles při přidání 15 % a 30 % recyklované složky. Přidání 45 % recyklované složky snížilo levitační sílu disků kvůli větší četnosti defektů již znatelně. Dat o závislosti vlastností YBCO disků na množství přidané recyklované složky bude do budoucna možné využít pro optimalizaci složení prekurzorů v závislosti na typu aplikace výrobku.



Chemická exfoliace CrSBr a jeho využití pro lithium-iontové baterie

Bc. Vojtěch Svoboda (M2)

Školitel: Ing. Tomáš Hartman, Ph.D.

CrSBr patří do rodiny vrstevnatých materiálů, které se v poslední době „znovuobjevují“. K popisu fyzikálních a chemických vlastností došlo už v 90. letech, ale do centra zájmů se materiál dostal teprve nedávno. Využití CrSBr v bateriích se odvíjí od potřeby nových materiálů pro ukládání energie, pro tzv. *energy storage*. Chemická exfoliace různými činidly umožňuje kvantitativní oddělení jednotlivých vrstev od sebe, čímž je umožněna jejich interakce a podstatně se zvýší plocha aktivního povrchu materiálu. Exfoliovaný CrSBr byl charakterizován metodami XRD, SEM a Ramanovou spektroskopií. Suspenze vytvořená z materiálu byla nanášena na měděnou fólii, vysušena a z vrstvy byly vystřiženy jednotlivé elektrody. Ty byly využity v lithium-iontových bateriích, u kterých byly charakterizované vztahy např. mezi specifickou kapacitou a počtem cyklů nebo napětím.

Dekoratívni tenké vrstvy na bázi chromu připravené metodou magnetronového naprašování

Bc. Ivana Venkrbcová (M2)

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

Práce se zabývá dekorativními tenkými vrstvami na bázi chromu připravenými metodou magnetronového naprašování pro využití v automobilovém průmyslu, zejména pro povlakování dílů z polymeru ABS (akrylonitrilbutadienstyren). Požadovaných vlastností jako je vzhled povlaků a jejich mechanická odolnost může být dosaženo optimalizací depozičních podmínek nebo pomocí příměsí (např. C, N, Si, O). Navíc je možné vrstvy kombinovat při přípravě multivrstevných struktur. V této práci jsme sledovali vliv depozičních podmínek na vlastnosti chromových tenkých vrstev deponovaných na ABS substrátu. Připravili jsme 3 série chromových tenkých vrstev metodou magnetronového naprašování s různými proměnnými parametry (pracovní tlak, elektrický výkon na terči, tloušťka vrstev). Pomocí konfokálního mikroskopu jsme studovali tloušťku vrstev, povrchovou drsnost a síť trhlin, kterou jsme následně kvantifikovali pomocí obrazové analýzy. U vybraných vzorků byla stanovena povrchová drsnost také metodou AFM. Odolnost vrstev proti abrazi jsme testovali vlastní navrženou zkouškou s využitím tribometru a brusného papíru. Pro studium barevnosti jsme použili spektrofotometricky měřené kolorimetrické parametry. Z výsledků je zřejmé, že měřené parametry jsou závislé především na pracovním tlaku při depozici.

Scintilátory na bázi aluminátů kovů alkalických zemin

Bc. Vojtěch Ševčík (M2)

Školitel: Ing. Vít Jakeš, Ph.D.

Alumináty kovů alkalických zemin jsou díky svým kubickým strukturám vhodnými kandidáty pro přípravu transparentní keramiky, která může sloužit jako hostitelská matrice pro dopanty v luminiscenční aplikacích. Podle zamýšlené dopace však materiál musí splňovat nejen náročné požadavky na fázovou čistotu a materiálovou hustotu, ale zároveň je i nutné zhodnotit, má-li pro daný dopant oxidová matrice vhodnou symetrii krystalových poloh, nebo – v případě scintilačních aplikací – například vhodnou šířku zakázaného pásu. Kubické struktury vlastní aluminátům kovů alkalických zemin jsou právě při takových použitích výhodou, protože jejich izotropie přípravu transparentní keramiky usnadňuje. Ta se připravuje sofistikovanějšími metodami slinování, například SPS. Tato práce se zabývá přípravou aluminátů kovů alkalických zemin – $\text{Sr}_3\text{Al}_2\text{O}_6$ a $\text{Ba}_3\text{Al}_2\text{O}_6$ – s konečným cílem zpracovat je do formy transparentní keramiky. V práci byly porovnány metody přípravy prekurzorových prášků jednotlivých směsných oxidů – reakce v pevné fázi, reakční odpařování a sol-gel – a jejich vliv na fázové složení připravených prekurzorů. Dále pak byla zkoumána možnost využití metody SPS pro zpracování takto připravených prášků do formy denzní keramiky.

Ústav anorganické technologie

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

doc. Ing. Miloslav Lhotka, Ph.D.

SEZNAM SEKČÍ

1. [Ústav anorganická technologie I](#)
2. [Ústav anorganické technologie II](#)

Ústav anorganická technologie I

MÍSTO: MÍSTNOST A 25A

KOMISE

Prof. Dr. Ing. Josef Krýsa (předseda)

Ing. Ivona Sedlářová, Ph.D.

Doc. Dr. Ing. Vlastimil Fíla

Doc. Ing. Miloslav Lhotka, Ph.D.

Ing. Martin Prokop, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Bc. Karel Pecha](#) (M2, doc. Ing. Martin Zlámal, Ph.D.)

Separace vybraných mikropolutantů z vody s různou solností pomocí nanofiltrace

09:15 [Uliana Ovchinnikova](#) (B3, Ing. Jaromír Hnát, Ph.D.)

Syntéza a charakterizace bifunkčního katalyzátoru pro reverzibilní palivový článěk

09:30 [Bc. Daniela Mauci](#) (M2, doc. Ing. Miloslav Lhotka, Ph.D.)

Zjištění příčin pulsace rozkladného reaktoru při výrobě dusičnanu vápenatého

09:45 [Jan Heřmánek](#) (B3, doc. Dr. Ing. Vlastimil Fíla)

Membrány na bázi polyimidů pro separaci směsi CO₂/CH₄.

10:00 [Anežka Karafiátová](#) (B3, Ing. Michal Baudys, Ph.D.)

Fotokatalytická oxidace acetaldehydu na nanostrukturovaných vrstvách TiO₂

10:15 [Bc. Jakub Štěpánek](#) (M1, Ing. Šárka Paušová, Ph.D.)

Příprava tenkých vrstev směsných oxidů železa a mědi pro potenciální fotoelektrochemické využití

10:30 [Bc. Jana Volák](#) (M1, Ing. Šárka Paušová, Ph.D.)

Příprava fotokatalyticky aktivních oxyhalogenidů bismutu pro využití při čištění vody

Separace vybraných mikropolutantů z vody s různou solností pomocí nanofiltrace

Bc. Karel Pecha (M2)

Školitel: doc. Ing. Martin Zlámal, Ph.D.

Mikropolutanty, dostávající se do životního prostředí nejčastěji lidskou činností, mohou mít nežádoucí vliv na živé organismy i ve velmi malých koncentracích. Cílem této práce bylo zjistit vliv obsahu anorganických solí v roztoku na účinnost nanofiltrační separace mikropolutantů na membránovém modulu s dutými vlákny MP025 dNF40. Pro experimentální separace byly vybrány 4 mikropolutanty: sladidla Sacharin a Acesulfam-K, herbicid Glyfosát a léčivo Ibuprofen o koncentracích $150 \mu\text{g l}^{-1}$. Pro zvýšení solnosti roztoků se použil síran, dusičnan a chlorid sodný. Roztoky určené k separačním experimentům obsahovaly jednotlivé mikropolutanty nebo jejich směs. Roztoky mikropolutantů byly připraveny jak v čisté destilované vodě, tak s obsahem jednotlivých anorganických solí či s jejich kombinací. Průtok permeátu byl při transmembránovém tlaku 4,5 bar přibližně $40 \text{ l m}^{-2} \text{ h}^{-1}$. Účinnost separace mikropolutantů závisí na více parametrech. Obecně lze tvrdit, že účinnost separace samotných mikropolutantů byla cca 95 % a klesá s rostoucí solností roztoku. Zvýšení teploty má negativní vliv na účinnost separace především Acesulfamu-K a Glyfosátu. Nanofiltrace se jeví jako účinná metoda separace mikropolutantů, je však nezbytné zvolit vhodný způsob následného zpracování retentátu.

Syntéza a charakterizace bifunkčního katalyzátoru pro reverzibilní palivový článek

Uliana Ovchinnikova (B3)

Školitel: Ing. Jaromír Hnát, Ph.D.

Vodík představuje dostupný způsob snížení produkce CO₂ a dosažení klimatických cílů v Evropě i ve světě. Dvě základní technologie spojené s vodíkem nezatíženým produkcí CO₂ jsou: i) elektrolýza vody, která umožňuje produkci vodíku z vody s využitím obnovitelných zdrojů energie a ii) palivové články, které využívají vodík k produkci elektrické energie. Reversibilní alkalický palivový článek je zařízení kombinující tyto dva procesy, čímž přináší řadu výhod, zahrnujících snížení nároků na prostor a zjednodušení konstrukce sdílením části podpůrných zařízení. Kombinované zařízení však musí využívat bifunkční katalyzátory, které musí dle zvoleného pracovního režimu katalyzovat rozdílné reakce. Tato práce je zaměřena na přípravu a charakterizaci bifunkčních katalyzátorů na bázi spinelových oxidů Ni a Co, které budou katalyticky aktivní pro reakce redukce a vývoje kyslíku. Všechny katalyzátory byly připravené metodou srážení. Morfologie a složení katalyzátorů byly studovány pomocí metod SEM-EDS, XRF a XRD. Elektrochemické vlastnosti byly stanoveny pomocí lineární voltametrie na rotační diskové elektrodě a elektrochemické impedanční spektroskopie v 0,1 M KOH při 30 °C. Výsledky ukazují, že přidavek Ni do katalyzátorů zlepšuje katalytickou aktivitu pro reakce redukce a vývoje kyslíku.

Zjištění příčin pulsace rozkladného reaktoru při výrobě dusičnanu vápenatého

Bc. Daniela Mauci (M2)

Školitel: doc. Ing. Miloslav Lhotka, Ph.D.

Dusičnan vápenatý je bezbarvá krystalická látka dobře rozpustná ve vodě, běžně se vyskytující ve formě tetrahydrátu, která je využívána především jako hnojivo. Jeho výroba spočívá v reakci kusového vápence s kyselinou dusičnou. V našem případě se jako reaktor využívá oválná nádoba s kónickým dnem o objemu cca 11 m³, do jejíž spodní části je přiváděna kyselina dusičná o koncentraci cca. 60 hm. %, zatímco do její vrchní části je kontinuálně přidáván kusový vápenec. Produktem této neutralizační reakce je vodný roztok dusičnanu vápenatého, který obsahuje přibližně 4 hm. % nezreagované kyseliny dusičné, a dále plynné produkty, oxid uhličitý a oxidy dusíku. Při zvýšení rychlosti čerpání kyseliny dusičné do reaktoru, a tedy zvýšení produkce výroby, dochází k pulsaci reaktoru. Ta se projevuje nárazovým výronem plynů z reaktoru v pravidelných intervalech. Tento jev způsobuje zahlcení odtahového ventilátoru a nekontrolovaný únik vznikajících plynů do okolí. Laboratorní experimenty ukázaly, že příčinou pulsace je vytvoření málo propustné vápencové vrstvy, což vede k akumulaci plynu a následnému vzniku pulzu. Na základě tohoto zjištění bylo navrženo využití jednoduchých vestaveb do reaktoru, které usnadňují odvod plynu z reakční zóny.

Membrány na bázi polyimidů pro separaci směsi CO_2/CH_4 .

Jan Heřmánek (B3)

Školitel: doc. Dr. Ing. Vlastimil Fíla

Standardní metody separace plynů jsou obecně energeticky a také ekologicky náročné procesy, tudíž se v současné době hledají jejich možné alternativy. Jednou z možností je použití membránové separace, která je šetrná k životnímu prostředí s ohledem na nižší spotřebu energie a zanedbatelnou spotřebu chemikálií. Tato technologie nachází využití například při zpracování bioplynu na biometan a odstraňování CO_2 ze zemního plynu. Jednou zkoumanou skupinou materiálů pro výrobu membrán jsou polyimidy, kvůli jejich dobrým separačním vlastnostem (tj. selektivita a permeabilita). Vlastnosti samotných polyimidů však dosud nedosahují takových parametrů, aby mohly plně nahradit standardní technologie. Z tohoto důvodu se polyimidy používají jako součást membrán se smíšenou maticí (MMM). Nově se také zkoumá vliv tepelné úpravy na separační vlastnosti membrán, přičemž dosavadní výsledky vypadají slibně. Tato práce se zaměřuje na polymery 6FDA-DAM a 6FDA-BisP. Membrány z těchto polymerů byly připraveny metodou lití 0,7-4 % roztoků polymeru v CHCl_3 . Charakterizace membrán byla provedena pomocí metod FTIR, TGA a permeačních měření dvousložkové směsi CO_2/CH_4 v poměrech 3:1, 1:1 a 1:3 a o tlacích 2, 4, 6 a 8 bar.

Fotokatalytická oxidace acetaldehydu na nanostrukturovaných vrstvách TiO₂

Anežka Karafiátová (B3)

Školitel: Ing. Michal Baudys, Ph.D.

Práce se zabývá charakterizací fotokatalytických vlastností nanostrukturovaných TiO₂ vrstev při odbourávání těkavých organických látek (VOC) ze vzduchu. Byl zkoumán vliv tloušťky vrstvy, průtoku testovacího plynu a intenzity UV záření na konverzi modelového polutantu acetaldehydu. Experimenty byly prováděny v průtočném fotoreaktoru dle standardu ISO 22197-2 a koncentrace acetaldehydu na výstupu byla měřena plynovým chromatografem. Byly zkoumány nanočásticové a nanotrubicové vrstvy TiO₂ (TiO₂ NT), přičemž TiO₂ NT vrstvy se jeví jako vhodnější pro další aplikace z důvodu lepší mechanické odolnosti. Bylo zjištěno, že konverze acetaldehydu se zvyšuje s rostoucí tloušťkou TiO₂ NT vrstvy až do 4 μm (60 %). S dalším nárůstem tloušťky nedochází ke zvyšování konverze. Při zkoumání vlivu průtoku testovacího plynu rychlost odbourávání postupně narůstá (0,25 μmol cm⁻² h⁻¹) až do průtoku 5 l min⁻¹, s dalším zvýšením průtoku se rychlost odbourávání acetaldehydu nemění.

Příprava tenkých vrstev směsných oxidů železa a mědi pro potenciální fotoelektrochemické využití

Bc Jakub Štěpánek (M1)

Školitel: Ing. Šárka Paušová, Ph.D.

Vodík produkovaný pomocí světlem podpořené elektrolýzy vody se jeví atraktivním médiem pro uchování energie. Vývoj fotokatod s vysokými fotoproudy je proto zásadní pro konstrukci efektivních dvou-elektrodoových fotoelektrochemických cel. V tomto ohledu spinel CuFe_2O_4 a delafossit CuFeO_2 představují potenciálně účinné fotokatody, neboť jde o polovodiče typu p. Jejich další výhodou je zároveň relativně nízká cena při současně vyšší odolnosti vůči fotodegradaci. Avšak hlavním problémem ztěžující studium těchto materiálů spočívá v přípravě tenkých vrstev s dostatečnou homogenitou a fázovou čistotou na vodivém substrátu. V této práci se zaměřuji na dvoustupňovou přípravu spinelu a delafossitu metodou sprejové pyrolýzy následovanou kalcinací v definované atmosféře. Volba vhodných prekursorů, jejich koncentrací (za dostatečné stability těchto roztoků) a dále vlastní metoda nanosení na substrát se ukázaly být stěžejními parametry při snaze získat vrstvy vhodné k dalšímu studiu. Mimo jiné velkým omezením je limitní teplota, které můžeme vystavit vodivé substráty bez ztráty jejich vodivosti. Cílem této práce je vyvinout metodu přípravy tenkých vrstev spinelu a delafossitu na vodivých FTO substrátech při teplotách nepřekračujících 750°C .

Příprava fotokatalyticky aktivních oxyhalogenidů bismutu pro využití při čištění vody

Bc. Jana Volák (M1)

Školitel: Ing. Šárka Paušová, Ph.D.

Heterogenní fotokatalýza se jeví jako slibná metoda pro odstraňování perzistentních organických látek z odpadních a pitných vod. Nejčastěji používaným fotokatalyzátorem je oxid titaničitý (TiO_2). Jednou z nevýhod je, že pro jeho aktivaci je potřeba ultrafialové záření. Pro průmyslové aplikace je důležité syntetizovat fotokatalyzátory, které budou aktivní v oblasti viditelného světla. Oxyhalogenidy bismutu BiOX ($\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) patří mezi v současné době hojně studované fotokatalyzátory a jejich velkou výhodou je chemická stabilita, netoxicitá a odolnost proti korozi. BiOX má různou šířku zakázaného pásu v závislosti na halogenidu přítomném v molekule, což umožňuje jejich fotokatalytickou aktivitu i ve viditelném světle (BiOBr a BiOI). BiOX lze syntetizovat různými metodami (hydrolýza, sprejová pyrolýza, solvotermální syntéza atd.). Tato práce je zaměřena na přípravu BiOX pomocí hydrolýzy, hydrotermální a solvotermální (v ethylenglykolu) syntézy. Fotokatalytická aktivita byla stanovována pomocí odbourávání modelového polutantu, herbicidu monuronu, při ozařování UV či viditelným zářením. Fotokatalytická účinnost připravených materiálů byla porovnána s komerčně dostupným TiO_2 fotokatalyzátorem.

Ústav anorganické technologie II

MÍSTO: MÍSTNOST A032

KOMISE

Doc. Ing. Martin Paidar, Ph.D. (předseda)

Ing. Šárka Paušová, Ph.D.

Doc. Ing. Martin Zlámal, Ph.D.

Doc. Ing. Jaromír Hnát, Ph.D.

Ing. Milan Bernauer, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Bc. Federico Dei Sommi](#) (B1, doc. Ing. Martin Paidar, Ph.D.)

Direct experimental comparison of YSZ electrolytes fabrication approaches: powder compression and slurry casting

09:15 [Bc. Martin Augustin](#) (M2, doc. Ing. Martin Paidar, Ph.D.)

Studium provozních charakteristik a degračních dějů u vysokoteplotní ko-elektrolýzy H_2O a CO_2

09:30 [Jan Štrbík](#) (B3, Ing. Martin Prokop, Ph.D.)

Závislost vodivosti, tloušťky a výkonu katalytické vrstvy v PEM palivovém článku na metodě její přípravy

10:00 [Bc. Tomáš Jedlička](#) (M2, Ing. Martin Prokop, Ph.D.)

Charakterizace katalytických vrstev pro PEM palivové články připravených inkoustovým tiskem

10:00 [Bc. Jakub Roubal](#) (M2, doc. Ing. Martin Paidar, Ph.D.)

Předúprava vzduchu pro PEM palivové články

10:15 [Petr Kortan](#) (B3, doc. Ing. Tomáš Bystroň, Ph.D.)

Optimalizace elektrochemické syntézy 2-jodylbenzoové kyseliny

10:30 [Jan Čada](#) (B3, doc. Ing. Tomáš Bystroň, Ph.D.)

Elektrochemická syntéza diaryljodoniových solí – studium anodické oxidace derivátů jodbenzenu

10:45 [Bc. Patrik Švejda](#) (M2, doc. Ing. Tomáš Bystroň, Ph.D.)

Vliv základního elektrolytu na elektrochemickou redukci acetofenonu

[Bc. Vojtěch Drobný](#) (M2, Ing. Martin Prokop, Ph.D.)

Studie stability materiálů pro mikroporézní vrstvu na anodě pro PEM elektrolýzu vody

Direct experimental comparison of YSZ electrolytes fabrication approaches: powder compression and slurry casting

Bc. Federico Dei Sommi (B1)

Školitel: doc. Ing. Martin Paidar, Ph.D.

Hydrogen-related technologies have gained importance in the latest period due to the hydrogen role in the energy transition process from fossil to sustainable sources. Solid oxide cells (SOCs) represent one of the most promising technologies. Its basic unit comprises of an electrolyte, an anode and a cathode. Thanks to high operation temperature ($\sim 800\text{ }^{\circ}\text{C}$) it does not need Pt-metals catalysts and features higher efficiency than lower temperature cells. However, the high operation temperature poses high requirements on the materials properties. The aim of this work is to fabricate the YSZ electrolyte with suitable properties in a reproducible manner. Two different methods were used: powder compression and slurry casting, where the former is generally used for laboratory and the latter for industrial scale applications. Using both methods electrolytes were successfully prepared. The morphology and electrochemical properties of fabricated electrolytes were analyzed in order to determine the impact of fabrication procedure conditions (e. g. sintering temperature and materials composition). In the case of slurry casting the sintering procedure needs to be optimised to ensure gas impermeability.

Studium provozních charakteristik a degradačních dějů u vysokoteplotní ko-elektrolýzy H_2O a CO_2

Bc. Martin Augustin (M2)

Školitel: doc. Ing. Martin Paidar, Ph.D.

Vysokoteplotní články s pevnými oxidy představují atraktivní technologii v konceptu energetiky založené na obnovitelných zdrojích. Ko-elektrolýza H_2O a CO_2 nabízí možnost výroby syntézního plynu, kdy není využíváno fosilních uhlovodíků, ale naopak je zužitkován CO_2 . Elektrolytický článek, pracující okolo $800\text{ }^{\circ}\text{C}$, je složen z plynotěsného elektrolytu (ZrO_2 dopovaný Y_2O_3), katody na bázi Ni a anody tvořené směsnými oxidy perovskitické struktury. Do elektrolytického článku vstupuje na katodu vodní pára a CO_2 , vystupuje směs CO, H_2 a nezredukovaných reaktantů. Na anodě vzniká kyslík. Stupeň přeměny H_2O a CO_2 je limitován poměrem jednotlivých reaktantů ve vstupním proudu, aby chemická rovnováha při dané teplotě nevedla k tvorbě nežádoucích uhlíkových úsad (Boudouardova reakce, redukce CO vodíkem). Cílem práce je charakterizovat laboratorně připravené vysokoteplotní články v režimu elektrolýzy samotné H_2O a následně ko-elektrolýzy H_2O a CO_2 , a to při různém poměru a průtoku vstupujícího CO_2 a H_2O a při různé provozní teplotě. Zkoumán je výkon článků i jeho dlouhodobá stabilita a míra degradace. Výsledky ukázaly, že ko-elektrolýza H_2O a CO_2 má srovnatelné provozní parametry jako elektrolýza H_2O a ani u jednoho procesu nebyla zaznamenána významná degradace ani po desítkách hodin provozu.

Závislost vodivosti, tloušťky a výkonu katalytické vrstvy v PEM palivovém článku na metodě její přípravy

Jan Štrbík (B3)

Školitel: Ing. Martin Prokop, Ph.D.

Palivové články typu PEM jsou nedílnou součástí vodíkové ekonomiky a představují slibnou technologii pro výrobu čisté energie, avšak jejich nevýhodou je jejich vysoká pořizovací cena. Jednou z cest ke snížení nákladů je optimalizace metod nanášení katalytické vrstvy na polymerní membránu. Alternativou k ultrazvukovému sprejování suspenze je inkoustový tisk, který zefektivňuje průmyslovou výrobu katalytických vrstev a snižuje jejich výrobní náklady. V této práci se věnujeme porovnání obou metod přípravy katalytické vrstvy z hlediska výkonu PEM palivového článku, tloušťky katalytické vrstvy a její elektronové vodivosti. K charakterizaci palivového článku byly využity zátěžové křivky, elektrochemická impedanční spektroskopie a cyklická voltametrie. Dále byly zjištěny vodivosti a tloušťky vrstev, obsahujících různé množství katalyzátoru. Výsledky ukazují, že palivové články s katalytickými vrstvami připravenými inkoustovým tiskem vykazují podobný výkon při použití menšího množství Pt katalyzátoru, vrstvy jsou tenčí a lépe vodivé. Metoda inkoustového tisknutí se jeví jako vhodná pro průmyslovou aplikaci z důvodu nižší spotřeby katalytické směsi a lepších vlastností pro výslednou aplikaci palivového článku.

Charakterizace katalytických vrstev pro PEM palivové články připravených inkoustovým tiskem

Bc Tomáš Jedlička (M2)

Školitel: Ing. Martin Prokop, Ph.D.

S narůstající snahou o dekarbonizaci dopravy jde ruku v ruce i zajištění dostatečné nabídky zařízení pro konverzi energie. Potenciálním řešením je bezemisní technologie nízkoteplotních PEM palivových článků využívajících jako palivo vodík. Širší aplikace v praxi je však u této technologie podmíněna celkovým snížením výrobní ceny a ceny surovin. Oba tyto problémy řeší nově rozvíjená metoda inkoustově tisknutých katalytických vrstev. Tato metoda umožňuje vysokou míru automatizace výroby, snížení množství odpadů a zároveň dovoluje další rozvoj palivových článků v podobě tvorby strukturovaných katalytických vrstev. Ve své práci se zabývám srovnáním katalytických vrstev připravených metodou inkoustového tisku s metodou ultrazvukové depozice ze suspenze. Vzorky byly charakterizovány v laboratorní testovací cele metodou elektrochemické impedanční spektroskopie, cyklické voltametrie a změřením zátěžových křivek. Výkonové charakteristiky jsou zkoumány z hlediska navážky platiny, použité membrány, složení inkoustu a použitého katalyzátoru. Vzorky připravené inkoustovým tiskem vykazují vyšší výkony díky lepší homogenitě vrstev. Navíc jsou schopné dosáhnout srovnatelných výkonů při třetinové navážce platiny oproti vzorkům připravených konvenční metodou.

Předúprava vzduchu pro PEM palivové články

Bc. Jakub Roubal (M2)

Školitel: doc. Ing. Martin Paidar, Ph.D.

Palivové články PEM představují efektivní způsob konverze vodíku na elektřinu, a proto jsou využívány ve vodíkových energetických systémech. Kvalita přiváděného vzduchu má významný vliv na provoz palivového článku a dlouhodobé životnosti. Problémy pak mohou nastat v případě palivových článků pracujících v průmyslových lokalitách, kde je větší pravděpodobnost přítomnosti kontaminantů, které mohou snižovat výkon palivového článku. Práce se věnuje technologii filtrace vzduchu před vstupem do palivového článku. Do přívodu vzduchu byly přidávány polutanty a byl sledován vliv na výkon palivového článku. Následně byla stanovena účinnost filtrační jednotky pro odstraňování organických a anorganických kontaminantů. Nezbytným bodem bylo posouzení vlivu vniknutí kapalin či pevných částic do prostředí filtru. Byl prokázán relativně malý dopad kontaminace lehkými uhlovodíky na funkci PEM palivového článku stejně tak, jako velmi účinná separace kapek na předřazeném mechanickém odlučovači.

Optimalizace elektrochemické syntézy 2-jodylbenzoové kyseliny

Petr Kortan (B3)

Školitel: doc. Ing. Tomáš Bystroň, Ph.D.

2-jodylbenzoová kyselina, v literatuře známá jako IBX, je organická sloučenina obsahující atom hypervalentního jódu. Tato látka se využívá k selektivním oxidačním reakcím, například při oxidaci alkoholů na aldehydy či ketony bez rizika přeoxidování na karboxylové kyseliny. Na rozdíl od jiných oxidačních činidel na bázi těžkých kovů (Cr, Mn,...) je tato sloučenina netoxická, což je výhoda při výrobě řady léčiv. Syntéza IBX je drahá a nebezpečná, důvodem je nestabilita IBX při vyšších teplotách a nutnost použití drahých a potenciálně nebezpečných oxidačních činidel. Problémy s bezpečností by šlo vyřešit využitím elektrochemické syntézy, kdy odpadá nutnost použít oxidační činidlo. Výchozí látkou je 2-jodbenzoová kyselina, která je oxidovaná na bórem dopované diamantové anodě v silně kyselém roztoku vhodného rozpouštědla. Elektrochemickou oxidaci lze navíc provozovat za laboratorní teploty, představuje tak levnou a bezpečnou metodu syntézy IBX. Cílem této práce je optimalizovat syntézu IBX v průtočném elektrochemickém reaktoru, tzn. najít takové podmínky (potenciál anody, rozpouštědlo, koncentrace výchozí látky,...), při kterých bude výtěžek této látky maximální. V současnosti je výzkum zaměřen na minimalizaci vzniku vedlejších produktů.

Elektrochemická syntéza diaryljodoniových solí – studium anodické oxidace derivátů jodbenzenu

Jan Čada (B3)

Školitel: doc. Ing. Tomáš Bystroň, Ph.D.

Diaryljodoniové soli představují zajímavou skupinu látek, které vynikají schopností být mírná vysoce selektivní oxidační či arylační činidla. Jejich nevýhodou je však jejich nestabilita, tudíž je nutno provádět syntézu těchto činidel před jejich využitím. Jejich běžná příprava probíhá z jodosyl a jodyl sloučenin, avšak příprava těchto látek je velice složitá. Možná je výroba pomocí oxidace směsi jodbenzenu a arenu peroxokyselinou, například *m*-chlorperoxybenzoovou. Nevýhodami této metody jsou nekompatibilita řady arenů a nízké výtěžky produktu. Oproti tomu, elektrochemická syntéza diaryljodoniových solí je založena na přímé anodické oxidaci směsi v nevodném prostředí. Není tak nutno používat oxidačního činidla, což umožňuje výrazně zvýšit bezpečnost provozu a snížit množství produkováných odpadů. Cílem této práce bylo pochopení vztahu mezi strukturou jodbenzenu a jeho derivátů a jejich oxidačním potenciálem. Hodnoty oxidačních potenciálů budou korelovány s Hammetovými konstantami derivátů jodbenzenu. Tato informace bude následně využita při vlastní syntéze diaryljodoniových solí. Ke studiu byla využita metoda cyklické voltametrie na platinové mikroelektrodě v prostředí acetonitrilu.

Vliv základního elektrolytu na elektrochemickou redukci acetofenonu

Bc. Patrik Švejda (M2)

Školitel: doc. Ing. Tomáš Bystroň, Ph.D.

1-fenylethanol je látka s rozsáhlým industriálním využitím. To nachází například v potravinářském a parfumérském průmyslu, při výrobě styrenu nebo nátěrových hmot. Nemalé uplatnění nalézá také v průmyslu farmaceutickém, kde se používá například jako antimikrobiální agens. 1-fenylethanol se vyrábí z acetofenonu redukcí s využitím nebezpečných a toxických látek jako NaBH_4 , nebo cestou biotechnologickou, za použití enzymatických reakcí. Problémem alternativní elektrochemické cesty, který ji činí průmyslově nezajímavou, je především dimerizace vznikajících meziproduktů, jež výrazně snižuje výtěžek 1-fenylethanolu. Cílem této studie je prozkoumání vlivu použitého základního elektrolytu na tuto reakci. Potenciál redukce acetofenonu byl studován pomocí cyklické voltametrie na bórem dopované diamantové (BDD) katodě. Následně byl stanoven výtěžek 1-fenylethanolu při preparativní galvanostatické elektrolýze při různých proudových hustotách v průtočné elektrochemické cele s použitím BDD katody. Jako základní elektrolyt byly testovány octany a chloristany s různými protiionty v prostředí methanolu. V prezentaci budou diskutovány zjištěné výsledky ohledně vlivu kationtu a velikosti proudové hustoty na výtěžek 1-fenylethanolu.

Studie stability materiálů pro mikroporézní vrstvu na anodě pro PEM elektrolýzu vody

Bc. Vojtěch Drobný (M2)

Školitel: Ing. Martin Prokop, Ph.D.

Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Jan Šerák, Ph.D.

SEZNAM SEKČÍ

1. [Kovové materiály I.](#)
2. [Kovové materiály II.](#)

Kovové materiály I.

MÍSTO: POSLUCHÁRNA ÚSTAVU 106 (A50)

KOMISE

doc. Ing. Jan Stoulil, Ph.D. (předseda)

Ing. Petr Dvořák, Ph.D.

Ing. Jaroslav Čapek, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Bc. Jan Blažek](#) (M1, Ing. Jiří Kubásek, Ph.D.)

Bioabsorbovatelné slitiny zinku se zlepšenou pevností při tělesné teplotě

09:09 [Richard Kubík](#) (B3, prof. Dr. Ing. Dalibor Vojtěch)

3D tisk slitiny TiAl6V4

09:18 [Bc. Daniel Kvapil](#) (M2, prof. Dr. Ing. Dalibor Vojtěch)

Vysoce otěruvzdorné povlaky připravené termálními nástřiky

09:27 [Aneta Nováková](#) (B3, doc. Ing. Luděk Joska, CSc.)

Slitina TiNbTaSn jako čidlo pH pro bioaplikace

09:36 [Bc. Vojtěch Nováček](#) (M2, Ing. Filip Průša, Ph.D.)

Vliv substituce prvků na žáruvzdornost refrakční slitiny s vysokou entropií

09:45 [Ema Volková](#) (B3, Ing. Jiří Kubásek, Ph.D.)

Mikrostruktura a mechanické vlastnosti slitin hořčíku s LPSO fázemi

09:54 [Bc. Tomáš Vrba](#) (M1, prof. Ing. Pavel Novák, Ph.D.)

Kompozit silicid-aluminid-keramika

10:03 [Bc. Jan Šťovíček](#) (M1, doc. Ing. Jaroslav Fojt, Ph.D.)

Korozní chování NiTinolu v modelovém prostředí lidského těla

Bioabsorbovatelné slitiny zinku se zlepšenou pevností při tělesné teplotě

Bc. Jan Blažek (M1)

Školitel: Ing. Jiří Kubásek, Ph.D.

Zinkové slitiny se jeví jako potenciálně vhodné bioabsorbovatelné materiály zejména pro oblast regenerativní medicíny. Výhodou slitin na bázi zinku je jejich nižší korozní rychlost oproti konkurenčně vyvíjeným materiálům na bázi hořčíku a dobrá biokompatibilita. Čistý zinek však z hlediska mechanických vlastností (zejména pevnosti a odolnosti proti tečení za zvýšené teploty) nesplňuje požadované standardy. Jako postup pro zlepšení jeho mechanických vlastností je velmi často uvažována kombinace vhodného legování a termomechanického zpracování. Zajímavé řešení pak nabízí příprava materiálů postupy práškové metalurgie. V této práci byly připraveny slitiny na bázi Zn-2Mn a Zn-2Cu (hm. %) konvenčními metodami i postupy práškové metalurgie. V mikrostrukturách takto připravených slitin byly v souladu s rovnovážnými fázovými diagramy pozorovány intermetalické fáze, které v kombinaci s vyšší rozpustností prvků v tuhém roztoku Zn vedly ke zvýšení tvrdosti a pevnosti v tlaku a ohybu. U slitiny Zn-2Mn připravené mechanickým legováním prášků a jejich následnou kompaktizací metodou sintrace v plazmatu došlo vlivem nerovnovážného obsahu Mn v tuhém roztoku Zn ke zvýšení plasticity. Následnou extruzí této slitiny bylo dosaženo dalšího zvýšení pevnosti.

3D tisk slitiny TiAl6V4

Richard Kubík (B3)

Školitel: prof. Dr. Ing. Dalibor Vojtěch

Titové slitiny jsou hojně využívány v oblasti medicíny. Konkrétně slitina TiAl6V4, původně vyvinutá pro letecký průmysl, našla své místo v medicíně. Vyniká vysokou korozní odolností, mechanickou pevností a svou biokompatibilitou. Díky těmto výhodám je často využívána v ortopedii. Vývoj 3D tisku kovových materiálů je pro biomedicínské aplikace velmi zásadní změnou, neboť dovoluje vyrábět implantáty na míru, s komplexní geometrií a povrchovými strukturami pro lepší biokompatibilitu. V práci byly analyzovány dvě 3D tištěné struktury TiAl6V4. Jedná se o struktury tvaru diamond a gyroid, připravené metodou Selective Laser Melting (SLM). Byly testovány mechanické vlastnosti (pevnost jednoosým tlakem, tvrdost), dále byla studována mikrostruktura a morfologie povrchu vzorku pomocí světelného i elektronového mikroskopu. Závěrem práce bylo zhodnotit vliv tvaru tištěné struktury na mechanické vlastnosti a určit vhodnější materiál. Další studium materiálů se bude zabývat eliminací kovového prášku, který při tisku ulpěl na povrchu struktury.

Vysoce otěruvzdorné povlaky připravené termálními nástřiky

Bc. Daniel Kvapil (M2)

Školitel: prof. Dr. Ing. Dalibor Vojtěch

Povrchové úpravy nanášením povlaků jsou efektivním vylepšením vlastností kovových materiálů. Vhodným povlakem je možné výrazně zvýšit například otěruvzdornost, tvrdost povrchu či korozní odolnost. Takto lze zásadně zlepšit životnost a spolehlivost technologicky využívaných komponent či snížit spotřebu energie, a tedy i omezit provozní náklady. K depozici vysoce otěruvzdorných povlaků, které mají nahradit tvrdé chromování, jsou dnes nejvíce používány techniky termálního nástřiku. Jedná se o metody vyvíjející vysoké teploty a rychlosti nanášených částic. Tato práce byla zaměřena na metody vysokorychlostního nástřiku plamenem (HVOF) a atmosférického plazmatického nástřiku (APS). Byly studovány tři typy povlaků: I. kompozitní WC-10Co4Cr (HVOF), II. kovové Tribaloy T-400 a T-800 (HVOF), III. keramické Al_2O_3 -13TiO₂ (APS). Jádrem práce bylo extenzivní tribologické testování povlaků proti aluminovým a ocelovým tělesům, kdy byly získány koeficienty tření a objemy otěru. Opotřebené vzorky byly dále zkoumány pomocí mikroskopie, profilometrie a analýz fázového a chemického složení. Bylo zjištěno, že úpravou depozičních parametrů a chlazení substrátu nebo vhodným tepelným zpracováním je možné u jednotlivých povlaků zlepšit chování při kluzném opotřebením a snížit koeficient tření a míru otěru.

Slitina TiNbTaSn jako čidlo pH pro bioaplikace

Aneta Nováková (B3)

Školitel: doc. Ing. Luděk Joska, CSc.

Zánět je nežádoucí komplikací implantace, který může v případě pozdního zásahu vést až k selhání implantátu. Zánětlivý proces vede k významnému poklesu pH, jehož detekce by mohla pomoci efektivně optimalizovat léčbu. Jako čidlo lze použít materiál, který je v těle inertní, ale zároveň schopný spolehlivě reagovat na změny pH v okolí implantátu. Cílem této práce bylo otestovat možnost využití slitiny Ti25Nb4Ta8Sn jako pH čidla. Zároveň bylo studováno chování slitiny Ti35Nb6Ta a cínu. Měření probíhala v pufovaném fyziologickém roztoku o pH 7,4 a 6,4. Nejprve byla měřena změna potenciálu v čase pro různé úpravy povrchu slitiny Ti25Nb4Ta8Sn. Z měření vyplynulo, že potenciál vykazuje velký rozptyl hodnot, zejména v nižším pH. Původ tohoto chování byl dále zkoumán na základě měření polarizačního odporu, impedance a potenciodynamických křivek všech uvedených materiálů. Bylo zjištěno, že slitina Ti35Nb6Ta splňuje požadavky na stabilitu, zatímco cín vykazuje na nižší hladině pH významnou elektrochemickou aktivitu, která zásadním způsobem ovlivňuje chování slitiny Ti25Nb4Ta8Sn. Z výsledků plyne, že slitina Ti25Nb4Ta8Sn není vhodná pro použití jako čidlo pH v prostředí lidského těla.

Vliv substituce prvků na žáruvzdornost refrakční slitiny s vysokou entropií

Bc. Vojtěch Nováček (M2)

Školitel: Ing. Filip Průša, Ph.D.

Pro moderní odvětví průmyslu, například jadernou energetiku, letecký a kosmický průmysl, jsou klíčové slitiny s vysokou tepelnou odolností a výbornými mechanickými vlastnostmi. V těchto aplikacích jsou v současnosti používány zejména niklové superslitiny. Ty však za vysokých teplot ztrácejí mechanické vlastnosti. Pro tyto účely je zkoumána možnost použití žárupevných slitin s vysokou entropií (RHEA), což jsou multi-komponentní slitiny, tvořené zejména kovy s vysokou teplotou tání. Mnoho z těchto slitin se vyznačuje výbornou žárupevností, ale nedostatečnou žáruvzdorností. Dále většina RHEA krystalizuje v BCC krystalové mřížce a je tak křehká. Značná rozmanitost RHEA a obtížná předpověď jejich chování vyžaduje experimentální určení vlastností konkrétních slitin. V této práci byla připravena slitina CrNbNiTaW kombinací mechanického legování a slinování v plasmatu. U připravené slitiny bylo analyzováno fázové a chemické složení a byly stanoveny hodnoty základních mechanických vlastností. Žáruvzdornost byla vyhodnocena na základě hmotnostního přírůstku vznikajících oxidů.

Mikrostruktura a mechanické vlastnosti slitin hořčíku s LPSO fázemi

Ema Volková (B3)

Školitel: Ing. Jiří Kubásek, Ph.D.

Hořčík a slitiny hořčíku jsou považovány za perspektivní materiály pro použití v biomedicínských aplikacích díky jejich biokompatibilitě, biodegradabilitě a biomechanické kompatibilitě. Vysoká korozní rychlost hořčíkových slitin v tělním prostředí vede k degradaci a rychlé ztrátě mechanických vlastností, což je nežádoucí. Účinným způsobem pro snížení korozní rychlosti a zlepšení mechanických vlastností je legování vybranými prvky. Mezi vhodné legující prvky lze zařadit Y a Zn. Tato práce byla zaměřena na slitiny hořčíku s ytriem a zinkem s potenciálem vytvářet v mikrostruktuře materiálů LPSO (long-period stacking ordered) fáze. Materiály byly připraveny kombinací procesů lití, tepelného zpracování a extruze. U výsledných slitin byla zkoumána mikrostruktura a základní mechanické vlastnosti. Získané výsledky prokázaly klíčový dopad tepelného zpracování na vyloučení LPSO fází a jejich charakter.

Kompozit silicid-aluminid-keramika

Bc. Tomáš Vrba (M1)

Školitel: prof. Ing. Pavel Novák, Ph.D.

Při výrobě kovových obráběných součástek je nutné používat nástroje z materiálů s vysokou tvrdostí a otěruvzdorností. Takovými jsou v současné době například slinuté karbidy. Na jejich přípravu je potřeba dostatek wolframu a kobaltu. Tyto strategické suroviny se nacházejí především v Číně a Rusku, a proto je pro zvýšení soběstačnosti Evropy důležité hledat vhodné alternativy pro přípravu obráběcích a tvářecích nástrojů a vysoce namáhaných součástek. Tato práce se zabývá přípravou třífázového kompozitu silicid–aluminid–keramika, který by mohl mít požadované vlastnosti. Nejprve byly připraveny fáze FeSi a NiAl metodou mechanického legování. Následně byly namíchány 3 vzorky s rozdílným obsahem Al_2O_3 , které byly pomocí slinuty metodou SPS. Vzorky byly následně analyzovány pomocí SEM–EDS a byla změřena a vzájemně porovnána jejich tvrdost a otěruvzdornost vzhledem k podílu keramické fáze.

Korozní chování NiTinu v modelovém prostředí lidského těla

Bc. Jan Šťovíček (M1)

Školitel: doc. Ing. Jaroslav Fojt, Ph.D.

Při některých nádorových a kardiovaskulárních onemocněních je potřeba obnovit průchodnost a tím i funkci tepen, jícnu, žlučníku či plic. K tomuto účelu se používají stenty. Aby si udržely potřebnou elasticitu a pevnost i v agresivním prostředí lidského těla, vyrábějí se z korozně vysoce odolných slitin (nitinol, ocel 316L). Přesto se potýkají s problémem nerovnoměrné koroze, který může vést až k jejich selhání v těle pacienta a stane se z nich jen další překážka v tělní trubici. Běžně se stává, že ostré konce drátů probodnou okolní tkáň a následně do ní zarůstají. To může vést ke značným zdravotním komplikacím a zejména u starších pacientů se jedná o velké zatížení organismu, spojené s nutností další operace. Další komplikací je nebezpečí uvolňování iontů niklu do okolní tkáně. Navíc dochází k jejich akceleraci vlivem prostředí (koncentrace Cl^- iontů, pH, usazováním na povrchu etc.). Jednou z možností, jak jim předejít, je úprava povrchu drátů stentu. Cílem této práce bylo popsat korozní chování nitinolu v prostředí trávicího traktu a najít vhodné povrchové úpravy nitinolových drátů, které by zvýšili jejich korozní odolnost. Pro nastínění vlivu úpravy na průmyslově vyrobený stent byly provedeny kroky simulující následné technologické postupy zpracování.

Kovové materiály II.

MÍSTO: POSLUCHÁRNA ÚSTAVU 106 (A50)

KOMISE

doc. Ing. Jaroslav Fojt, Ph.D. (předseda)

Ing. Eva Kristianová

Ing. Zdeněk Kačenka

PROGRAM

10:15 **zahájení**

10:15 [Veronika Balejová](#) (B3, doc. Ing. Alena Michalcová, Ph.D.)

Vlastnosti inovativních intermetalických povlaků na titanu připravených reaktivní sintrací

10:24 [Bc. Tomáš Balický](#) (M2, doc. Ing. Alena Michalcová, Ph.D.)

Srovnání difúzních vlastností Cu a Fe v Sn a ve slitině Sn_{0,8}Pb.

10:33 [Andrea Boháčová](#) (B3, prof. Ing. Pavel Novák, Ph.D.)

Příprava silicidu Fe₅Si₃

10:42 [Bc. Jiří Duda](#) (M1, prof. Ing. Pavel Novák, Ph.D.)

Kompozitní materiály Cr₅Si₃-aluminid

10:51 [Bc. Radek Haišman](#) (M2, doc. Ing. Milan Kouřil, Ph.D.)

Sorpce chloridů v betonu ovlivněném průchodem stejnosměrného proudu

11:00 [Bc. Tomáš Hlava](#) (M2, Ing. Jiří Kubásek, Ph.D.)

Austenitické oceli zpevněné částicemi Y₂O₃ připravené postupy práškové metalurgie

11:09 [Bc. Jan Riedl](#) (M2, Ing. Filip Průša, Ph.D.)

Příprava karbidů přechodných kovů pomocí odpadních uhlíkových prekurzorů

11:18 [Jakub Veselý](#) (B3, prof. Ing. Pavel Novák, Ph.D.)

Vliv boru na strukturu a vlastnosti kompozitu NiAl-FeSi

Vlastnosti inovativních intermetalických povlaků na titanu připravených reaktivní sintrací

Veronika Balejová (B3)

Školitel: doc. Ing. Alena Michalcová, Ph.D.

Titan je kov vyznačující se nízkou hustotou a vysokou pevností. Je proto atraktivním materiálem pro použití v leteckém a kosmickém průmyslu. Vyniká i svou vysokou korozní odolností, ta ale prudce klesá s teplotou 600 °C vlivem vzniku méně stabilních oxidů. Snahou je tuto teplotní hranici posunout, a to povlakováním titanu intermetalickým povlakem na bázi Ti-Al. K přípravě intermetalika byla použita metoda reaktivní sintrace, jejíž velkou výhodou je oproti mechanickému legování vyšší čistota výsledných produktů. Použitím této metody vznikl porézní vzorek, na kterém bylo pozorováno nedostatečné proreagování směsi. Vzorek byl následně rozemlet a nanesen na titanový kompaktní metodou slinování v plazmatu. Byl proveden příčný řez kompaktním vzorkem, který byl zkoumán pomocí SEM a EDS. Dále byly zkoumány jeho mechanické vlastnosti. Tímto postupem byl vytvořen povlak s nerovnoměrnou strukturou zrn, kterou se pomocí SPS nepodařilo dostatečně zhomogenizovat.

Srovnání difúzních vlastností Cu a Fe v Sn a ve slitině Sn_{0,8}Pb.

Bc. Tomáš Balický (M2)

Školitel: doc. Ing. Alena Michalcová, Ph.D.

Cínový mor představuje jeden z typů degradace nejen historických materiálů vyrobených z čistého cínu. Jeho průběh je značně ovlivňován přítomností nečistot a legujících prvků. Vliv množství těchto příměsí je v literatuře popsán pouze částečně a vliv rozložení legur je většinou opomíjen. Cílem práce bylo zaznamenat a popsat chování mědi a železa v cínové a SnPb matrici. Tyčky mědi a železa byly umístěny do cínu a slitiny Sn_{0,8}Pb a žíhány v časových intervalech od 36 s až po 100 h a poté analyzovány pomocí XRD a SEM–EDS. Bylo pozorováno, že měď postupně prodifundovala skrz celou matrici. Oproti tomu se na povrchu železa utvořila vrstva, která difúzi železa do matrice téměř úplně potlačila. Díky těmto výsledkům lze vyvodit, že přítomnost Cu ve slitinách Sn může při zvýšených teplotách vést k tvorbě intermetalických fází. Krystalizační tlaky mohou materiál mechanicky poškodit, a toto poškození může být při neodborném průzkumu zaměněno za cínový mor.

Příprava silicidu Fe_5Si_3

Andrea Boháčová (B3)

Školitel: prof. Ing. Pavel Novák, Ph.D.

V současnosti se pro výrobu řezných materiálů hojně využívají slinuté karbidy, tvořené obvykle karbidem wolframu WC s kobaltovým pojivem. Problémem těchto materiálů je, že kobalt i wolfram jsou velmi strategickými prvky patřícími ke kritickým surovinám ve státech s jeho nedostatkem. Z tohoto důvodu vznikly snahy o nalezení alternativ pro použití v nástrojových materiálech. Tato práce uvažuje o náhradě slinutých karbidů kompozity na bázi intermetalických sloučenin železa s křemíkem. Fázový diagram Fe-Si obsahuje několik intermetalických fází. Avšak fáze Fe_5Si_3 není při pokojové teplotě stabilní, a tak ani její vlastnosti nejsou popsány. Naším cílem byla příprava a stabilizace silicidu Fe_5Si_3 mechanickým legováním prášků a následnou kompaktizací metodou SPS. Byly zkoumány možnosti příprav a stabilizací již zmíněného silicidu, vyhodnocení mikrostruktur dané fáze a zkoušek tvrdosti. Výsledné vlastnosti této fáze byly porovnány s ostatními silicidy železa a byl zvažován jejich potenciál pro použití v nástrojových materiálech.

Kompozitní materiály Cr_5Si_3 -aluminid

Bc. Jiří Duda (M1)

Školitel: prof. Ing. Pavel Novák, Ph.D.

V současnosti nejpoužívanějším materiálem pro výrobu obráběcích nástrojů jsou slinuté karbidy, známé například pod obchodním názvem Vidium. Slinuté karbidy obsahují wolfram v tvrdé karbidové fázi a kobalt jako pojivo. Tyto dva kovy mají svá ložiska v Asii a Africe a jsou pro Evropu obtížně dostupné. V rámci této práce je proto vyvíjen pro Evropu dostupnější kompozitní materiál. Tvrdou fází těchto kompozitních materiálů je silicid chromu Cr_5Si_3 . Jako pojivo je použit aluminid železa FeAl nebo aluminid niklu NiAl . Práškové formy silicidu a obou aluminidů byly připraveny v laboratoři mechanickým legováním. Silicidová a aluminidová fáze byly smíchány v různých poměrech a slinuty metodou slinování v plazmatu (SPS) při teplotě 1000 °C s dobou výdrže na teplotě a tlaku 10 minut. U jednotlivých vzorků bylo zkoumáno fázové složení pomocí rentgenové difrakce a hodnocena mikrostruktura pomocí světelné i elektronové mikroskopie (SEM). Nakonec byly u vzorků změřeny vybrané mechanické vlastnosti.

Sorpce chloridů v betonu ovlivněném průchodem stejnosměrného proudu

Bc. Radek Haišman (M2)

Školitel: doc. Ing. Milan Kouřil, Ph.D.

Vzhledem k poréznímu charakteru betonu, pronikají do jeho matrice látky vyvolávající korozi ocelových výztuží, např. chloridy, které jsou přítomny v posypových solích a přímořských oblastech. Na rychlost průchodu porézní strukturou má vliv jak struktura betonu, tak vložené elektrické pole při použití elektrochemických ochranných. Dalším způsobem, jak zpomalit průchod chloridových aniontů, je přítomnost specifických doplňkových materiálů (SCM). Příkladem může být mikrosilika (MS) nebo elektrárenské popílků (FA), které vyplňují póry čímž snižují permeabilitu betonu. Práškové vzorky betonů o různém složení na bázi portlandského cementu a doplňkových materiálů (mletý vápenec, mikrosilika) byly podrobeny sorpčním testům. Byly zhotoveny dvě sady vzorků, přičemž jedna byla před sorpcí vystavena DC (20 V, 24 h). Zkušební roztoky obsahovaly vzrůstající koncentraci chloridů. Výsledky ve formě sorpčních izoterm ukázaly významný vliv DC na vaznost chloridů v betonech. Proudově ovlivněnou sorpci v koncentračním rozsahu 5-200 mmol/l Cl^- lze popsat Freundlichovým i Langmuirovým vztahem.

Austenitické oceli zpevněné částicemi Y_2O_3 připravené postupy práškové metalurgie

Bc. Tomáš Hlava (M2)

Školitel: Ing. Jiří Kubásek, Ph.D.

S cílem dosáhnout lepších mechanických vlastností (pevnost, odolnost proti tečení) je v rámci ocelí využíváno zpevnění matrice disperzí oxidů (ODS oceli). Nejčastěji je jako výztuž využíván Y_2O_3 . Výsledné materiály jsou uvažovány pro vysokoteplotní aplikace, například v jaderných reaktorech příští generace. Tyto materiály jsou připravovány standardně postupy práškové metalurgie zahrnující společné mletí matričního prášku a výztuže a kompaktizaci např. metodou izostatického lisování za tepla. V rámci práce byly studovány austenitické ODS oceli připravené mechanických legováním prášku korozivzdorné oceli 316 a čistého Y. Vytvořená slitina v práškové podobě byla kompaktizována metodou sintrace v plazmatu (SPS). Naším cílem bylo otestovat vliv podmínek přípravy na mikrostrukturu materiálu včetně možné in-situ tvorby Y_2O_3 .

Příprava karbidů přechodných kovů pomocí odpadních uhlíkových prekurzorů

Bc. Jan Riedl (M2)

Školitel: Ing. Filip Průša, Ph.D.

Karbidy přechodných kovů vynikají zajímavou kombinací vlastností, mezi které patří vysoké body tání, vysoké hodnoty Youngova modulu pružnosti, extrémní tvrdost a dobrá chemická odolnost. Díky této kombinaci mají široké využití od obráběcích nástrojů, po ochranné povlaky nebo pro použití v extrémních podmínkách jako je například jaderný průmysl. Karbidy mohou být připraveny metodou mechanického legování za použití odpadních produktů pyrolýzy jako zdroje uhlíku, který se vyskytuje v tomto produktu také ve svých 2D formách. Tento přístup umožňuje vytvoření vysoce jemnozrnných karbidů díky mechanickému mletí při současném snížení náročnosti jejich přípravy jak po stránce technologické, tak ekonomické. Cílem této práce byla příprava karbidů wolframu a titanu mechanickým legováním. Připravené práškové karbidy byly dále zkompaktizovány slinováním v plazmatu. Pro přípravu byla určena vhodná délka mechanického legování karbidů na základě kinetiky jejich vzniku. Zároveň byl studován vliv množství uhlíku na kinetiku tvorby karbidů, stejně jako mechanické vlastnosti připravených kompaktních vzorků. Příprava prášků karbidů poslouží k dalšímu výzkumu jejich vlivu na vlastnosti slitin s vysokou entropií.

Vliv boru na strukturu a vlastnosti kompozitu NiAl-FeSi

Jakub Veselý (B3)

Školitel: prof. Ing. Pavel Novák, Ph.D.

Oblíbeným materiálem pro výrobu obráběcích nástrojů jsou slinuté karbidy, jejichž hlavní složky však EU řadí mezi kritické suroviny. Vhodnou náhradou mohou být kompozitní materiály z intermetalických sloučenin, například kompozit NiAl-FeSi. Ten vykazuje vysokou tvrdost, srovnatelnou s tvrdostí dnes používaných materiálů, ale zároveň je také velmi křehký. V minulosti byl prokázán pozitivní vliv boru na mechanické vlastnosti a lomovou houževnatost kompozitu s podobnou matricí. Hlavním cílem této práce bylo sledování vlivu boru na mechanické vlastnosti a strukturu zmíněného kompozitu.

Ústav skla a keramiky

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Tereza Unger Uhlířová, Ph.D.

SEZNAM SEKČÍ

1. [Anorganické nekovové materiály - BC studenti](#)
2. [Anorganické nekovové materiály - MGR studenti](#)
3. [Restaurování a konzervování I](#)
4. [Restaurování a konzervování II](#)

Anorganické nekovové materiály - BC studenti

MÍSTO: NEUVEDENO

KOMISE

prof. RNDr. Ondrej Gedeon, Ph.D. DSc. (předseda)

doc. Dr. Ing. Martin Havlík Míka

Ing. Mária Kolářová, Ph.D.

PROGRAM

09:15 **zahájení**

[Matouš Eret](#) (B3, Ing. Richard Pokorný, Ph.D.)

Vliv chemické formy zdroje hliníku na konverzi kmene a retenci rhenia při vitrifikaci jaderného odpadu

[Radovan Fojt](#) (B3, doc. Dr. Ing. Martin Havlík Míka)

Vliv parametrů elektrosponingu na charakter nanovláken

[Bogdan Hryshkevich](#) (B3, prof. RNDr. Ondrej Gedeon, Ph.D., DSc.)

Povrch barnatého skla a jeho korozní změny sledované spektroskopickými metodami

[Laura Löwy](#) (B3, Ing. Richard Pokorný, Ph.D.)

Vliv zdroje hliníku na retenci rhenia při vitrifikaci jaderného odpadu

[Anna Mašlová](#) (B2, Ing. Soňa Hříbalová)

Elastické vlastnosti bezolovnaté piezoelektrické keramiky $K_{0.5}Na_{0.5}NbO_3$

[Radek Pezl](#) (B3, doc. Ing. Jaroslav Kloužek, CSc.)

Vliv rychlosti proudění a složení taveniny na podpovrchovou a krčkovou korozi chromito-hlinitého žáromateriálu

[Sofiia Zadnyprianska](#) (B1, Ing. Soňa Hříbalová)

Průhledné keramické nanokompozity - studie rozptylu světla v infračervené oblasti spektra

[Klára Zahradníková](#) (B3, doc. Dr. Ing. Martin Havlík Míka)

Pevný elektrolyt na základě skelných nanovláken

Vliv chemické formy zdroje hliníku na konverzi kmene a retenci rhenia při vitrifikaci jaderného odpadu

Matouš Eret (B3)

Školitel: Ing. Richard Pokorný, Ph.D.

Vitrification is one of the safest methods for the treatment and stabilization of nuclear waste. In our work, we are focusing on the issue of technetium volatilization during the vitrification process, developing and testing various glass melter feeds that exhibit high retention of rhenium (surrogate for radioactive technetium). Recently, we found that the source of alumina can have a significant impact on the rhenium retention. Our hypothesis is that during melting, gibbsite dehydrates to nano-crystalline amorphous alumina with high specific surface area. This causes that the early melt (containing Re) is adsorbed on the amorphous alumina surface, which turns to early glass-forming phase at about 600-700°C, increasing the diffusion of Re from the salt phase (from which it later easily volatilizes) into the glass-forming melt. To better understand this process, we performed specific surface area measurements, XRD, NMR, and XRF using a simulated low-activity waste with different alumina sources. For example, Fig. 1 displays the results of NMR analysis for the feeds with gibbsite, where we see the crystalline peaks are present until 300°C, and for kyanite, where those peaks remain present until higher temperatures.

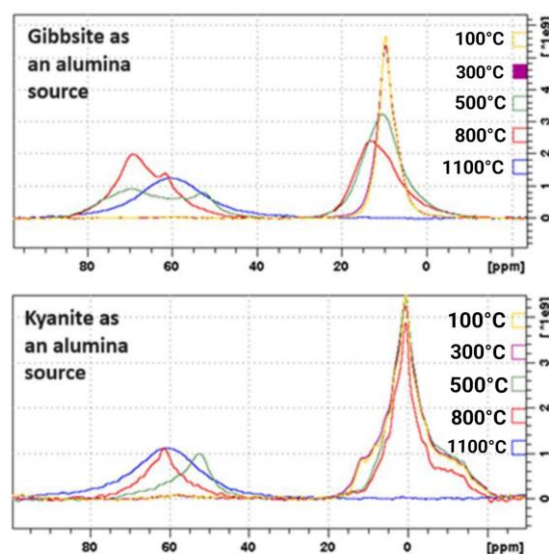


Figure 1:
NMR Results
for the feeds
with gibbsite
and kyanite
as the main
source of
alumina.

Vliv parametrů elektrospinningu na charakter nanovláken

Radovan Fojt (B3)

Školitel: doc. Dr. Ing. Martin Havlík Míka

Elektrospinning je velmi slibná metoda pro ekonomickou kvantitativní výrobu nanovláken. Charakter produktu je však silně závislý na optimalizaci parametrů elektrospinningu. Vliv mají vlastnosti zvlákňované látky, tok zvlákňované látky, vlastnosti elektrického pole, vlastnosti kapiláry a vlastnosti prostředí. Pro každou disperzní směs jsou kritické hodnoty veličin odlišné. V této práci byly zkoumány detailně vlivy napětí, toku zvlákňované látky a vzdálenosti kapilára-kolektor, protože se jedná o snadno nastavitelné parametry nevyžadující modifikaci zvlákňované látky, což je pro mnoho aplikací zásadní. Dále byly zkoumány trendy vlivu délky a vnitřního průměru kapiláry a vlastností zvlákňované látky. Získaná vlákna byla předběžně zhodnocena optickou mikroskopií, poté byly vybrané vzorky charakterizovány konfokální mikroskopií (Olympus LEXT™ OLS5000), případně skenovací elektronovou mikroskopií (TESCAN VEGA3). Na základě této charakterizace byly stanoveny optimální kombinace napětí, toku zvlákňované látky a vzdálenosti kapilára-kolektor za daných ostatních podmínek a tendence vlivu délky a vnitřního průměru kapiláry a vlastností zvlákňované látky pro různé disperzní směsi využívané pro výrobu skelných nanovláken pro speciální aplikace.

Povrch barnatého skla a jeho korozní změny sledované spektroskopickými metodami

Bogdan Hryshkevich (B3)

Školitel: prof. RNDr. Ondrej Gedeon, Ph.D., DSc.

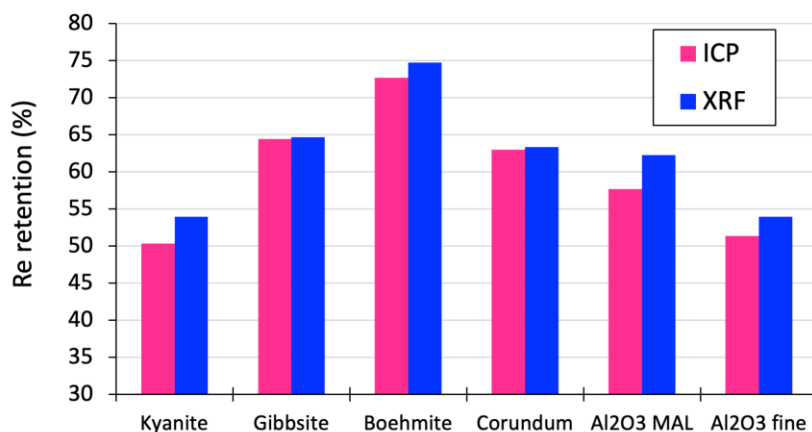
Povrch skla má vliv na řadu jeho vlastností, například na chemickou odolnost. V experimentální části se vzorky vystavily koroznímu prostředí, následně se jejich povrch analyzoval pomocí SEM (rastrovací elektronová mikroskopie), EDX (rtg. mikroanalýza), TOF – SIMS (Spektroskopie sekundárních iontů s Time-of-Flight detekcí) a získané výsledky se porovnaly s analýzami čistého skla. Vzorky ze sklenice byly vystaveny po dobu 14 dnů vlhkému vzduchu (80 rel% vlhkosti při 80 °C) a demineralizované vodě při 80 °C. Pomocí EDX bylo zjištěno, že došlo ke změně složení povrchu skel, ale nebyl nalezen rozdíl mezi vnějším a vnitřním povrchem sklenice. U skla ve vodě došlo k migraci iontů alkalických kovů k povrchu a k jejich následnému vyluhování do vody. U skla ve vlhkém prostředí se předpokládá, že došlo pouze k prostorové redistribuci iontů v objemu skla, což způsobilo formální pokles jejich koncentrace, měřené pomocí EDX. Tato redistribuce pak byla podrobněji zkoumána pomocí TOF-SIMS. Ve vlhkém prostředí činil úbytek iontů alkalických kovů oproti hodnotám naměřeným u vzorků čistého skla 10 at.rel% pro Na a 21 at.rel% pro K. U skla ve vodě byl úbytek 19 at.rel% pro Na a 34 at.rel% pro K.

Vliv zdroje hliníku na retenci rhenia při vitrifikaci jaderného odpadu

Laura Löwy (B3)

Školitel: Ing. Richard Pokorný, Ph.D.

During the vitrification process, nuclear waste is mixed with glass-forming additives and immobilized in the form of borosilicate glass. One of the glass-forming additives is aluminum, which enhances the chemical durability of the final glass. In our previous research, we found that the chemical form of the alumina source can significantly affect the retention of volatile rhenium (a non-radioactive surrogate for volatile technetium) during the vitrification of nuclear waste feed to glass. In our research, we used a representative low-activity waste glass feed (AN-102) with different alumina sources to demonstrate its effect on Re retention. Specifically, we used kyanite (Al_2SiO_5), gibbsite ($\text{Al}(\text{OH})_3$), boehmite (AlOOH), and corundum (Al_2O_3) with various particle sizes, and measured the Re retention during melting using ICP-MS and XRF. The highest retention of rhenium was observed in the boehmite feed, followed by gibbsite and corundum feeds, with kyanite feed retaining the lowest amount of Re. The results of this work thus have the potential to significantly improve the single-pass Re/Tc retention during nuclear waste vitrification. Currently, leaching tests are being performed to understand the phenomenon of Re diffusion from the molten salt phase into the glass-forming melt.



Elastické vlastnosti bezolovnaté piezoelektrické keramiky $K_{0.5}Na_{0.5}NbO_3$

Anna Mašlová (B2)

Školitel: Ing. Soňa Hříbalová

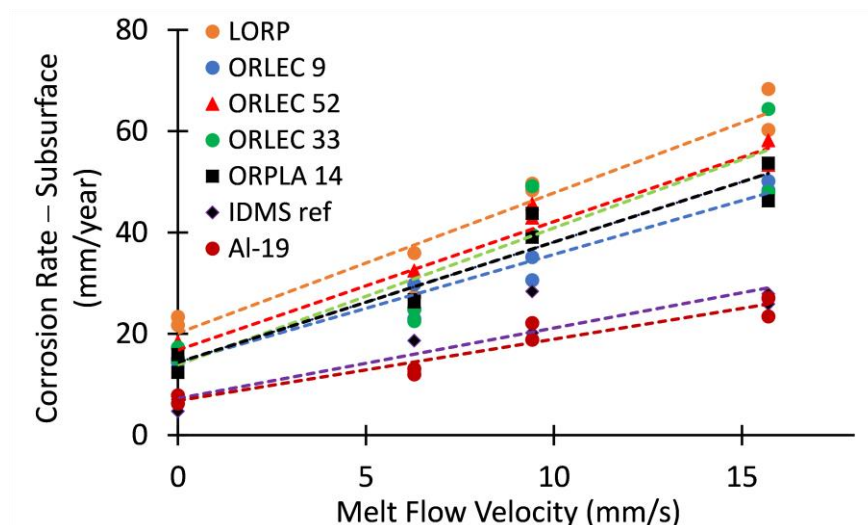
Niobičnan sodno-draselný ($K_xNa_{1-x}NbO_3$ / KNN) je jedním z bezolovnatých keramických materiálů vykazující piezoelektrické vlastnosti, které jsou zásadní pro aplikace jako ultrazvuky, sonary, senzory nebo sběrače energie. Se snahou nalézt alternativu k olovnatým piezoelektrickým materiálům (kvůli toxicitě olova) se zvyšuje zájem o různé alternativy, z nichž jednou by mohlo být právě KNN. Jedním z důležitých faktorů pro možné aplikace tohoto materiálu jsou i jeho elastické vlastnosti. Cílem práce proto bylo zkoumání elastických vlastností vzorků KNN v závislosti na jejich fázovém složení a pórovitosti. Vzorky byly připraveny ze tří různých výchozích prášků, z nichž dva byly komerční (American Elements, USA; Cerpotech, Norsko) a jeden syntetizovaný zde na VŠCHT Praha. Za účelem lisování bylo k práškům přidáno 5–7,5 hmotnostních % isopropanolu. Uniaxiální lisování trámeček probíhalo při tlaku 75 MPa. Vzorky byly následně vypáleny po dobu 2 hodin při teplotě 1100 °C a rychlosti ohřevu 100 °C/h. Z důvodu rozpustnosti KNN ve vodě byla pórovitost určena geometricky. Dále byl stanoven Youngův modul pomocí metody impulzní excitace. Experimentálně zjištěné hodnoty byly porovnány s předpověďmi a diskutovány v souvislosti s fázovým složením jednotlivých vzorků a výchozích prášků.

Vliv rychlosti proudění a složení taveniny na podpovrchovou a krčkovou korozi chromito-hlinitého žáromateriálu

Radek Pezl (B3)

Školitel: doc. Ing. Jaroslav Kloužek, CSc.

Important consideration during glass melting process is the integrity of the melting vessels, which require refractory lining that can withstand corrosive environment and high temperature. In this work we evaluate both the melt line (neck) and subsurface (bulk) corrosion of high chromium-aluminum refractory used for vitrification of nuclear waste, aiming to develop corrosion rate models as a function of flow rate, melt composition, and temperature. In our work, we use a dynamic plate test consisting of refractory slabs fixed in a rotating cylindrical platinum-rhodium crucible filled with 2,5 kg of molten glass. The melt velocity around the refractory slabs is regulated by the rotation speed. After 24 hours, the slabs are removed from the glass, embedded in epoxy resin, sectioned, and analyzed. In this work we found that the increase in melt velocity increases the subsurface corrosion rate, but that the neck (flux line) corrosion appears to be virtually independent of it, and evaluated the corrosion rate for different waste glass compositions. This work will continue by evaluating the effect of temperature and investigation of the refractory wear occurring by spalling, which can be caused by melt level changes and contact of cold feed slurry with hot refractory walls.



Průhledné keramické nanokompozity - studie rozptylu světla v infračervené oblasti spektra

Sofiia Zadnyprianska (B1)

Školitel: Ing. Soňa Hříbalová

V současnosti aktivně probíhá výzkum v oblasti transparentní keramiky, která má široké využití v oblasti laserů, raketových kopulí, optických čoček atd. Kromě klasické jednofázové transparentní keramiky, roste zájem i o transparentní keramické nanokompozity, tedy materiály, které kombinují dvě a více různých fází za účelem dosažení např. výjimečné mechanické odolnosti, ale zároveň vysoké průhlednosti. Dosažení vysoké průhlednosti je oproti klasické jednofázové transparentní keramice větší výzvou, protože přítomnost druhé fáze vede k rozptylu světla. Z tohoto důvodu je třeba přípravu a následnou mikrostrukturu těchto materiálů pečlivě řídit. Cílem této práce je proto prozkoumání vlivu rozptylu světla na průhlednost (transmitanci) v infračervené oblasti spektra v nanokompozitech na bázi Y_2O_3 -MgO. Zkoumán bude zejména vliv velikosti rozptylujících částic (o velikosti 0,14–1 μm) a jejich koncentrace (objemová frakce 10–50 %) v závislosti na vlnové délce světla (0,5–5,5 μm) pomocí modelování rozptylu světla Rayleigh-Gansovou aproximací. V rámci této práce bude navíc ukázáno, že Rayleigh-Gansova aproximace poskytuje výsledky velice blízké exaktní Mieově teorii, a tudíž je vhodným způsobem pro modelování rozptylu světla v tomto druhu systémů.

Pevný elektrolyt na základě skelných nanovláken

Klára Zahradníková (B3)

Školitel: doc. Dr. Ing. Martin Havlík Míka

Základem pevného elektrolytu je fosforečné sklo obsahující lithné ionty, které zajišťují jeho iontovou vodivost. Toto sklo bylo připraveno z uhličitanu lithného a hydrogenfosforečnanu amonného smíchaných v různých poměrech. Obě látky byly společně homogenizovány v třecí misce a následně taveny v elektrické peci při teplotě 1100 °C za vzniku meta- nebo orthofosforečnanu lithného (LiPO_3 , Li_3PO_4). Tavenina byla odlita a po vychladnutí rozemleta. Vzniklé částice o rozměrech v řádu mikronů byly dispergovány do roztoku tetraethyl orthosilikátu a polyvinylpyrrolidonu, případně s přídavkem LiCl , v ethanolu, a z těchto suspenzí byla metodou elektrospinningu tvořena vlákna. Byly zkoumány vlastnosti připravených elektrolytů a vzniklých vláken metodou ICP, konfokální mikroskopií a impedanční spektroskopií. Aktuální výzkum za podpory Škoda Auto a.s. je zaměřen na využití pevného elektrolytu v pevných bateriích elektromobilů. Tím se zvýší jejich bezpečnost, jelikož tento pevný elektrolyt je nehořlavý. Také se zlepší energetická hustota energie baterie a dojezdová vzdálenost automobilu při současném zkrácení doby nabíjení.

Anorganické nekovové materiály - MGR studenti

MÍSTO: NEUVEDENO

KOMISE

prof. Dr. Dipl.-Min. Willi Pabst (předseda)

Ing. Diana Horkavcová, Ph.D.

Ing. Jan Macháček, Ph.D.

PROGRAM

09:15 **zahájení**

[Bc. Richard Bursa](#) (M2, doc. Dr. Ing. Martin Havlík Míka)

Využití electrospinningu při přípravě nanovláknenných materiálů pro elektrody v Li-ion bateriích

[Bc. Jan Kunc](#) (M2, Ing. Richard Pokorný, Ph.D.)

Viscosity of transient glass-forming melt and its relation to foaming during batch-to-glass conversion

[Bc. Zuzana Poláková](#) (M1, doc. Dr. Ing. Martin Havlík Míka)

Dekorace povrchu skla s využitím barevných nanovláken

[Bc. Aleš Rozvoral](#) (M2, prof. Ing. Aleš Helebrant, CSc.)

Zpětné srážení křemičitanů při korozi skla

[Bc. Tereza Schreiberová](#) (M2, Ing. Helena Peňáková)

Interakce vysoce chemicky odolných skel s roztoky organických solí používaných ve farmacii

[Bc. Vojtěch Výborný](#) (M1, Ing. Helena Peňáková)

Porovnání vlivu organických a anorganických roztoků o stejném pH na farmaceutická skla

[Bc Jan Šrédí](#) (M1, Ing. Martina Šídlová, Ph.D.)

Vlastnosti cementových malt obsahujících odpadní sklo

Využití electrospinningu při přípravě nanovláknenných materiálů pro elektrody v Li-ion bateriích

Bc. Richard Bursa (M2)

Školitel: doc. Dr. Ing. Martin Havlík Míka

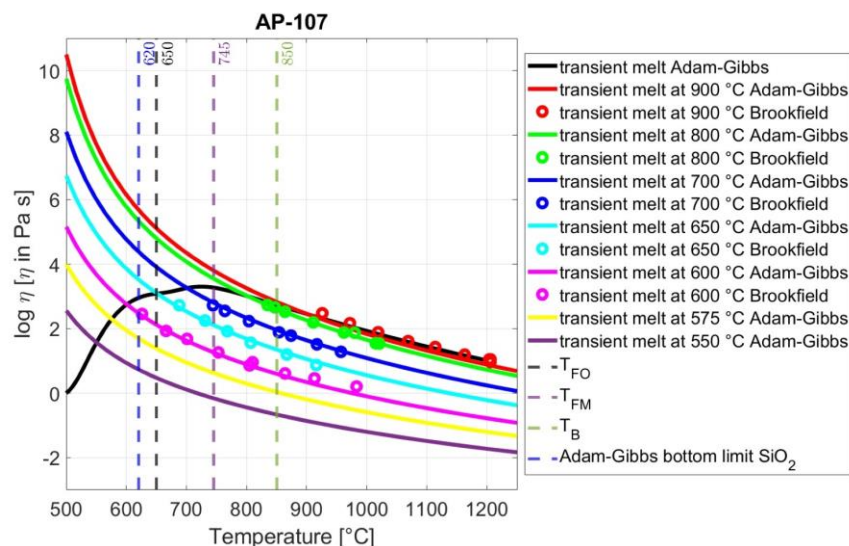
Electrospinning je sofistikovaná metoda výroby vláken pomocí elektrického napětí. Pomocí něj lze z polymerních prekurzorů připravit vlákna o poloměru několika stovek nanometrů. Podstatou je předání náboje kapalnému polymernímu prekurzoru, který pomocí vzniklého povrchového napětí tvoří vlákna. V našem experimentu byla testována možnost využití této metody při přípravě materiálu z polymerního prekurzoru v kombinaci s částicemi pro katodové a anodové vrstvy, které by mohly být využity v lithium iontové baterii. Nanovláknenná struktura těchto součástí je výhodná díky své pružnosti a odolnosti, která je velmi důležitá při nabíjecích a vybíjecích procesech. Tato pružnost a odolnost by mohla být klíčová při použití křemíku jako hlavního anodového materiálu místo komerčně používaného grafitu kvůli jeho objemové změně během cyklování baterie. Při optimalizaci vstupního materiálu byla testována viskozita a následně i rychlost toku polymerních prekurzorů s částicemi pro elektrody při samotném procesu vláknění. Pro určení výsledného složení katodového i anodového materiálu byla použita XRF a XRD analýza doplněná snímky z konfokálního a skenovacího elektronového mikroskopu.

Viscosity of transient glass-forming melt and its relation to foaming during batch-to-glass conversion

Bc. Jan Kunc (M2)

Školitel: Ing. Richard Pokorný, Ph.D.

This project targets one of the fundamental problems related to batch-to-glass conversion during melting, specifically, the estimation and mitigation of the intensity of primary foaming that occurs at the interface between the batch and melt. The primary foam acts as a thermal insulation barrier, adversely affecting heat transfer into the batch. This work focuses on the formation of transient glass-forming melt, with particular attention to the impact of transient melt viscosity and content on foaming. A simulated nuclear waste glass melter feed AP-107 was batched and heat-treated to various temperatures. The heat-treated samples were then analyzed using X-ray diffraction. The next step involved batching transient melt compositions corresponding to different temperatures, and measurements of the transient glass-forming melt viscosity by rotational viscometry. The measured values were then compared with predictions by the Adam-Gibbs viscosity model. It has been concluded that viscosity exhibits a local maximum – with increasing temperature, viscosity initially increases as silica particles are dissolved in the evolving transient melt. When silica dissolution is almost complete, transient melt viscosity reaches maximum (2005 Pa s) and then decreases as temperature increases.



Dekorace povrchu skla s využitím barevných nanovláken

Bc Zuzana Poláková (M1)

Školitel: doc. Dr. Ing. Martin Havlík Míka

V této práci je navržen vývoj alternativní metody pro vytvoření povrchové úpravy skla za pomoci barevných nanovláken. Navržený postup výroby by byl vhodnou alternativou k původnímu secesnímu dekoru. Z polymerních roztoků byla pomocí metody elektrospinningu připravena síť vláken obsahující šperkařský smalt, u kterých byly měřeny vybrané vlastnosti. Dále byly vyzkoušeny různé způsoby napařování kovových vrstev v peci změnou chemicko-fyzikálních vlastností nanášených solí kovu a technických parametrů jako je způsob umístění vzorku nad napařovací látkou. Vytvořená barevná vrstva je následně analyzována s důrazem na její optické vlastnosti. Z vyzkoušených metod byl nalezen nejvhodnější technický způsob dekoru a ten byl porovnán s originálním střepem sklárny Lötzt. Na základě získaných informací je zhodnoceno možné využití této metody při restaurování historických objektů.

Zpětné srážení křemičitanů při korozi skla

Bc. Aleš Rozvoral (M2)

Školitel: prof. Ing. Aleš Helebrant, CSc.

Jedním z málo prozkoumaných procesů koroze skla je zpětné srážení rozpuštěných složek. Vyluhováním iontů ze skla do roztoku a následným přesycením roztoku může dojít k tvorbě precipitátů, nejčastěji ve formě různých druhů křemičitanů. Vznik precipitátů je z hlediska obalových a farmaceutických skel jev nežádoucí, neboť může dojít ke kontaminaci obsahu. Cílem práce bylo pomocí modelových testů odhalit zpětnou precipitaci, následně charakterizovat precipitáty a vyhodnotit zmíněný děj pomocí analytických metod. Experimentální práce byla zaměřena na statické modelové testy loužení na skleněných drtích tří typů obalových skel. Dlouhodobé testy probíhaly loužením drtě v demineralizované vodě při laboratorní teplotě, krátkodobé byly prováděny za zvýšených teplot. Z výsledků vyplývá, že u jednotlivých druhů testovaných skel dochází ke kongruentnímu rozpouštění a zpětnému srážení křemičitanů. Produkty zpětného srážení byly objeveny jak u dlouhodobých testů při laboratorní teplotě, tak i u krátkodobých při zvýšených teplotách. Z XRD analýzy bylo zjištěno, že se jedná především o hlinitokřemičitany (zeolity).

Interakce vysoce chemicky odolných skel s roztoky organických solí používaných ve farmacii

Bc. Tereza Schreiberová (M2)

Školitel: Ing. Helena Peňáková

Skla určená pro chemii či farmacii mají obecně vysokou chemickou odolnost vůči anorganickým roztokům s pH blízkému neutrální hodnotě. Z literatury však vyplývá, že některé organické roztoky s uvedeným pH mohou mít zvýšený korozivní účinek na sklo. To by mohlo být problematické zejména v případě léčiv či roztoků, které se ve skleněných obalech sterilizují za zvýšených teplot. Předložená práce se proto zabývá sledováním vlivu šesti vybraných roztoků organických solí, používaných ve farmacii, na tři typy chemicky odolných skel (křemenné, borito-křemičité a neutrální). Skla ve formě drtí byla loužena do 4% vodných roztoků solí za podmínek standardní (1h, 98°C) a modelové (24h, 80°C) zkoušky, celistvé lékovky z neutrálního skla různých objemů (30–60ml) dále za podmínek standardní zkoušky (1h, 121°C). Ve výluzích byla sledována změna pH a koncentrace Si uvolněného ze skla (AAS). Výsledky ukázaly, že dochází k rozpouštění všech typů skel, nejvýrazněji se rozpouštělo jednosložkové křemenné sklo. U obou vícesložkových skel byla koroze významně nižší a srovnatelná. Nejagresivněji na všechny typy skel působil roztok citrátu draselného. Podobné účinky organických roztoků byly zjištěny i pro celistvé lékovky, různé objemy lékovek neměly významný vliv na množství Si ve výluzích.

Porovnání vlivu organických a anorganických roztoků o stejném pH na farmaceutická skla

Bc. Vojtěch Výborný (M1)

Školitel: Ing. Helena Peňáková

V současné době bývají léčiva složité kombinace organických a anorganických sloučenin, což klade vysoké požadavky na chemickou odolnost obalových materiálů, mezi které patří zejména sklo. Nežádoucí výluh složek ze skla či uvolňování pevných částic zkorodovaného povrchu skla do léčiva (delaminace) by mohly způsobit jeho znehodnocení. V literatuře je zmiňován korozivní účinek roztoků některých organických solí, zejména citrátů. Ty bývají ve farmacii používány jako antikoagulační činidla nebo jako stabilizátory pH. Práce se proto zabývá testováním 2 typů chemicky vysoce odolných léků komerční výroby do vodných roztoků citrátu sodného o různé koncentraci (1–20%) v porovnání s anorganickými roztoky o stejném pH (NaOH, fyziologický roztok). Loužení léků probíhalo za podmínek standardní zkoušky v autoklávu (1 h, 121 °C), resp. modelovými testy 1–60 dní při 80 °C. Ve výluzích byl stanoven Si (AAS) a sledovány případné produkty delaminace. Výsledky ukázaly, že v roztocích citrátu dochází oproti anorganickým roztokům k významnému rozpouštění obou typů farmaceutických léků, s rostoucí teplotou, zvyšující se koncentrací roztoků citrátu a delší dobou jejich působení se koncentrace Si ve výluzích zvyšovala. Delaminace povrchu léků za výše uvedených podmínek testů zjištěna nebyla.

Vlastnosti cementových malt obsahujících odpadní sklo

Bc Jan Šrédl (M1)

Školitel: Ing. Martina Šídlová, Ph.D.

Práce sleduje vliv přídatku odpadního skla na vlastnosti zkušebních maltových těles. Přestože je sklo poměrně dobře recyklovatelný materiál, vzniká při jeho recyklaci množství skla, které již nelze takto využít. Vzhledem k relativní inertnosti má odpadní sklo potenciál být využito jako náhrada za kamenivo, či jako minerální příměs. Takové využití odpadního skla je ovšem problematické kvůli vzniku alkalicko-křemičité reakce (ASR) mezi zrnem skla a cementem. Při alkalicko-křemičité reakci vzniká gel, který absorpcí vody zvětšuje svůj objem a narušuje tak strukturu materiálu. Připravená zkušební tělesa z odpadního skla, přírodního kameniva a cementu o rozměrech 25 mm × 25 mm × 285 mm byla vystavena urychlené dilatometrické zkoušce ASTM C 1260. Tělesa byla po dobu 28 dnů uložena v roztoku NaOH o koncentraci 1 mol/L při teplotě 80 °C. Po 14 dnech byla na základě dilatometrického měření vyhodnocena rizikovost přídatku odpadního skla v tělesech. Po ukončení dilatometrických zkoušek byly pomocí digitálního mikroskopu pořízeny snímky zkušebních těles. Na snímcích byl pozorován vznik trhlin vlivem ASR.

Restaurování a konzervování I

MÍSTO: NEUVEDENO

KOMISE

doc. Ing. Alexandra Kloužková, CSc. (předseda)

Ing. Zuzana Zlámalová Cílová, Ph.D

Ljuba Svobodová

MgA. Zita Brožková

Ing. arch. Jan Černohorský

PROGRAM

09:15 **zahájení**

[Lucie Eberlová](#) (B3, Ing. Zuzana Zlámalová Cílová, Ph.D.)

Rekonzervace gotické číše českého typu

[Tereza Kocincová](#) (B2, Ing. Zuzana Zlámalová Cílová, Ph.D.)

Restaurování novověké skleněné misky

[Eliška Pačesová](#) (B3, doc. Ing. Alexandra Kloužková, CSc.)

Rekonzervace středověkého hrnce z Pražského hradu

[Kateřina Tilleová](#) (B2, Ing. Pavla Dvořáková)

Konzervování-restaurování pravěké nádoby

[Ludmila Řeháková](#) (B3, Ing. Zuzana Zlámalová Cílová, Ph.D.)

Restaurování ornamentální vitráže s florálními motivy

[Nikola Škodová](#) (B3, Ing. Zuzana Zlámalová Cílová, Ph.D.)

Rekonzervace číše českého typu

Rekonzervace gotické číše českého typu

Lucie Eberlová (B3)

Školitel: Ing. Zuzana Zlámalová Cílová, Ph.D.

Restaurování rostlinné ornamentální vitráže -Předmětem práce bylo zrestaurování vitráže, na které byly v důsledku nevhodného uložení silné nánosy prachu, hlíny a organických nečistot. Některá skla byla polámana, či úplně chyběla a olověné profily již dále neplnily svou funkci. Cílem práce tedy bylo provést restaurátorský průzkum, navrhnout vhodné restaurátorské postupy a následně je realizovat. V rámci průzkumu byla provedena optická mikroskopie a rentgenová fluorescenční analýza, na jejichž základě byla určena míra poškození předmětu a chemické složení skel včetně barvicích oxidů. Navržené postupy restaurování poté zahrnovaly následující po sobě jdoucí body: demontáž olověné sítě, čištění skleněných segmentů, lepení prasklin ve sklech, tvorbu doplňků (včetně malby), skládání skleněných segmentů do olověných profilů, letování a finální čištění. Celý restaurátorský zásah byl průběžně fotograficky dokumentován.

Restaurování novověké skleněné misky

Tereza Kocincová (B2)

Školitel: Ing. Zuzana Zlámalová Cílová, Ph.D.

Předmětem práce bylo zrestaurování světle modré skleněné misky. Její vznik je odhadován do 1. poloviny 20. století. Výrobce není znám, nicméně se nabízí podobnost se sortimentem sklárny Heřmanova huť. Restaurátorským záměrem bylo slepit misku a doplnit menší ztrátu. Čištění bylo provedeno pomocí detergentu Tween 20 následované oplachem v demineralizované vodě. Pro analýzu chemického složení skla metodou EPMA byl pomocí skalpelu odebrán malý vzorek (ten byl připraven ve formě leštěného nábrusu). Před lepením předmětu byly hrany lomu očištěny ethanolem a miska byla slepena adhezivem HXTAL NYL-1. Fixace spoju byla provedena magnety separovanými od předmětu polymerní fólií. Ztráta byla doplněna pomocí adheziva HXTAL NYL-1 a barviva Orasol Dye odstínu Blue GN (Museum Services Corporation). Součástí práce byla dokumentace a doporučení uložení předmětu.



Rekonzervace středověkého hrnce z Pražského hradu

Eliška Pačesová (B3)

Školitel: doc. Ing. Alexandra Kloužková, CSc.

Předmětem této práce byla rekonzervace keramického středověkého hrnce pocházejícího z archeologických nálezů z Pražského hradu. Hrnec byl neglazovaný, vyráběný točením na kruhu a střepová hmota byla tenkostěnná a stabilní. Předmět byl restaurován v první polovině dvacátého století za použití, z dnešního pohledu, nevhodného adheziva a v kombinaci s nevhodnými podmínkami uložení došlo k rozpadu předmětu. Při převzetí se skládal z torza spodní části a volných střepů, jak keramických, tak sádrových. Po provedení restaurátorského průzkumu, jehož součástí byly analýzy chemického a mineralogického složení, byly fragmenty střepové hmoty nejprve podrobeny mokrému čištění vodou. Po vyhledání jejich vzájemné polohy byla celá nádoba slepena akrylátovou disperzí K 498. Ztráty byly doplněny dentální sádrou značky Velox®, čemuž předcházela dočasná separace vodním separátorem značky Lukopren a nakonec byly vytvořené sádrové doplňky retušovány tak, aby kopírovaly tvar nádoby. Historické sádrové doplňky byly kvalitní a v dobrém stavu, proto byly ponechány. V rámci zásahu byly použity výhradně reverzibilní materiály a celý proces provázela fotografická dokumentace. Důležitou součástí bylo také stanovení vhodných podmínek uložení.



Konzervování-restaurování pravěké nádoby

Kateřina Tilleová (B2)

Školitel: Ing. Pavla Dvořáková

Cílem práce byl konzervátorsko-restaurátorský zásah do pravěké nádoby z doby bronzové (1300 př. n. l.), která typově spadá do kultury popelnicových polí. Nádobu byla nalezena 21. 6. 2023 v obci Hořín ve stavu "in situ" a přenesena do laboratoře. Stav předmětu při převzetí byl narušen kořenovým systémem, který významně narušil stěny nádoby a přispěl ke zhoršení soudržnosti střepového materiálu. Nejprve byla nádoba vypreparována od okolní zeminy a antropologických nálezů. Poté bylo přistoupeno k restaurátorskému průzkumu, který zahrnoval kombinované čištění za pomoci špachtle a štětců a následné vlhčení míst s pevným nánosem zeminy. Během čištění byl předmět průběžně konsolidován za účelem zpevnění a zachování integrity celku pomocí disperzního konsolidantu Lascaux Hydro-grunt (50% vodný roztok). Předmět byl kontrolovaně rozebrán na jednotlivé části. Součástí průzkumu byla analýza chemického (XRF) a mineralogického složení (XRD) nekonsolidovaných střepů. Na základě analýz a v souladu s etickým přístupem k předmětu byla vybrána vhodná kombinace akrylátových adheziv (Lascaux 498 HV a Lascaux 303 HV v poměru 3:1), která byla použita s pomocí podpůrné aparatury ke slepení nádoby. Pro další uložení předmětu je nutné stanovit vhodné podmínky uložení zrestaurovaného předmětu.

Restaurování ornamentální vitráže s florálními motivy

Ludmila Řeháková (B3)

Školitel: Ing. Zuzana Zlámalová Cílová, Ph.D.

Vitráž vybraná pro restaurátorský zásah pocházela z přelomu 19. a 20. století a v minulosti byla součástí série kostelních oken v některém z plzeňských kostelů. Později byla umístěna ve sklepních prostorách restaurátorské dílny ateliéru Vitraj, kde byla poškozena při povodních. Olověná síť, zajišťující soudržnost vitráže, byla značně pokroucena a v pravé části vitráže chyběla kompletně, což narušilo celkovou stabilitu předmětu. Majoritní část skel byla rozlomena na několika místech a mnoho jich zcela chybělo. Povrch skla byl značně znečištěn prachovými částicemi a v důsledku biologické činnosti. Restaurátorským záměrem bylo vitráž očistit, kompletně vyměnit poškozený olověný rám, slepit zlomená a roztříštěná skla epoxidovým adhezivem Araldite 2020, vytvořit doplňky v místech chybějících skel s odpovídající sklomalbou, skleněné díly opětovně zasadit do olověné sítě a tu zaletovat. V rámci restaurátorského průzkumu byl hodnocen stav povrchu skleněných segmentů optickou mikroskopií a dále bylo stanoveno chemické složení skel metodou XRF (včetně určení barvicích iontů). V rámci práce byla obnovena celková integrita vitráže.

Rekonzervovace číše českého typu

Nikola Škodová (B3)

Školitel: Ing. Zuzana Zlámalová Cílová, Ph.D.

Předmětem rekonzervace byla číše českého typu z druhé poloviny 14. až první poloviny 15. století. Fragmenty této číše byly nalezeny roku 1968 ve studni na adrese Národní čp. 61/II, Nové město, Praha 1 během záchranného archeologického výzkumu. Předmět byl převzat v částečně slepeném stavu a dva fragmenty byly přilepeny na plexisklové podpěře. Pro analýzy byly odebrány vzorky původně použitých adheziv a z důvodu nenalezení spojitého profilu nádoby také vzorky skla jednotlivých fragmentů. Provedené analýzy také pomohly k určení vhodných pomocných materiálů k restaurátorskému zásahu. Restaurátorským záměrem, který schválil zadavatel, bylo rozlepení fragmentů v acetonových zábalech, jejich důkladné očištění acetonem a demineralizovanou vodou, následované slepením 40% roztokem Paraloidu B-72 v toluenu a v případě potřeby také vytvoření vhodné výztuže. Veškerá práce a zákroky byly provedeny v souladu s etikou restaurování za použití reverzibilních materiálů.

Restaurování a konzervování II

MÍSTO: NEUVEDENO

KOMISE

doc. Ing. Alexandra Kloužková, CSc. (předseda)

Ing. Zuzana Zlámalová Cílová, Ph.D

Ing. Šárka Msallamová, Ph.D.

Ljuba Svobodová

Ivan Houska

PROGRAM

10:45 **zahájení**

[Bc. Jindřich Dvořák](#) (M1, doc. Ing. Alexandra Kloužková, CSc.)

Analýza sekundárního přepalu gotických kachlů

[Simona Francová](#) (B4, doc. Ing. Alexandra Kloužková, CSc.)

Restaurování lužické keramiky převzaté in situ

[Maria-Luisa Fronková](#) (B4, doc. Ing. Alexandra Kloužková, CSc.)

Rekonzervace středověké trojnožky

[Šimon Jáchym Kotalík](#) (B2, Ing. Šárka Msallamová, Ph.D.)

Restaurování visacího zámku

[Jan Kulhánek](#) (B4, Ing. Šárka Msallamová, Ph.D.)

Restaurování držáku na přízi

[Emma Osifová](#) (B4, doc. Ing. Alexandra Kloužková, CSc.)

Rekonzervace renesančního džbánu s mramorováním

Analýza sekundárního přepalu gotických kachlů

Bc. Jindřich Dvořák (M1)

Školitel: doc. Ing. Alexandra Kloužková, CSc.

V souvislosti s rekonstrukcí Schwarzenberského paláce proběhl archeologický výzkum, v jehož rámci byly odkryty pozůstatky raně novověkých domů, které byly zničeny rozsáhlým požárem roku 1541. Analyzovaný soubor deformovaných torz kachlů pochází ze sondy jednoho z raně novověkých domů, který byl zasypán stavební destrukcí se stopami požáru. Deformované fragmenty byly předmětem výzkumu, jehož cílem bylo popsat projevy sekundárního přepalu keramické hmoty a případných povrchových úprav. Na základě vstupní charakterizace archeologického materiálu (XRF, XRD, STA a OM) byla vytvořena z reálné historické suroviny modelová hmota. Následným výpalem a simulovaným sekundárním přepalem byly připraveny vzorky, které byly použity k identifikaci možných procesů probíhajících během požáru. K hodnocení modelových vzorků byly použity stejné metody jako u vzorků historických. Interpretace výsledků vedla k posouzení vlivu požáru na základní parametry a vlastnosti kachlů včetně určení přibližných teplot, kterými prošly při výrobě a později při požáru.



Restaurování lužické keramiky převzaté *in situ*

Simona Francová (B4)

Školitel: doc. Ing. Alexandra Kloužková, CSc.

Náplní práce bylo restaurování keramické nádoby z mladší doby bronzové. Byla vyzdvížena r. 2013 v rámci rozsáhlého archeologického výzkumu při stavbě obchvatu Chrudimi v lokalitě s názvem Vestec II. Jednalo se o žárové pohřebiště lužické kultury s celkovým počtem 86 hrobů zahrnující velké množství keramiky. Nádoba byla přenesena do laboratoře ve formě *in situ*. Nalezený objekt byl vyplněn splavenou okolní půdou a dalšími organickými materiály z hrobu. Cílem práce bylo vytvořit čitelný a reprezentativní sbírkový předmět. Nejprve byly provedeny průzkumy stavu předmětu, které zahrnovaly analýzy chemického (XRF) a mineralogického složení (XRD) střeptové hmoty, stanovení parametrů střeptové hmoty a zdokumentování stavu materiálu metodou optické mikroskopie. Průzkum prokázal, že se jedná o nestabilní keramický materiál se značně pórovitou strukturou a vysokou nasákavostí. Restaurátorský zásah zahrnoval vypreparování střeptů z bloku zeminy, jejich umytí, vyhledání a následné lepení vodní akrylátovou disperzí K 498. Ztráty byly doplněny anorganickou výplňovou hmotou na bázi mletého mramoru s vodní akrylátovou disperzí K 498 pomocí otevřené formy. Závěrem byly navrženy vhodné podmínky pro výstavní účely i pro uložení předmětu v depozitáři. Celý postup byl doplněn fotodokumentací.



Rekonzervace středověké trojnožky

Maria-Luisa Fronková (B4)

Školitel: doc. Ing. Alexandra Kloužková, CSc.

Rekonzervace pozdně středověké, keramické, zevnitř glazované pánve na třech nožkách proběhla v restaurátorské laboratoři ARÚ AV ČR. Předmět byl nalezen při archeologickém průzkumu na dvoře špitálu sv. Antonína v Kanovnické ulici na Hradčanech. V minulosti byly fragmenty slepeny nevhodným adhezivem a došlo k poškození. Při převzetí byl předmět znečištěn prachem a zbytky zeminy, chyběla třetina misky s tvarovaným okrajem a můstkem na připojení nožky, fragment rukojeti se nedochoval. Zásah probíhal dle výsledků restaurátorského průzkumu (rentgenová fluorescenční spektrometrie prokázala použití olovnaté glazury, pod kterou byla optickou mikroskopií identifikována engoba včetně nečistot proniklých přes popraskanou glazuru, fázové složení určené pomocí rentgenové difrakce prokázalo teplotu výpalu do 950 °C, hodnoty kritérií hutnosti svědčí o střední pórovitosti a nasákavosti střepe). Při zásahu byly rozpojeny původní lepené spoje, fragmenty očištěny, opětovně slepeny vhodným adhezivem, ztráty doplněny sádkou pomocí otevřené i uzavřené formy, doplňky byly mechanicky retušovány, pak byla připojena třetí nožka a předmět dočištěn, na závěr byla provedena barevná retuš doplňků, proces byl fotograficky dokumentován.



Restaurování visacího zámku

Šimon Jáchym Kotalík (B2)

Školitel: Ing. Šárka Msallamová, Ph.D.

Tématem práce bylo restaurování a konzervace visacího zámku nalezeného v Holešově u Kroměříže, který se aktuálně nachází v soukromém vlastnictví a pochází z 17.-18. století. Danému období odpovídá zámek jak tvarem, tak typem mechanismu. Konstrukce zámku je čistě železná a spoje pájeny mědí. Předmět byl značně mechanicky poškozen. Horní část byla zcela oddělena a mechanismus vysypán ven. Celý zámek byl zevnitř silně napaden korozí, pravděpodobně kvůli proniknutí vody dovnitř. Zadní část zámku byla lokálně zcela zkorodována, což vedlo ke ztrátě soudržnosti materiálu a jeho perforaci v této části. Cílem zásahu bylo zprovoznit mechanismus zámku a zjistit míru poškození jeho částí. V rámci restaurátorského zásahu byl tedy zámek rozebrán a korozní produkty byly mechanicky očištěny. Byla zjištěna míra poškození jednotlivých komponentů mechanismu, a tyto komponenty byly očištěny a doplněny o chybějící části. V případě, že některé části chyběly úplně, byly nové části vyrobeny za použití původních postupů na základě uměleckohistorického průzkumu. Z odebraných vzorků byla provedena zkouška na přítomnost chloridů v korozních produktech a na základě jejich výsledků byl celý zámek ošetřen tanátem.



Restaurování držáku na přízi

Jan Kulhánek (B4)

Školitel: Ing. Šárka Msallamová, Ph.D.

Poster seznamuje s výsledky průzkumu, postupem restaurování a výroby doplňku uměleckého předmětu vyrobeného v 19. století z litiny, který pochází ze soukromé sbírky. Jde o předmět, který sloužil k umístění klubka při pletení a háčkování, aby se nezakutálelo. Jeho rozměry jsou 12x12x18 cm (š x h x v) a základní tvar předmětu je otevíratelná koule, osazená na podstavci čtvercového půdorysu. Dílo je opatřeno nažloutlým nátěrem na celém svém povrchu a místy zdobeno nátěry červené, zlaté a stříbrné barvy. Předmět byl při materiálovém průzkumu podroben SEM/EDS analýze, infračervené spektroskopii a byl zhotoven metalografický výbrus, na kterém byla pozorována struktura základního materiálu. Předmět byl zbaven korozních produktů, doplněn o chybějící část ornamentu (na žádost vlastníka), zaretušován a opatřen konzervačním nátěrem. Průzkumem pomocí RTG bylo zjištěno, že při ulomení ornamentu došlo k značnému poškození obou polokoulí předmětu, a to v podobě prasklin. Vzhledem k poškození bylo nutné zvýšit nároky na bezpečnou manipulaci s předmětem a byl vyroben úložný a ochranný obal.



Rekonzervace renesančního džbánu s mramorováním

Emma Osifová (B4)

Školitel: doc. Ing. Alexandra Kloužková, CSc.

Náplní práce byla rekonzervace keramického renesančního džbánu z archeologických nálezů vyzdvižených z výkopu v Kanovnické ulici čp. 73/IV v Praze. Rekonzervační práce probíhaly v Archeologickém ústavu AV ČR a charakterizace střepové hmoty byla provedena v laboratořích VŠCHT. Pro určení chemického složení keramické hmoty a glazury byla zvolena XRF analýza a pro určení mineralogického složení XRD analýza. Restaurátorský průzkum prokázal použití barevných olovnatých glazur na pórovitou střepovou hmotu. Původní džbán byl zhotoven běžnou technikou vytáčením na kruhu. Na vnější straně byl dekorován překrývajícími se barevnými glazurami, které byly nanесeny metodou tzv. mramorování. Předmět byl převzat slepený nekvalitním adhezivem. Proto bylo restaurátorským záměrem odstranit předcházející zákrok a předmět znovu zrestaurovat včetně barevné retuše sádrových doplňků. Džbán byl rekonzervován v souladu s restaurátorskou etikou. Na závěr byly definovány podmínky uložení rekonzervovaného předmětu.



Ústav chemie pevných látek

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Eva Bedrnová

SEZNAM SEKČÍ

1. [Analýza a vlastnosti léčiv](#)

Analýza a vlastnosti léčiv

MÍSTO: A31

KOMISE

prof. Ing. František Kovanda, CSc. (předseda)

prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc.

doc. Ing. Barbora Doušová, CSc.

doc. Dr. Ing. Michal Hušák

RNDr. Alexandr Jegorov CSc.

Ing. Michal Šimek, Ph.D.

Ing. Eva Bedrnová

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Žaneta Kratochvílová](#) (B3, doc. Ing. Barbora Doušová, CSc.)

Využití efektivních sorbentů z druhořadých a odpadních materiálů pro sorpci arsenu a olova

09:15 [Petr Adámek](#) (B3, prof. Ing. František Kovanda, CSc.)

Interkalace apixabanu do struktury Mg-Al hydrotalcitu

09:30 [Nadija Čuščakova](#) (B3, Ing. Jan Čejka, Ph.D.)

Strukturní analýza prasugrelu

09:45 [Michaela Picková](#) (B3, doc. Ing. Barbora Doušová, CSc.)

Stabilizace fosfátů a amonných iontů na biosorbentech

10:00 [Martina Střílková](#) (B3, Ing. David Koloušek, CSc.)

Hydratační schopnosti chemicky modifikovaného klinoptilolitu

10:15 [Bc. Tomáš Morys](#) (M2, Ing. Jan Čejka, Ph.D.)

Krystalizační screening imatinibu mesylátu

10:30 [Bc. Milan Angelis](#) (M2, doc. Ing. Barbora Doušová, CSc.)

Směsné materiály na bázi popílků pro adsorpci toxických iontů

10:45 [Bc. Janka Kladivíková](#) (M2, Ing. Václav Eigner, Ph.D.)

Príprava farmaceutických solí isothiouronia pomocou iónových výmen

11:00 [Bc. František Fňukal](#) (M2, doc. Dr. Ing. Michal Hušák)

Nové funkce programu checkCIF-DFT pro verifikaci krystalové struktury

Využití efektivních sorbentů z druhořadých a odpadních materiálů pro sorpci arsenu a olova

Žaneta Kratochvílová (B3)

Školitel: doc. Ing. Barbora Doušová, CSc.

Arsen (As) a olovo (Pb) jsou prvky, které do životního prostředí pronikají jak přirozeně, tak zejména lidskou činností, například při spalovacích procesech nebo při zpracovávání rud. Jejich zvýšený výskyt ve vodách a půdě představuje velký problém především kvůli jejich vysoké akutní toxicitě a kvůli jejich tendenci se akumulovat v půdě, vodách i organismech. Tato práce se zabývá testováním a zhodnocením účinnosti vybraných druhořadých a odpadních materiálů pro sorpci arsenu jako As^{V} a olova jako Pb^{2+} z modelových roztoků o koncentraci 0,5 mmol/l. Jako sorbent byl použit klinoptilolit, betonový kal, cihelný prach, kal z výroby umělého kamene a elektrárenské popílký ze spalování biomasy a uhlí. Na základě předběžných experimentů byly zvoleny optimální navážky pro sorpční řady. Zbytkové koncentrace iontů v roztocích byly analyzovány UV-VIS spektrofotometrií a Atomovou absorpční spektrometrií. Výsledky sorpčních experimentů byly zpracovány Langmuirovým modelem pro výpočet adsorpčních parametrů (teoretické sorpční kapacity a konstanty adsorpčního děje).

Interkalace apixabanu do struktury Mg-Al hydrotalcitu

Petr Adámek (B3)

Školitel: prof. Ing. František Kovanda, CSc.

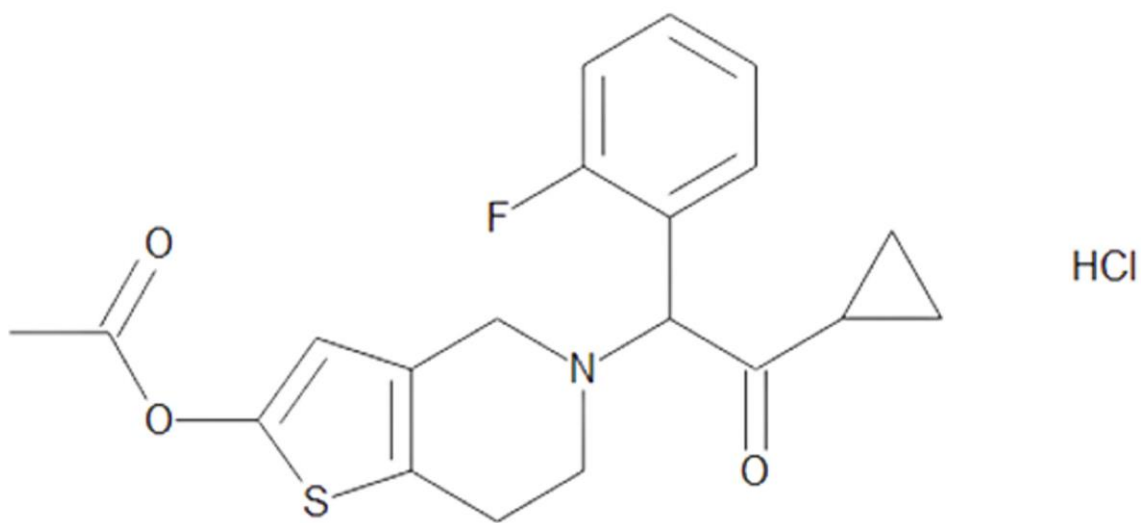
Apixaban je neionogenní léčivo velmi špatně rozpustné ve vodě, které se řadí mezi antikoagulanty snižující srážlivost krve. Cílem práce bylo zabudovat apixaban do anorganického nosiče a ovlivnit tak jeho zpětné uvolnění ve vodném prostředí. Jako hostitelská struktura byl použit Mg-Al hydrotalcit v dusičnanové formě připravený koprecipitační reakcí pod ochrannou dusíkovou atmosférou. Nejprve byl připraven komplex apixabanu s karboxymethyl- β -cyklodextrinem (CMCD) společným odpařením ze směsi roztoku léčiva v methanolu a CMCD ve vodě. Interkalace komplexu pak byla provedena z roztoku ve vodě aniontově-výměnnou reakcí s Mg-Al-NO₃ hydrotalcitem. Interkalát byl připraven také rehydratační reakcí, kdy do roztoku komplexu ve vodě byl přidán směsný oxid Mg-Al získaný tepelným rozkladem Mg-Al-NO₃ hydrotalcitu. Interkalace organických složek do mezivrstev hostitelské struktury byla potvrzena práškovou rentgenovou difrakcí, kdy bylo pozorováno zvětšení bazální mezivrstevné vzdálenosti z 0,88 nm, charakteristické pro Mg-Al-NO₃ hydrotalcit, na 2,24 nm u interkalovaných produktů.

Strukturní analýza prasugrelu

Nadija Čuščakova (B3)

Školitel: Ing. Jan Čejka, Ph.D.

Znalost struktury léčivé látky je zásadním kritériem ve farmaceutickém průmyslu. Cílem práce je nalezení a charakterizace nových forem prasugrelu pomocí krystalizačního screeningu. Prasugrel je léčivý přípravek používaný k prevenci trombózy, patří mezi antikoagulanty. Jsou známy dva polymorfy prasugrelu hydrochloridu prokázané práškovou difrakcí a jeden polymorf báze. Pro stanovení zdánlivé rozpustnosti Prasugrelu hydrochloridu bylo použito 15 rozpouštědel. Dobře rozpustné bylo léčivo v alkoholech. Krystalizace byla provedena volným odpařováním nebo za zvýšené teploty z 5 vybraných rozpouštědel. Krystalické produkty byly analyzovány metodou rentgenové difrakce na monokrystalu.



Prasugrel hydrochlorid

Stabilizace fosfátů a amonných iontů na biosorbentech

Michaela Picková (B3)

Školitel: doc. Ing. Barbora Doušová, CSc.

Cílem práce je studium možného zachytu amonných a fosforečnanových iontů z vody na přírodních biosorbentech. Amonné a fosforečnanové ionty způsobují ve vyšších koncentracích nepřírozenou eutrofizaci vod - nadměrné obohacování o živiny, které může vést až k rozvrácení ekosystémů. Pro tuto práci byly z přírodních materiálů vybrány: biochar, standardní jílovitohlinitá půda, dřevný derivát po studené destilaci a krmné droždí. Adsorpční experimenty byly provedeny s modelovými roztoky simulujícími koncentrace amonných a fosforečnanových iontů v odpadních vodách, kdy koncentrace amonných iontů byla $2 \text{ mmol} \cdot \text{l}^{-1}$ a fosforečnanů $0,5 \text{ mmol} \cdot \text{l}^{-1}$. Optimální navážky sorbentů pro sorpční řady byly zvoleny na základě předběžných zkoušek. Zbytkový obsah sledovaných iontů v roztoku byl stanoven pomocí UV-Vis spektrofotometrie. Výsledky byly proloženy linearizovaným tvarem Langmuirovy adsorpční izotermy, z její rovnice pak byly vypočítány adsorpční parametry jednotlivých biosorbentů.

Hydratační schopnosti chemicky modifikovaného klinoptilolitu

Martina Střílková (B3)

Školitel: Ing. David Koloušek, CSc.

Přírodní zeolit klinoptilolit je mikroporézní krystalický aluminosilikát, který se omezeně používá při adsorpci vody. Důvodem je jeho komplikovaná struktura kanálkového systému a především poměr mezi křemíkem a hliníkem na úrovni hodnoty 5. Klinoptilolit tedy obsahuje množství kompenzujících kationtů úměrné poměru Si/Al , které je zodpovědné za sorpci vázané vody. Cílem této práce byla příprava zeolitů vhodnějších pro adsorpční využití. Jednou z k tomuto účelu využívaných možností je alterace klinoptilolitu v roztoku hlinitanu sodném při teplotě laboratoře. Bylo prokázáno, že klinoptilolit je v alkalickém prostředí nestabilní a ochotně přechází na směs zeolitu A, zeolitu X případně zeolitu P. Tyto formy mají díky své struktuře a složení skeletu lepší adsorpční charakteristiky.

Krystalizační screening imatinibu mesylátu

Bc. Tomáš Morys (M2)

Školitel: Ing. Jan Čejka, Ph.D.

Imatinib mesylát je cytostatikum sloužící k léčbě leukémie a zhoubných nádorů v gastrointestinálním traktu. Experimenty byly zaměřeny na přípravu farmaceutických solí imatinibu s využitím alkalických solí organických látek, jež sloužily jako zdroj protiiontů. Krystalizace byla provedena volným odpařením rozpouštědla. Z roztoku v methanolu a v destilované vodě se podařilo připravit vždy po 14 produktech, ve směsi methanol/destilovaná voda bylo připraveno 11 produktů. Krystalické produkty byly následně analyzovány práškovou rentgenovou difrakcí a experimentální výsledky byly porovnány s teoretickými záznamy dosud známých forem imatinibu a použitých solí. V případě, že byly připraveny monokrystaly (7 vzorků), byly mřížkové parametry těchto forem stanovené na monokrystalovém rentgenovém difraktometru.

Směsné materiály na bázi popílků pro adsorpci toxických iontů

Bc. Milan Angelis (M2)

Školitel: doc. Ing. Barbora Doušová, CSc.

Popílký představují skupinu odpadních produktů vznikajících při spalování pevných paliv. Ačkoliv nacházejí uplatnění například ve stavebnictví jako příměsi do betonu či při výrobě cihel, s přihlédnutím k jejich vyprodukovanému množství je v rámci udržitelného rozvoje vhodné sledovat další možnosti jejich využití. Vzhledem k příznivým vlastnostem těchto materiálů, zejména vysokému specifickému povrchu, se nabízí možnost jejich využití jako přísad do běžných adsorpčních materiálů (aluminosilikátů) pro zlepšení jejich sorpčních vlastností. K adsorpčním experimentům byly vybrány dva elektrárenské a jeden teplárenský popílek, kdy byly připraveny směsi těchto popílků s aluminosilikáty v poměru 1:1, přičemž byly využity tři komerčně dostupné aluminosilikáty: sedlecký kaolin, bentonit a klinoptilolit. Tyto aluminosilikáty sloužily zároveň jako referenční materiál pro vyhodnocení experimentů. Pro sorpční experimenty byly připraveny modelové roztoky toxických iontů AsO_4^{3-} a Pb^{2+} o koncentraci $0,5 \text{ mmol} \cdot \text{l}^{-1}$ simulující silně kontaminované vodné prostředí. Adsorpce na zmíněné materiály probíhala za laboratorní teploty při reakční době 24 hodin. Poté byl stanoven zbytkový obsah iontů v roztocích pomocí UV-VIS spektrofotometrie a atomové absorpční spektrometrie a vyhodnocena účinnost adsorpce.

Príprava farmaceutických solí isothiouronia pomocou iónových výmen

Bc. Janka Kladivíková (M2)

Školiteľ: Ing. Václav Eigner, Ph.D.

Cieľom tejto práce, je overiť vhodnosť využitia výrazného rozdielu rozpustností bromidu sodného a solí isothiouronia s karboxylovými kyselinami, pri použití vody ako rozpúšťadla, na prípravu farmaceutických solí isothiouronia. Metodika práce spočíva vo výmene bromidového aniontu v soliach isothiouronia pomocou jednoduchej aniónovej výmeny so sodnými soľami organických kyselín, a následná analýza pripravených kryštálov solí pomocou vhodných analytických metód. Pre analýzu boli konkrétne zvolené metódy monokryštálovej RTG difraktometrie a Ramanova spektroskopie. Soli isothiouronia nachádzajú svoj potenciál vo farmaceutickom priemysle najmä vďaka antagonistickému účinku na niektoré izoméry syntázy oxidu dusnatého – NOS, z čoho má najväčší význam inhibičný efekt na aktivitu iNOS (inducible nitric oxide synthase). Vďaka tejto ich vlastnosti majú potenciál v liečbe niektorých typov rakoviny, kardiogénneho šoku a zápalových ochorení.[1] Doposiaľ sa podarilo úspešne vyriešiť štruktúrne modely štyroch solí isothiouronia s aniónom organickej kyseliny pomocou monokryštálovej RTG difraktometrie.

1. Southan, G.J., C. Szabó, and C. Thiemermann, *Isothioureas: potent inhibitors of nitric oxide synthases with variable isoform selectivity*. British Journal of Pharmacology, 1995. 114(2): p. 510-516.

Nové funkce programu checkCIF-DFT pro verifikaci krystalové struktury

Bc. František Fňukal (M2)

Školitel: doc. Dr. Ing. Michal Hušák

Při řešení krystalové struktury může výpočet geometrické optimalizace založený na teorii funkcionálu elektronové hustoty (DFT) poskytnout cennou alternativní informaci vhodnou k posouzení správnosti experimentálního výsledku. Výpočet je vhodný pro ověření problematických výsledků strukturní analýzy, zejména pak výsledků rentgenové práškové difrakční analýzy. Práce navazuje na předchozí práci, ve které byl vyvíjen program poskytující grafické rozhraní a umožňující provedení DFT výpočtů prostřednictvím DFT programů CASTEP a Quantum ESPRESSO. Práce se zabývá rozšířením vyvíjeného programu o nové funkce týkající se studia krystalových forem sůl/kokrystal a o nové funkce zabývající se hodnocením správnosti experimentálních výsledků. Dále byl program rozšířen podporou kvantově-chemického programu ORCA, který umožňuje provedení DFT výpočtů v neperiodickém prostředí narozdíl od již podporovaných DFT programů.

Ústav organické chemie

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.

Ing. Michal Himl, Ph.D.

SEZNAM SEKČÍ

1. [Organická chemie bakalářská B1](#)
2. [Organická chemie bakalářská B2](#)
3. [Organická chemie magisterská M1](#)
4. [Organická chemie magisterská M2](#)
5. [Organická chemie magisterská M3](#)
6. [Organická chemie magisterská M4](#)

Organická chemie bakalářská B1

MÍSTO: LABORATOŘ A

KOMISE

doc. Dr. Ing. Jana Hodačová (předseda)

doc. Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D. - tajemník

Ing. Václav Kozmík, CSc.

Ing. Jiří Tůma, Ph.D.

Ing. Jan Kulička (Apigenex)

Ing. Michal Maryška, Ph.D. (Santiago)

PROGRAM

09:15 [Marek Novák](#) (B3, doc. Ing. Michal Kohout, Ph.D.)

Syntéza chirálních fotosensitivních surfaktantů pro magnetické nanočástice

09:30 [Vít Novotný](#) (B2, Ing. Petra Ménová, Ph.D.)

Synthesis of chromone-based DC-SIGN inhibitors

09:45 [Anna Velebová](#) (B3, prof. Andrea Brancale, Ph.D.)

Synthesis of Methyl di-N,N'-diacetyllactosaminide via Stereoselective Chemical Glycosylation

10:00 [Vít Bechynský](#) (B3, Ing. Aleš Machara, Ph.D.)

Model for PROTAC-based targeting of influenza polymerase

10:15 Coffee Break

10:30 [Matúš Tomčo](#) (B3, Ing. Petr Beier, Ph.D.)

Strain-promoted [3+2] cycloaddition of cyclic alkynes with fluorinated azides

10:45 [Monika Nešněrová](#) (B3, Ing. Ondřej Kunderát, Ph.D.)

Syntéza ligandů pro multivalentní interakce s galektiny

11:00 [Jakub Janáč](#) (B2, Ing. Petra Cuřínová, Ph.D.)

Hit expansion on novel antiviral compounds: investigating the replacement of a sulphonamide linker with an amine

11:15 [Vojtěch Boháček](#) (B3, Ing. Jiří Tůma, Ph.D.)

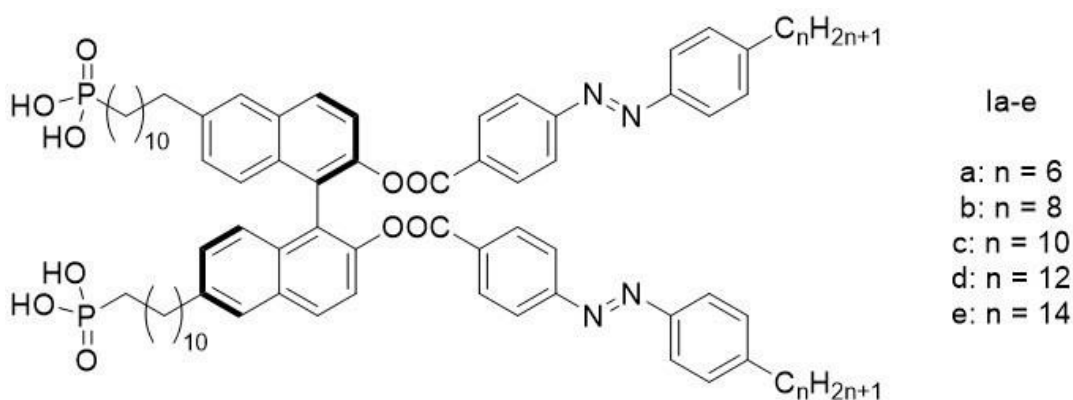
Syntéza a studium vlastností nové generace opticky aktivních spiropyranových fotopřepínačů

Syntéza chirálních fotosensitivních surfaktantů pro magnetické nanočástice

Marek Novák (B3)

Školitel: doc. Ing. Michal Kohout, Ph.D.

Cílem práce je příprava speciálních surfaktantů, které po navázání na magnetické nanočástice kobalt ferritu (CoFe_2O_4), předají své vlastnosti uspořádané achirální struktuře kapalných krystalů (mesofázi). Surfactant byl navržen tak, aby ve své struktuře obsahoval chirální a fotosenzitivní složku. Zavedením do kapalně-krystalické matrice tak dojde k indukování chirálního uspořádání, zároveň se celý systém stane citlivým na UV záření a získá magnetické vlastnosti propůjčené nanočásticemi. Vzniklou chirální mesofázi pak bude možné ovlivnit mechanicky, magneticky, světlem i elektrickým polem, což je v případě uspořádaných tekutin zcela unikátní fenomén. Jako chirální stavební prvek dopantu použijeme (*R*)-1,1'-bi-2-naftol (BINOL). Fotosenzitivní vlastnosti zajistí azoskupina, která při absorpci UV záření reverzibilně změní konfiguraci dvojné vazby z *E* na *Z* a tím dojde k rozvolnění struktury mesofáze. Surfactanty se pak liší v délce alkoxylových řetězců ramen obsahujících azoskupinu (Obr. 1).

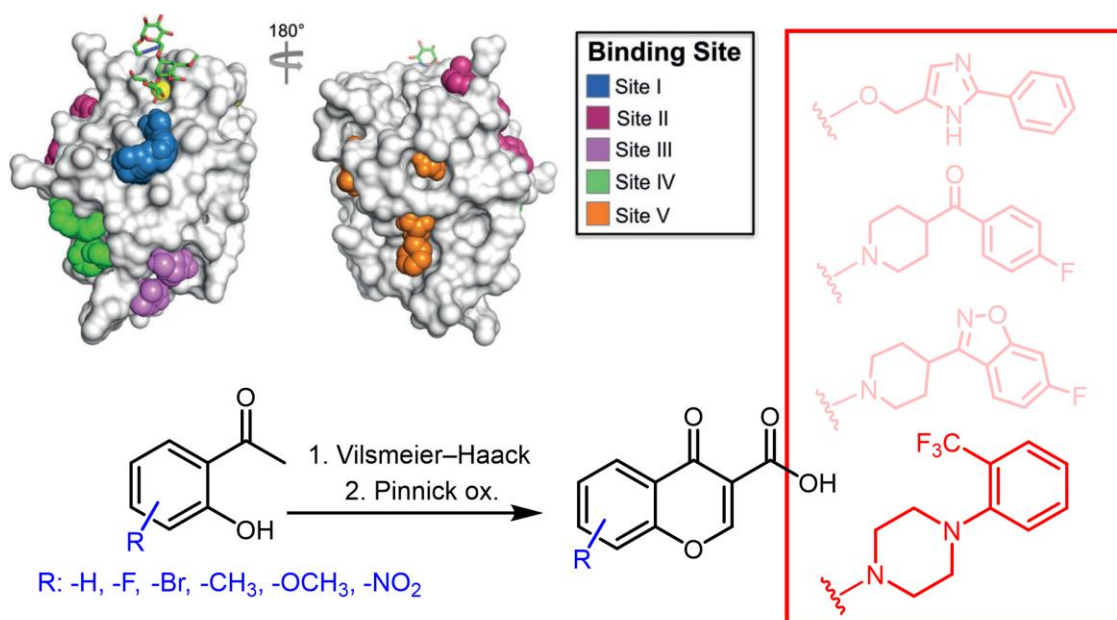


Synthesis of chromone-based DC-SIGN inhibitors

Vít Novotný (B2)

Školitel: Ing. Petra Ménová, Ph.D.

DC-SIGN is an immune system receptor important in the processes of antigen presenting, but also subject to misuse by many pathogens (e.g., HIV). Exploiting the medicinal potential of DC-SIGN is challenging due to the shallow and hydrophilic nature of the receptors' primary carbohydrate binding site. A pioneer study of secondary binding sites was performed by Rademacher et al. These secondary sites are less hydrophilic and could interact with non-carbohydrate drug-like molecules. In continuity with our previous research on quinolone derivatives as DC-SIGN inhibitors, my work focuses on the synthesis and bioactivity evaluation of chromone derivatives. The synthetic route begins with the Vilsmeier–Haack reaction of substituted 2-hydroxyacetophenone, forming the chromene-3-carbaldehyde core. Using the Pinnick oxidation, the aldehyde is then converted to an acid. Subsequently, nucleophilic fragments with suggested DC-SIGN affinity will be coupled; from these, 1-(2-(trifluoromethyl)phenyl)piperazine has already been tried. The affinity evaluation of the synthesized chromone-based compounds is in progress in Prof. Rademacher's group in Vienna.

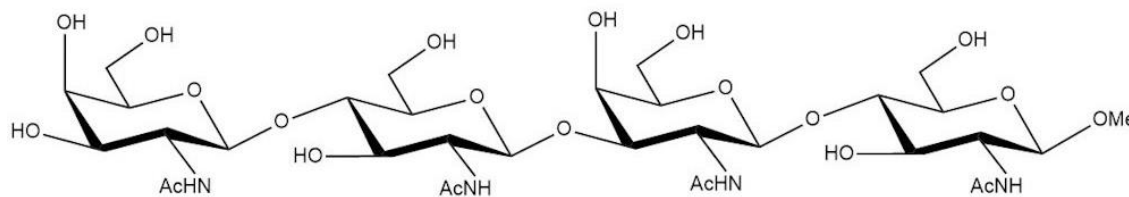


Synthesis of Methyl di-*N,N'*-diacetyllactosaminide via Stereoselective Chemical Glycosylation

Anna Velebová (B3)

Školitel: prof. Andrea Brancale, Ph.D.

Galectins are family of 15 biologically active proteins, commonly found in human tissues. The specific inhibition of human galectins has a vast pharmacological potential. Especially the inhibition of human galectin-3 (Gal-3) is desirable because of its direct link to tumour genesis and other cancer related processes. Even though all β -galactosides are Gal-3 ligands in general, previous study has shown that Gal-3 recognise *N,N'*- β -diacetyllactosamine epitope with high selectivity compared to other galectins. In this work, we describe a partial synthesis of novel tetra-saccharide galectin inhibitor with di-*N,N'*- diacetyllactosaminide epitope. The synthesis of the target compound consists of the preparation of suitably protected monomeric units and their connection via stereoselective chemical glycosylation. The initial synthetic plan had to be modified several times due to the unexpected issues with reactivity or selectivity which led to a series of dead ends. Such dead ends however illustrated the complexity of oligosaccharide synthesis and provided valuable insight into the reactivity of synthetic intermediates going beyond current state-of-the-art.



Target structure: Methyl di-*N,N'*-diacetyllactosaminide

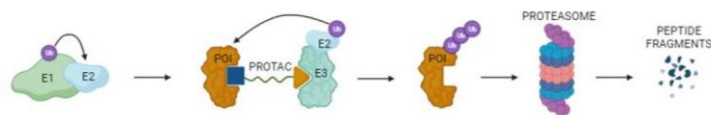
Model for PROTAC-based targeting of influenza polymerase

Vít Bechynský (B3)

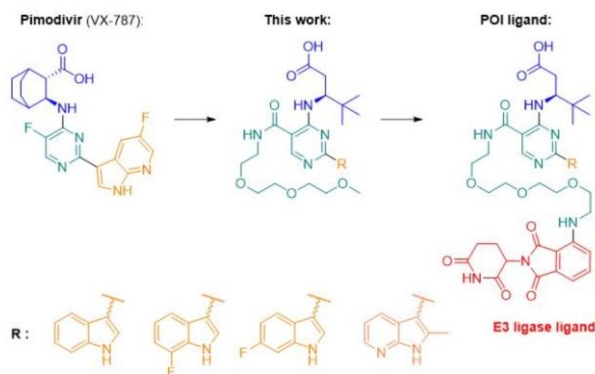
Školitel: Ing. Aleš Machara, Ph.D.

Proteolysis targeting chimeras (PROTACs) provide a novel approach for specific protein degradation. This emerging field has proven its therapeutic potential over the past few years. PROTACs consist of two main parts: Protein of interest (POI)-binding and E3 ligase-binding. The mode of action is driven by the proximity effect, where the PROTAC links the POI and the E3 ligase closely together resulting in polyubiquitination of said POI leading to subsequent proteasome mediated degradation. This mechanism provides many benefits over the standard inhibition model such as catalytic properties, ability to target undruggable proteins and higher resistance to mutations. Antiviral PROTACs thereby present a different perspective for fighting viral infections. This fact led to an opportunity to develop a PROTAC-based model for targeting the influenza virus, namely its polymerase. This project focuses on the PB2 subunit responsible for cap-binding, a process crucial to viral protein expression. Herein, we developed an experimental and synthetic approach for synthesis of derivatives similar to the successful small-molecule inhibitor for PB2 (VX-787) with marginally worse activity, followed by the selection of the most suitable one for the final PROTAC and investigation of its activity.

Figure 1:



Scheme 1:

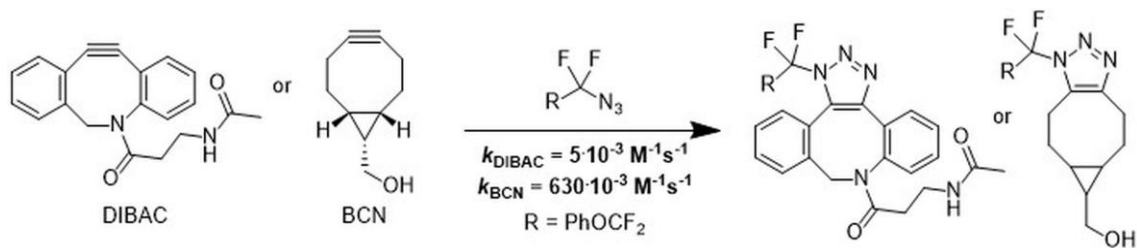


Strain-promoted [3+2] cycloaddition of cyclic alkynes with fluorinated azides

Matúš Tomčo (B3)

Školitel: Ing. Petr Beier, Ph.D.

Strain promoted azide-alkyne cycloaddition (SPAAC) is an important tool for biorthogonal chemistry – bioconjugations, bioimaging and even drug delivery. For its application, the reaction needs to be selective, fast, and most importantly biocompatible. In our group we study the preparation and reactivity of new stable α -fluorinated azides. The aim of this work is to show that α -fluorinated azides can be used as reagents in SPAAC. Their reactivity with cyclooctyne derivatives DIBAC or BCN was investigated, and the reaction rate constants were determined by IR monitoring. Moreover, the analogous nonfluorinated azide was also studied for a reactivity comparison. Lastly the impact of water, buffers, and common biomolecules, such as glutathione and lysine, on the stability of α -fluorinated azides was studied to ascertain their biocompatibility.



Syntéza ligandů pro multivalentní interakce s galektiny

Monika Nešněrová (B3)

Školitel: Ing. Ondřej Kunderát, Ph.D.

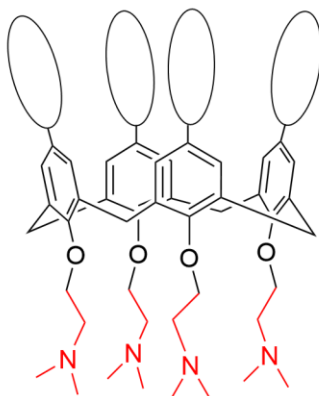
Galektiny jsou molekuly patřící do skupiny lektinu, což jsou proteiny mezi jejichž vlastností patří schopnost vázat β -galaktosidy či oligosacharidy zakončené β -D-galaktózou. Toto navázání může následně ovlivňovat řadu biologických procesů, jako je například apoptóza či regulace imunitního systému. Galektiny také figurují v různých chorobách, jako jsou záněty, srdeční onemocnění či dokonce rakovina.

Cílem práce je syntéza glykocalixarenů, kdy postranní řetězce calixarenů, nesou ligandy obsahující β -D-galaktózový motiv. Takto vytvořené multivalentní systémy by měly mít vysokou afinitu ke galektinům, a tak působit jako jejich inhibitory. V porovnání s předchozími glykocalixareny jsou tyto calixareny modifikovány dialkylaminoethylovými skupinami ($R_2NCH_2CH_2-$), které zvyšují rozpustnost v biologických systémech, jak bylo ukázáno na derivátu samotného calixarenu s tímto uskupením, kdy se navíc zjistil jeho inhibiční účinek růstů nádorů hlavy a krku na myších modelech.

Zjednodušené znázornění našeho multivalentního systému (glykocalixaren):



: část nesoucí sacharidovou skupinu

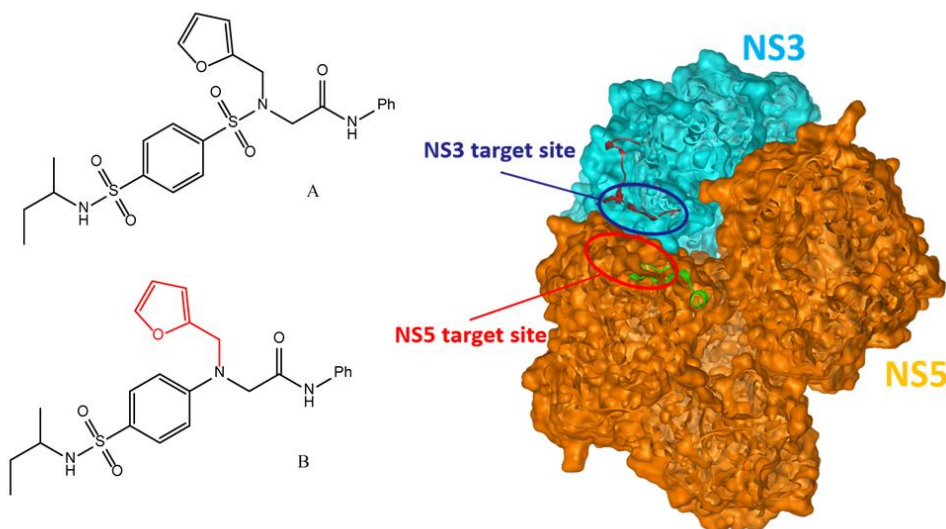


Hit expansion on novel antiviral compounds: investigating the replacement of a sulphonamide linker with an amine

Jakub Janáč (B2)

Školitel: Ing. Petra Cuřínová, Ph.D.

Dengue is a mosquito-borne viral disease causing an estimated 100 million infections per year. The development of antivirals against dengue is still in its early stages. Inhibition of protein-protein interactions in viral replication complexes is a promising strategy to disrupt viral replication. NS3 and NS5 complex plays a vital role in the dengue life cycle and its structure is conserved throughout other dengue serotypes, which makes it an attractive target for broad-spectrum antivirals. Docking-based virtual screening of 1 million compounds revealed 30 possible small molecules suitable for disrupting the NS3/NS5 complex. Further in-vitro analysis showed exceptional activity of sulphonamide compound A. Substitution of the sulphonamide group with an amine should bring multiple benefits, such as shortening the synthetic route or stabilization of the compound. Moreover, it should give us clues about the role/necessity of the sulphonamidic group in the biological activity of the original hit compound. The goal is to prepare compound B via 4-step synthesis and develop analogues using different heteroaryl substituents in the highlighted position.

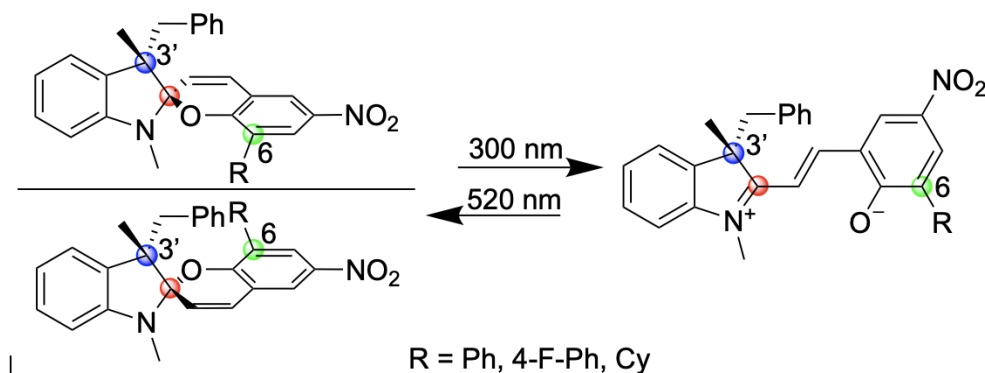


Syntéza a studium vlastností nové generace opticky aktivních spiropyranových fotopřepínačů

Vojtěch Boháček (B3)

Školitel: Ing. Jiří Tůma, Ph.D.

Spiropyrany jsou heterocyklické fotochromní sloučeniny schopné přecházet mezi nízkoopární spiroformou a otevřeným, zwitteriontovým merocyaninem (viz. obr.). Právě díky této dramatické změně nejen své geometrie, ale především polarity, našly spiropyranové fotopřepínače již řadu aplikací v moderních materiálech. Soudobý trend ve výzkumu chytrých materiálů často zahrnuje implementaci chiralidy, která umožňuje vznik orientovaných domén materiálu, a tím otevírá prostor pro zcela nové, často neočekávané aplikace. Spiropyrany jsou ve své povaze látky chirální díky asymetrickému spirocentru. Avšak příprava opticky čistého spiropyranového fotopřepínače je prakticky nedosažitelná, jelikož spiropyranu podléhají spontánní racemizaci skrze otevřenou merocyaninovou formu. V naší pracovní skupině se věnujeme přípravě derivátů spiropyranu s pomocným centrem chiralidy v poloze 3'. Toto centrum řídí rovnováhu spontánního zavírání merocyaninové formy za vzniku dvou epimerů, kde je v ideálním případě vznik jednoho z nich zcela potlačen, a tím získán opticky čistý spiropyran. V rámci této práce byly připraveny tři modelové fotopřepínače na bázi spiropyranu s centrem chiralidy v poloze 3' a prodlužujícím ramenem v poloze 6. Cílové sloučeniny byly studovány pomocí NMR a UV-Vis spektroskopie.



Organická chemie bakalářská B2

MÍSTO: A278E

KOMISE

prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc. (předseda)

Ing. Eva Svobodová, Ph.D. - tajemník

prof. Ing. Ivan Stibor, CSc.

Ing. Martin Krupička, Ph.D.

Dr. rer. nat. Ing. Jiří Svoboda (Kapaji)

Ing. Jiří Vokál, Ph.D. (Lach-Ner)

PROGRAM

09:15 [Kristián Schwan](#) (B3, prof. Andrea Brancale, Ph.D.)

Synthesis and NMR structure elucidation of new tetrahydroquinoxaline derivatives as NMAT2 activators

09:30 [Pavel Říkovský](#) (B2, Mgr. Martin Hadzima)

Příprava makrocyclických analogů pepstatinu A

09:45 [Eliška Marková](#) (B3, Ing. Jiří Tůma, Ph.D.)

Studium interakce spiropyranových přepínačů s α -aminokyselinami

10:00 [Miroslav Stroka](#) (B3, Dr. habil. Ullrich Jahn)

Towards the total synthesis of ampelopsin F

10:15 Coffee Break

10:30 [Adam Kleman](#) (B2, Ing. Petr Beier, Ph.D.)

Synthesis of 1-fluoroalkylisoquinoline derivatives

10:45 [Lenka Vondráčková](#) (B3, Ing. Petra Cuřínová, Ph.D.)

Synthesis of aromatic amines through the rearrangements of thiocarbonyl intermediates.

11:00 [Karolína Roháčková](#) (B3, Ing. Michal Himl, Ph.D.)

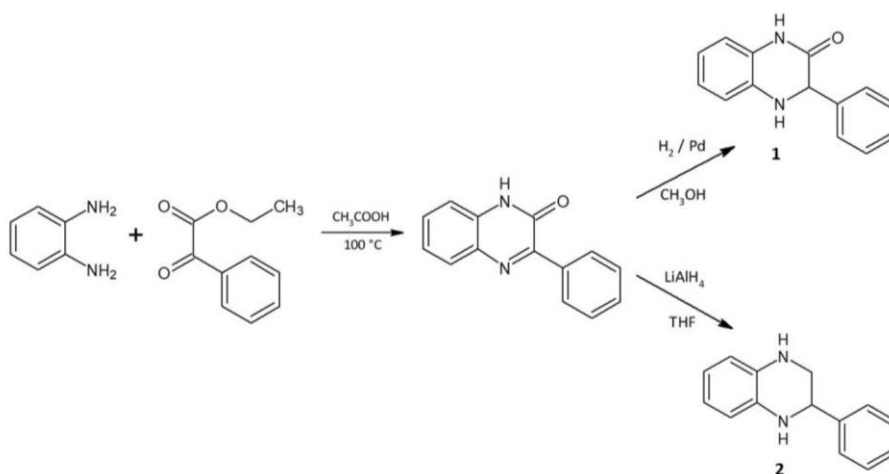
Syntéza a studium komplexačních vlastností 1,3-dibutoxy-1,3-fenylen močovinového makrocylu

Synthesis and NMR structure elucidation of new tetrahydroquinoxaline derivatives as NMAT2 activators

Kristián Schwan (B3)

Školitel: prof. Andrea Brancale, Ph.D.

NMAT2 is a neuron-specific enzyme, found in the cytoplasm, which stimulates the synthesis of NAD^+ . A recently identified natural compound (EGCG, epigallocatechin gallate) showed a positive effect on increasing the NAD^+ levels in cells. Neurodegeneration is associated with low levels of NAD^+ , and it could be possibly delayed, or suppressed, by stimulating the NMAT2 enzyme. This work is focused on synthesis, purification and characterization of tetrahydroquinoxaline derivatives as structural analogues of EGCG. In this project, we focus especially on 3-phenyl-3,4-dihydroquinoxaline-2(1H)-one (1) and 2-phenyl-1,2,3,4-tetrahydroquinoxaline (2) derivatives. The synthesis of these compounds is possible through the reaction of o-phenylenediamines with oxoacid esters followed by reduction. The reduction can be partial (1) or complete (2) on the right reaction conditions. The resulting amide (1) and amine (2) offer the possibility of selective alkylation of nitrogen atoms. By altering the substituents on the starting compounds, different tetrahydroquinoxaline derivatives were prepared. Structures of all products were elucidated by ^1H , ^{13}C and 2D NMR spectra.

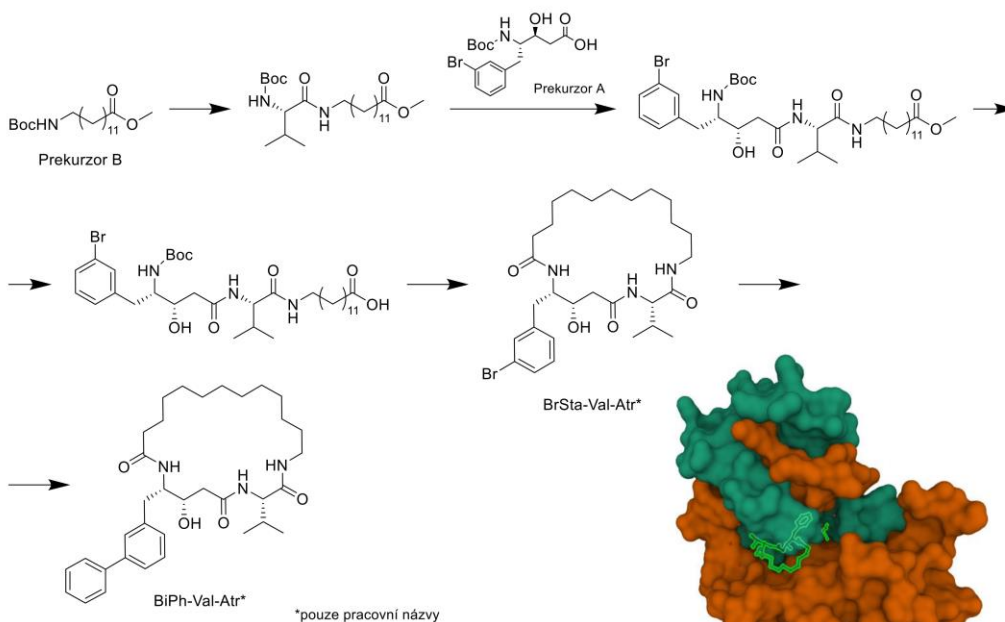


Příprava makrocyclických analogů pepstatinu A

Pavel Říkovský (B2)

Školitel: Mgr. Martin Hadzima

Lidský proteolytický enzym katepsin D je předmětem nemálo publikací kvůli jeho nadprodukci v buňkách karcinomu prsu. Nejpotentnějším známým přirozeně se vyskytujícím inhibitelem katepsinu D je pepstatin A. Pepstatin A však nevykazuje vhodné vlastnosti, nesplňuje žádné z pěti obecných Lipinského pravidel. Proto je pro nás zajímavým cílem připravit jeho makrocyclické analogy, které by vykazovaly stejnou či vyšší míru inhibice a zároveň lepší vlastnosti, co se především rozpustnosti a biodostupnosti týče. Několik takových makrocyclických analogů již bylo připraveno a uvedeno v rámci publikace, ze které jsem vycházel při tvorbě své práce pro Středoškolskou odbornou činnost, v rámci které jsem úspěšně připravil dva prekurzory jednoho makrocyclického analogu. Na tuto publikaci a svou předchozí práci nyní navazuji právě přípravou makrocyclických analogů z dříve syntetizovaných prekurzorů.



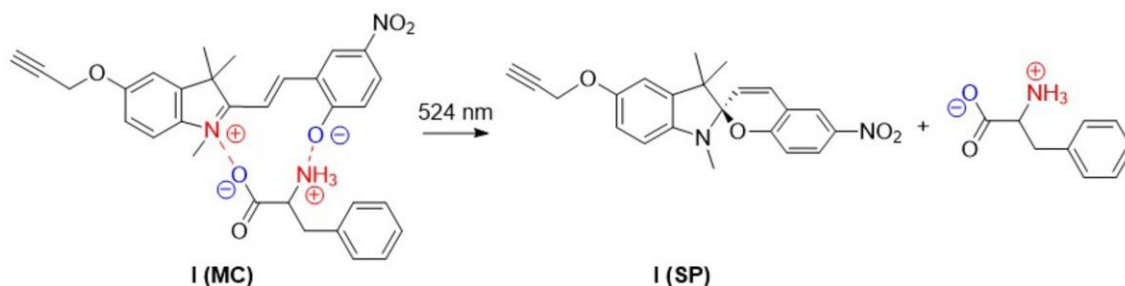
Obr.: Komplex enzymu katepsinu D s inhibitorem pepstatinem A

Studium interakce spiropyranových přepínačů s α -aminokyselinami

Eliška Marková (B3)

Školitel: Ing. Jiří Tůma, Ph.D.

Spiropyrany představují unikátní typ fotopřepínače, který na základě externího světelného impulsu přechází mezi uzavřenou, nepolární spiropyranovou formou (SP) a otevřeným, zwitterionickým merocyaninem (MC). Díky této dynamické, reverzibilní transformaci našly spiropyrany uplatnění v mnoha materiálech užívaných např. jako senzory, sorbenty pro čištění odpadních vod, či světlem ovladatelné katalyzátory. V naší laboratoři studujeme interakce spiropyranů, resp. jejich otevřených MC forem s aminokyselinami. Aminokyseliny, jakožto přirozené zwitterionty, jsou vhodným partnerem pro tvorbu dvojnásobné iontové vazby s MC formou spiropyranu. MC forma je tak schopna selektivního zachytu aminokyselin z roztoku a jejich následného uvolnění pomocí světelného impulsu (Obr. 1). Nastíněný koncept může v budoucnu najít aplikaci pro chromatografickou separaci aminokyselin, či pro direktivní transport a řízené uvolnění léčiva na bázi aminokyseliny. V rámci této práce byl připraven modelový spiropyran I s propargyloxylovou skupinou v poloze 5', která umožňuje další modifikaci materiálu pomocí *click*-reakce. U cílové sloučeniny byla studována kinetika světlem indukovaného přepínání mezi SP a MC formou pomocí UV-Vis spektroskopie a interakce s modelovou aminokyselinou (fenylalaninem) pomocí NMR.



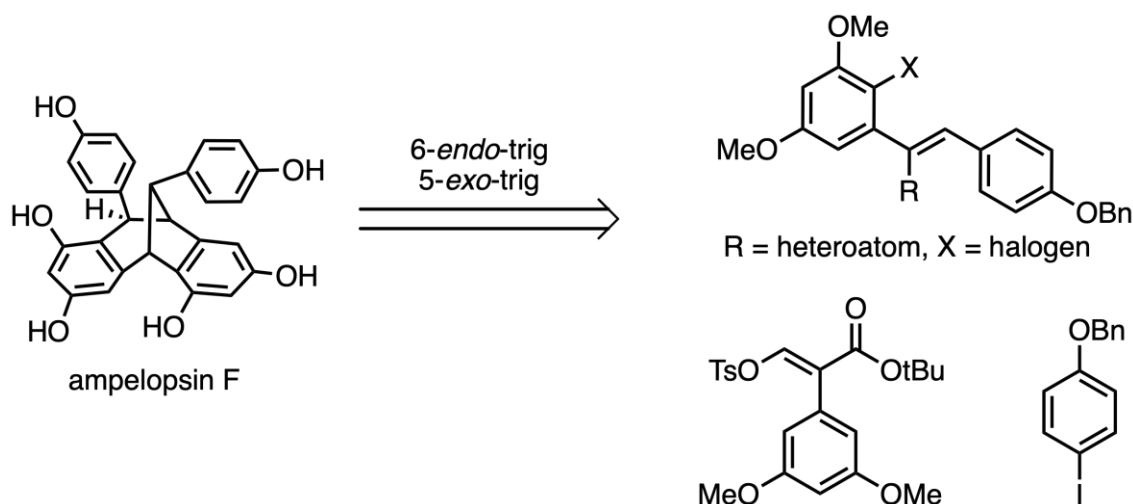
Towards the total synthesis of ampelopsin F

Miroslav Stroka (B3)

Školitel: Dr. habil. Ullrich Jahn

Ampelopsin F belongs to a diversified class of polyphenolic compounds distributed in *Vitaceae* plants.¹ Although this molecule exhibits unique biological activities such as antimalarial activity² and hepatoprotective function,³ further biological screening is restricted by its sparse amounts extractable from Nature. Therefore, it is necessary to develop a practical method that allows access to larger quantities of ampelopsin F and its analogues. The total synthesis is envisaged by a tandem reaction consisting of two consecutive 1,4-additions and subsequent oxidation reactions to furnish the core of ampelopsin F.

References:[1] H. Y. Jeong, J. Y. Kim, H. K. Lee, D. T. Ha, K. S. Song, K. Bae, Y. H. Seong, *Arch. Pharm. Res.* 2010, 33, 1655–1664.[2] Indriani, Y. Takaya, N. N. T. Puspaningsih, N. S. Aminah, *Chem. Nat. Compd.* 2017, 53, 559–561.[3] X. Kou, N. Chen, *Food Sci. Hum. Wellness* 2012, 1, 14-18.

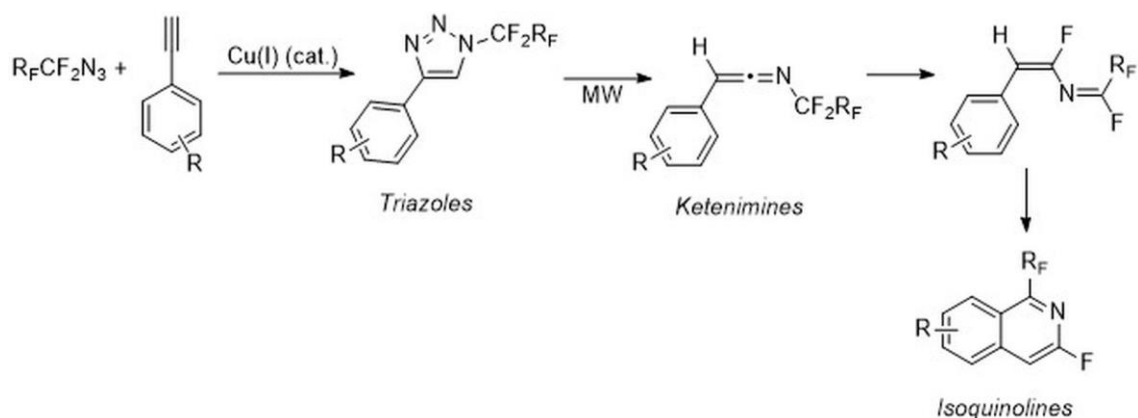


Synthesis of 1-fluoroalkylisoquinoline derivatives

Adam Kleman (B2)

Školitel: Ing. Petr Beier, Ph.D.

Isoquinoline core is present in many natural products and in drugs, such as anesthetics or medications against Parkinson's disease. Therefore, new ways of their synthesis are being sought, although their formation is rarely a short and simple synthetic way. Introduction of one or multiple atoms of fluorine into the molecule can have a positive influence on its pharmacological properties, yet only a small number of 1-fluoroalkylated isoquinolines are known. In our group we are focusing on the reactivity of *N*-fluoroalkylated azides and triazoles. When exposed to microwave irradiation, *N*-fluoroalkylated triazoles underwent a rearrangement with the loss of nitrogen to form *N*-fluoroalkylated ketenimines. Further heating of these ketenimines induced 1,3-fluorine shift and resulted in the formation of 1-fluoroalkylated-3-fluoroisoquinolines in poor yields. The aim of this work was to prepare starting triazoles, to increase the yields and optimize the reaction conditions with the use of suitable additives which facilitated the fluorine shift, and to reveal the scope of substituted 1-fluoroalkylated-3-fluoroisoquinolines.



Synthesis of aromatic amines through the rearrangements of thiocarbonyl intermediates.

Lenka Vondráčková (B3)

Školitel: Ing. Petra Cuřínová, Ph.D.

Dengue virus (DENV) is the most widespread human viral pathogen transmitted by mosquitoes (*Aedes Albopictus* and *Aedes Aegypti*). Although over 100 countries are affected, roughly half of the world's population is at risk and DENV is spreading to new areas – including Europe, there is no specific treatment yet.

My project is focused on the hit expansion of new antiviral compounds that were selected by virtual screening to weaken or even abolish interactions between proteins NS3 and NS5, which are responsible for the replication of a virus in a host cell. While synthesizing the original hit II, we met a problem of unexpected behavior of the starting material I in the presence of hydrazine. Instead of the substitution of the oxygen atom in the oxadiazole ring of I to form the compound II, we observed the quantitative formation of III, the structure of which was confirmed by NMR, HRMS, and X-ray analysis. We proposed the mechanism in analogy with Smiles rearrangement and we are investigating necessary conditions and possible use of this reaction.

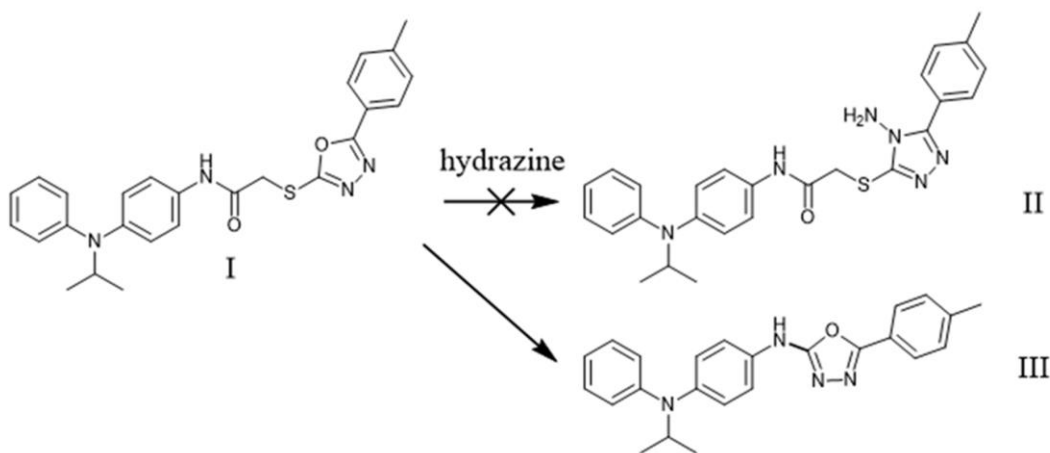


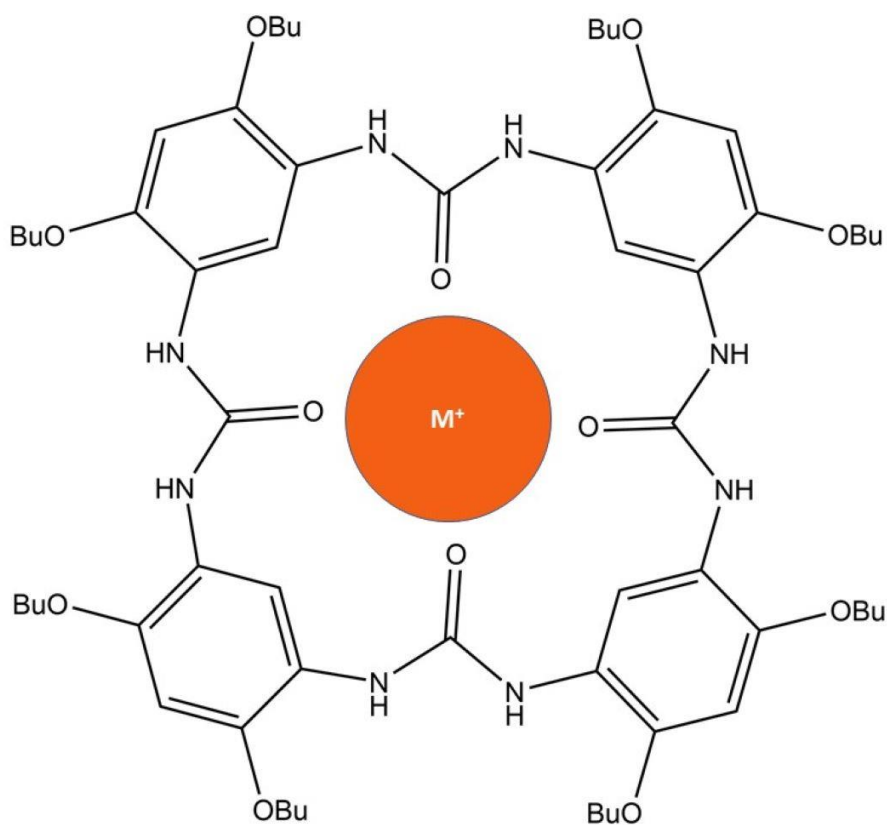
Figure 1. Rearrangement of I at the addition of hydrazine.

Syntéza a studium komplexačních vlastností 1,3-dibutoxy-1,3-fenylen močovinového makrocyklu

Karolína Roháčová (B3)

Školitel: Ing. Michal Himl, Ph.D.

Cílem této práce je optimalizace syntézy 1,3-dibutoxy-1,3-fenylen močovinového makrocyklu a studium jeho komplexačních vlastností. Základ struktury makrocyklu tvoří čtyři benzenová jádra substituována butoxy skupinami, které zlepšují rozpustnost makrocyklu. Benzenová jádra jsou propojena močovinovými můstky, které zajišťují interakci s ionty. S připraveným makrocyklem byla provedena komplexační studie s vybranými kationty a pokus o stanovení komplexačních konstant.



Organická chemie magisterská M1

MÍSTO: ZASEDACÍ SÍŇ DĚKANÁTU FCHT

KOMISE

prof. Ing. Radek Cibulka, Ph.D. (předseda)

Ing. Bc. Michal Himl, Ph.D. - tajemník

doc. Ing. Stanislav Rádl, CSc. (Zentiva)

Mgr. et Mgr. Pavla Perlíková, Ph.D.

Ing. Jan Kroupa, Ph.D. (Proxim)

Ing. Martin Káš

PROGRAM

09:15 [Bc. Michal Pavlůsek](#) (M1, Ing. Jiří Tůma, Ph.D.)

Syntéza a studium heterogenních močovinových organokatalyzátorů v nukleofilních fluoracích

09:30 [Bc. Ondřej Daněk](#) (M2, Ing. Petra Ménová, Ph.D.)

Synthesis of novel M_2 selective dualsteric agonists of muscarinic receptors as potential new analgesics.

09:45 [Bc. Jakub Křištof](#) (M2, RNDr. Tomáš Slanina, Ph.D.)

Synthetic approaches towards heterocyclic fulgides

10:15 Coffee Break

10:00 [Bc. Vít Jeníček](#) (M2, Ing. Markéta Rybáčková, Ph.D.)

[2.2]Paracyklofan-4-aminy jako prekurzory fluoračních činidel

10:30 [Bc. Jakub Semecký](#) (M2, prof. Ing. Radek Cibulka, Ph.D.)

Flavin-Based Photocatalytic Oxidative Homocoupling of Silyl Enol Ethers

10:45 [Bc. Sámer Melhem](#) (M1, Ing. Markéta Rybáčková, Ph.D.)

Syntéza rozšířených derivátů triptycenu

11:00 [Bc. Vojtěch Urban](#) (M2, Ing. Michal Himl, Ph.D.)

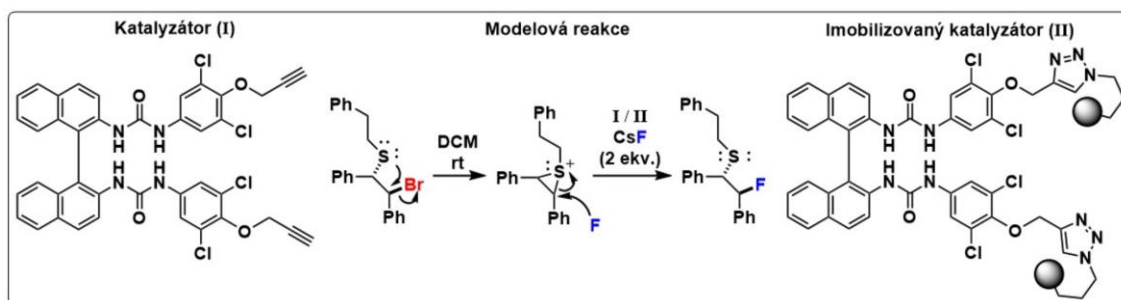
Syntéza derivátů bifenylu pro toxikologický výzkum

Syntéza a studium heterogenních močovinových organokatalyzátorů v nukleofilních fluoracích

Bc. Michal Pavlůsek (M1)

Školitel: Ing. Jiří Tůma, Ph.D.

Organické sloučeniny fluoru jsou každodenní součástí našeho života. Jejich aplikace sahají do různorodých oblastí, jako např. farmakochemie, agrochemie a materiálové inženýrství. Není proto překvapivé, že se moderní výzkum v oblasti organofluorové chemie zaměřuje na vývoj jednoduchých, cenově dostupných metod fluorace organických substrátů šetrných k životnímu prostředí. Fluorace organických sloučenin jsou obvykle obtížné, jelikož vyžadují specifické reakční podmínky a drahá, atomově neekonomická činidla. Vhodnou alternativu představují fluoridy alkalických kovů, které jsou cenově dobře dostupné a poskytují minimální množství odpadu. Jejich nespornou nevýhodou je však značně omezená rozpustnost v organických rozpouštědlech. Tento problém lze překonat pomocí katalýzy fázového přenosu s užitím vodíkových vazeb (HB PTC). Pro tento účel byl v naší laboratoři vyvinut katalyzátor na bázi 1,1'-binaftalen-2,2'-diaminu (BINAMu), jehož účinnost byla studována v modelové reakci - nukleofilní fluoraci organického β -bromsulfidu pomocí CsF (Obr. 1). Připravený katalyzátor byl dále vhodně derivatizován a následně ukotven na pevný nosič – modifikovaný silikagel, čímž je zaručena jeho snadná recyklovatelnost běžnou filtrací. Imobilizovaný katalyzátor byl poté testován ve stejné modelové reakci.

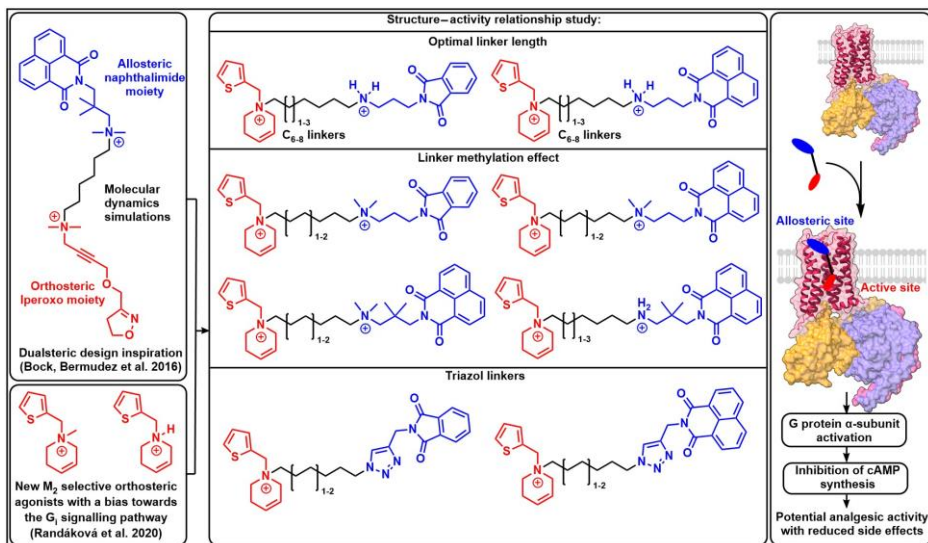


Synthesis of novel M_2 selective dualsteric agonists of muscarinic receptors as potential new analgesics.

Bc. Ondřej Daněk (M2)

Školitel: Ing. Petra Ménová, Ph.D.

Muscarinic receptors are G-protein coupled receptors (GPCRs) that take part in many signalling pathways in the human body. There are five main subtypes of the muscarinic receptors (M_1 – M_5) which each can take part in more than one signalling pathway, so selectivity for one subtype and bias towards one of the signalling pathways is critical when developing drugs targeting the muscarinic receptors. This project aims to synthesize new agonists of the M_2 receptor derived from M_2 selective agonist with a bias towards $G_{i\alpha}$ signalling pathway – *N*-(thiophen-2-ylmethyl)-1,2,5,6-tetrahydropyridinium that was identified in 2020 in the group of Dr. Jakubík at the Institute of Physiology, CAS using a dualsteric architecture that draws inspiration from molecular dynamics studies of Iperoxo-derived agonists (Bock et al. 2016). A series of compounds with varying linker designs was synthesized, preliminary testing of the affinity to the receptor was evaluated by [3 H]-*N*-methylscopolamine competition assay and their ability to selectively activate the M_2 receptor will be determined. Optimized M_2 selective agonists could have potent analgesic activity with reduced side effects caused by phospholipase C signalling pathway activation in comparison with currently used opioid or steroidal analgesics.

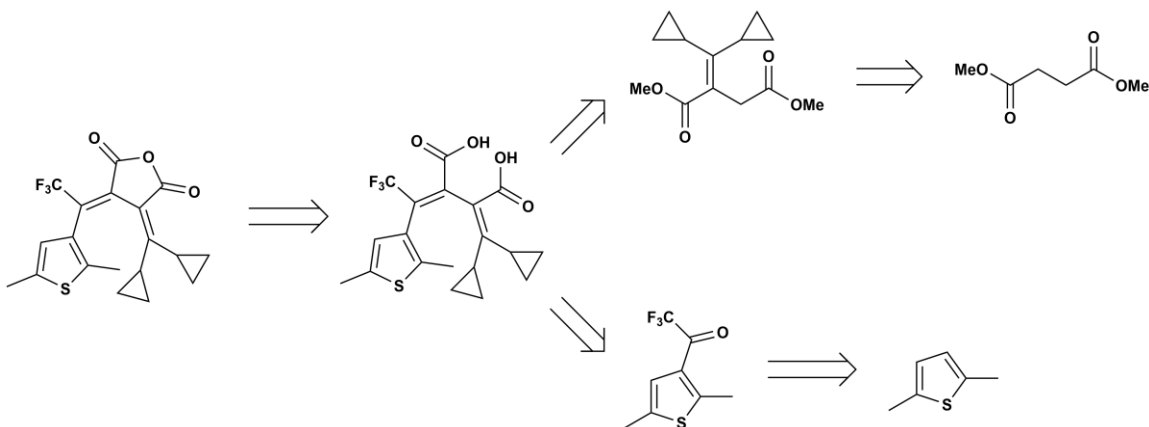


Synthetic approaches towards heterocyclic fulgides

Bc. Jakub Křištof (M2)

Školitel: RNDr. Tomáš Slanina, Ph.D.

Photoswitches are compounds capable of a photoinduced reversible transformation between two isomeric forms. As a result, the corresponding photoswitch isomers can differ in physico-chemical properties, such as absorption spectra, refractive index or polarity. Photoswitching has recently attracted considerable attention, and its applications as fast optical data storage devices, organic sensors, actinometers or smart materials have been proposed. Our research aims at preparing a fulgide-based photoswitch with thiophene moiety. Substitution of the fulgide core, including meso-trifluoromethyl and terminal dicyclopropyl functional groups, was designed to provide high fatigue resistance and thermal stability of the photoswitch. Synthesis of the photoswitch uses two building blocks, thiophene-based aromatic ketone, prepared by the means of Friedel-Crafts reaction, and succinate-based moiety, prepared by condensation of dicyclopropylketone to succinate. These two building blocks were condensed together by the means of Stobbe condensation reaction utilizing LDA as a base. Subsequently, the condensed intermediate underwent elimination reaction to produce a derivative of fulgenic acid, which was then dehydrated using acetic acid anhydride to afford the desired fulgide.

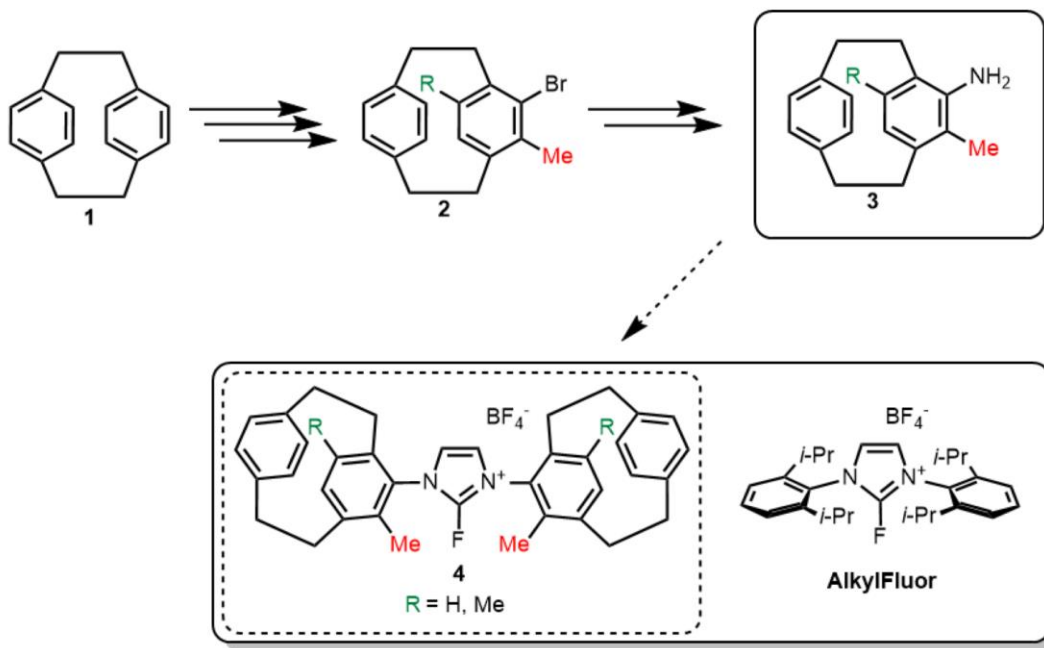


[2.2]Paracyklofan-4-aminy jako prekurzory fluoračních činidel

Bc. Vít Jeníček (M2)

Školitel: Ing. Markéta Rybáčková, Ph.D.

Planárně chirální deriváty [2.2]paracyklofanu se využívají jako stavební bloky pro enantioselektivní činidla a katalyzátory. Tato práce se zabývá přípravou *ortho*-alkylovaných aminoparacyklofanů 3 reprezentujících prekurzory chirálních analogů deoxyfluoračního činidla AlkylFluor (4). Alkylová substituce v *ortho*-poloze by měla zvýšit stabilitu intermediárních *N*-heterocyklických karbenů. Příprava vycházela z komerčně dostupného [2.2]paracyklofanu (1), který byl převeden na bromderiváty 2. Ty byly poté derivatizovány na aminy 3.

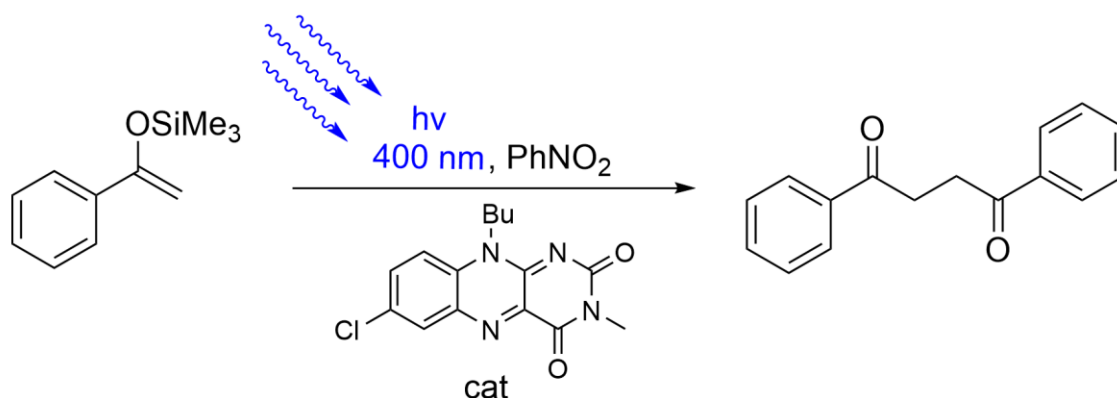


Flavin-Based Photocatalytic Oxidative Homocoupling of Silyl Enol Ethers

Bc. Jakub Semecký (M2)

Školitel: prof. Ing. Radek Cibulka, Ph.D.

Flavins, derivatives of vitamin B2, are a class of compounds exhibiting interesting spectral and chemical properties, which make them appealing catalysts in a multitude of both biomimetic and artificial reactions. In this work, flavins' photochemistry and redox properties are exploited to provide a transition metal-free path towards symmetrical 1,4-difunctional compounds. Silyl enol ethers are easily accessible derivatives of ketones with activated alpha position. Using flavin as a photocatalyst, we are able to convert silyl enol ethers into 1,4-diketones in an oxidative homocoupling reaction under anaerobic conditions using a sacrificial oxidant. These products have the potential to be valuable intermediates in the synthesis of, among others, five-membered heterocyclics.

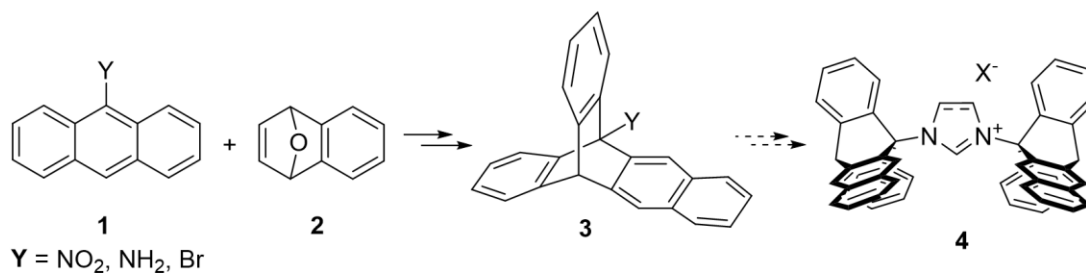


Syntéza rozšířených derivátů triptycenu

Bc. Sámer Melhem (M1)

Školitel: Ing. Markéta Rybáčková, Ph.D.

Triptyceny jsou látky s poměrně unikátní strukturou, díky čemuž mohou nalézt uplatnění v mnoha oblastech, od medicíny až po elektrotechniku. Cílem této práce je příprava rozšířených derivátů triptycenu **3** u kterých je v jednom rameni benzenové jádro nahrazeno naftalenem. Navržené struktury mají na můstkovém atomu uhlíku zabudovány funkční skupiny a mohou tak sloužit jako prekursory pro (dihydro)imidazoliové soli **4**, z nichž by mělo být možné připravit katalyzátory přechodných kovů na bázi NHC-ligandů. Syntetická cesta k rozšířeným derivátům triptycenu **3** vede přes Dielsovu-Alderovu reakci mezi anthraceny **1** a 1,4-epoxy-1,4-dihydronaftalenem (**2**), a následnou aromatizací pomocí dehydratačních činidel.

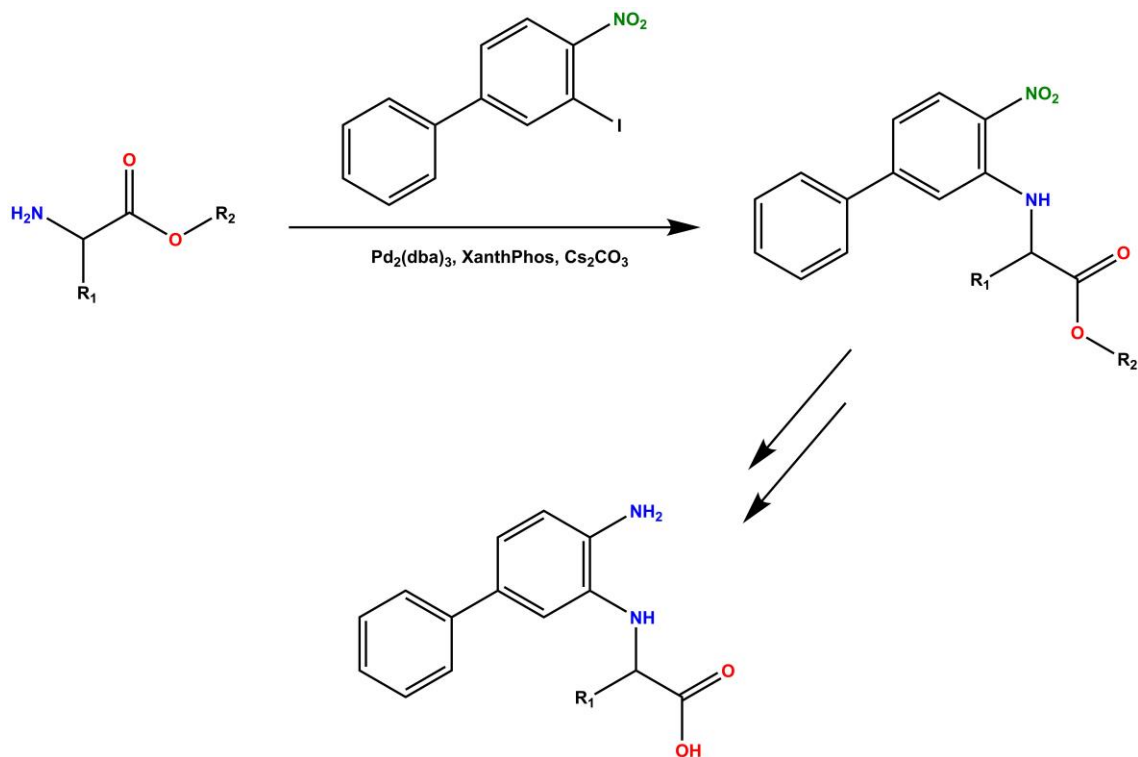


Syntéza derivátů bifenyly pro toxikologický výzkum

Bc. Vojtěch Urban (M2)

Školitel: Ing. Michal Himl, Ph.D.

4-Amino- a 4-nitrobifenyl jsou toxické karcinogenní látky. Obě zmíněné látky jsou obsaženy v cigaretovém kouři, dále jsou v menší míře přítomny v barvách na vlasy a ve výparech olejů na vaření. Cílem práce bylo připravit aminokyselinové deriváty 4-aminobifenyly, které budou použity v toxikologických studiích jako standardy při analýze proteinových aduktů odvozených od 4-aminobifenyly. Klíčovým krokem přípravy derivátů aminokyselin byl Buchwald-Hartwigův coupling esteru vhodné aminokyseliny a 3-jod-4-nitro bifenyly. Vhodnými výchozími aminokyselinami pro syntézu analytických standardů byly zvoleny L-Valin a N_α -acetyl-L-Lysin. V rámci prezentace budou podrobněji diskutovány další syntetické kroky.



Organická chemie magisterská M2

MÍSTO: A243

KOMISE

prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc. (předseda)

prof. Ing. Michal Kohout, Ph.D. - tajemník

Ing. Petr Kovaříček, Ph.D.

Ing. Markéta Rybáčková, Ph.D.

Mgr. Jiří Kaleta, Ph.D. (ÚOCHB AV ČR)

Ing. Petr Šimon, Ph.D. (Cayman)

PROGRAM

09:15 [Bc. Anna Nožičková](#) (M2, Ing. Petr Kovaříček, Ph.D.)

Acylhydrazone-indigo photoswitching dyads

09:30 [Bc. Jan Řeháček](#) (M1, Ing. Eva Svobodová, Ph.D.)

Příprava 8-substituovaných isoalloxazinů a studium jejich vlastností

09:45 [Bc. Adam Hroch](#) (M2, prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.)

Arylfluorsilany jako prekurzory analogů TBAT

10:00 [Bc. Soňa Poláčková](#) (M2, doc. Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D.)

Studium arylace 4-hydroxypyridinu

10:15 Coffee Break

10:30 [Bc. Karolína Bangievská](#) (M2, RNDr. Tomáš Slanina, Ph.D.)

Biaryl-based redox switches for photoinduced electron transfer

10:45 [Bc. Šárka Friedrichová](#) (M1, Ing. Radek Jurok, Ph.D.)

Syntéza vybraných metabolitů látky 2-fluordeschlorketaminu

11:00 [Bc. Jan Wohlgemuth](#) (M2, Ing. Petra Ménová, Ph.D.)

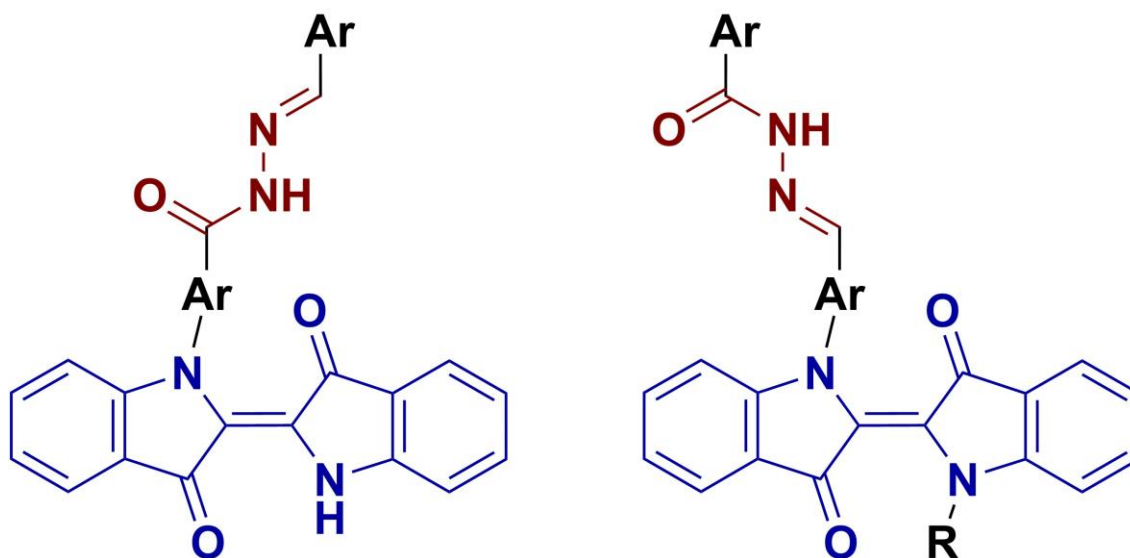
Synthesis of Acrylate-Based DC-SIGN Inhibitors

Acylhydrazone-indigo photoswitching dyads

Bc. Anna Nožičková (M2)

Školitel: Ing. Petr Kovaříček, Ph.D.

Acylhydrazones and indigos are photoswitchable molecules that respond to light of specific wavelengths, causing structural isomerization around the C=N and C=C bond. These photoswitches exhibit significant spectral separation, enabling individual control of their functions through irradiation wavelength adjustment. This allows for the design of multi-responsive systems within a single molecular architecture. We synthesized and characterized indigo modified with thiophene-based acylhydrazones. Indigo switches in the yellow-red spectrum, while acylhydrazones are prominent in the violet-UV range. Thiophene acylhydrazones have distinct spectral features, making them identifiable even in the presence of other absorbing species. Synthesizing acylhydrazone-indigo dyad photoswitches presents challenges due to indigo's susceptibility to nucleophilic attacks. We adopted a late-stage functionalization approach to address this issue. The preliminary investigations indeed show that specific photoswitching functions can be addressed selectively and that the two photoswitching units can be coupled via electronic conjugation.

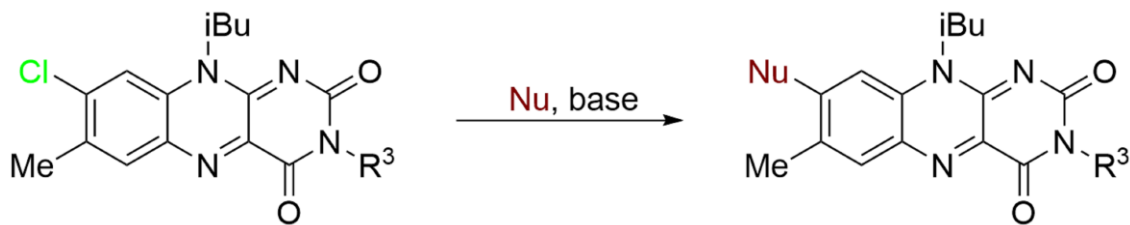


Příprava 8-substituovaných isoalloxazinů a studium jejich vlastností

Bc. Jan Řeháček (M1)

Školitel: Ing. Eva Svobodová, Ph.D.

Flaviny jsou perspektivní a neškodné organokatalyzátory a fotokatalyzátory. Jejich struktura je do velké míry modifikovatelná, což je jejich výhodou. Na flavinový skelet lze zavést různé elektrondonorní a elektronakceptorní skupiny a také některé pozice alkylovat, čímž lze jemně vyladit důležité vlastnosti pro organo- a fotokatalýzu, jakými jsou například redoxní potenciál či spektrální vlastnosti. Tento příspěvek se zabývá syntézou nových flavinů pomocí nukleofilní aromatické substituce 8-chlorisoalloxazinů v poloze 8, což je zatím málo prozkoumaný způsob syntézy flavinových katalyzátorů. V přírodě je poloha 8 často místem kovalentní vazby mezi koenzymem a nukleofilními skupinami proteinu v mnoha flavoenzymech. Přirozeně se vyskytujícím flavinem s modifikací v poloze 8 je roseoflavin, který obsahuje dimethylaminoskupinu místo methylové skupiny. V rámci tohoto příspěvku byla provedena syntéza vybraných 8-chlorisoalloxazinů, se kterými byly dále úspěšně provedeny nukleofilní aromatické substituce za nukleofily butan-1-thiol a dimethylamin.



$R^3 = \text{H, Me}$

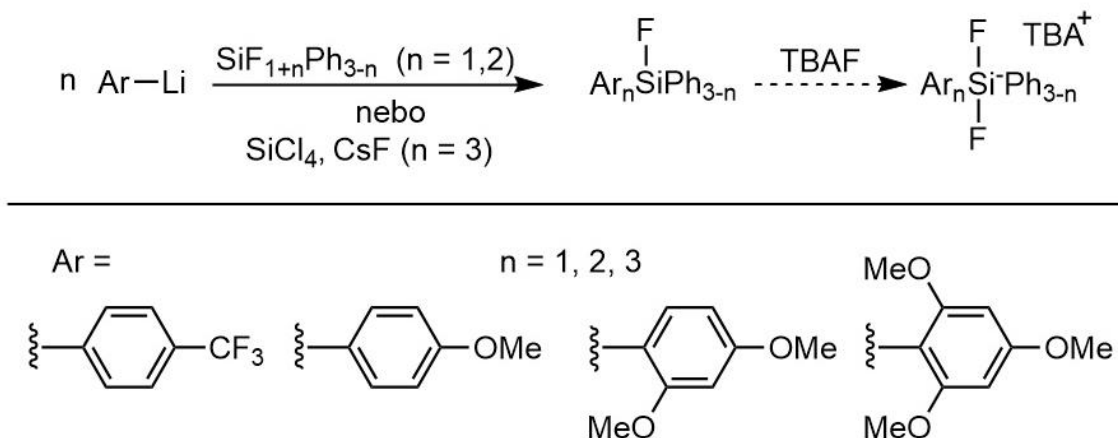
$\text{NuH} = \text{BuSH, NHMe}_2$

Arylfluorsilany jako prekurzory analogů TBAT

Bc. Adam Hroch (M2)

Školitel: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Tetrabutylammonium-trifenyldifluorsilikát (TBAT) je organická sůl odvozená od molekuly TBAF, běžného zdroje fluoridového aniontu rozpustného v organických rozpouštědlech. Výhodou TBAT proti TBAF je zejména jeho nehygroskopicit a stabilita. Při fluoraci sekundárních substrátů oběma činidly však dochází do značné míry ke vzniku vedlejších produktů eliminace. Tato práce se zabývá přípravou substituovaných arylfluorsilanů, které budou sloužit jako prekurzory analogů TBAT. Ty by měly být na základě našich předchozích zkušeností reaktivnější a selektivnější. Lithiací výchozích arylbromidů butyllithiem a následnou reakcí s vhodnými silany byla připravena malá knihovna fluorsilanů substituovaných trifluormethylovou či jednou nebo více methoxy skupinami v různých polohách arylového cyklu. Byly rozpracovány transformace získaných fluorsilanů na odpovídající difluorsilikáty a fluorace těmito činidly.

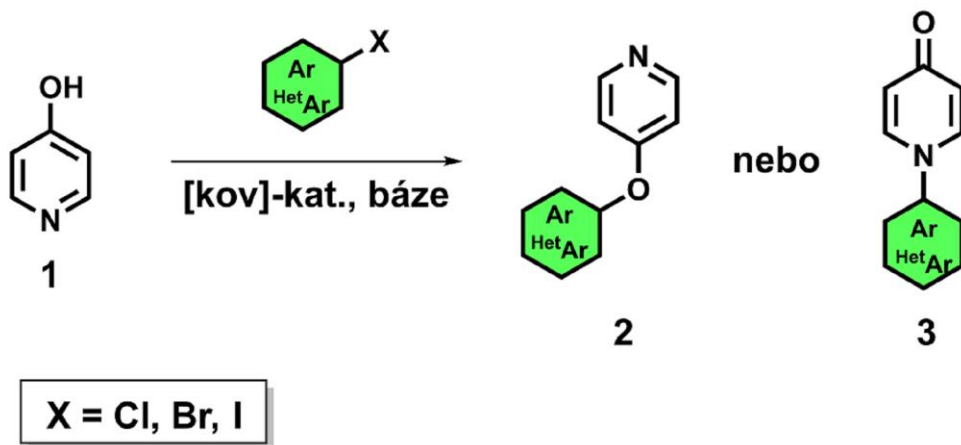


Studium arylace 4-hydroxypyridinu

Bc Soňa Poláčková (M2)

Školitel: doc. Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D.

N-arylované heterocyklické sloučeniny jsou lukrativní cílové molekuly pro organickou syntézu díky své potenciální biologické aktivitě. Ve své práci se zabývám studiem arylace 4-hydroxypyridinu **1** prostřednictvím cross-coupling reakcí, a to zejména Ullmanovou kondenzací. Lze předpokládat, že za podmínek Ullmanovy kondenzace bude 4-hydroxypyridin (**1**) v reakcích vystupovat jako ambidentní nukleofil, který v závislosti na reakčních podmínkách umožní vznik produktů *O*-, nebo *N*-arylace **2** a **3**. Hlavním předmětem mé práce je studium vlivu reakčních podmínek na průběh Ullmanovy kondenzace.

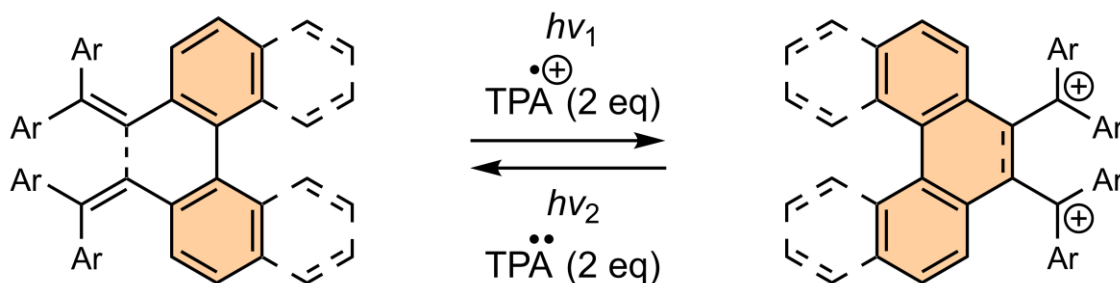


Biaryl-based redox switches for photoinduced electron transfer

Bc. Karolína Bangievská (M2)

Školitel: RNDr. Tomáš Slanina, Ph.D.

Our research deals with the design, synthesis and electrochemical, photophysical and photochemical studies of monomolecular *photo-redox switches* for controllable and reversible *intramolecular* photoinduced electron transfer (PET). These systems, consisting of triarylamine and redox switch moiety, use their unique structure to prevent the undesired back electron transfer (BET). Our *photo-redox switches* may find applications in the field of optical memories, organic solar cells, redox sensors, functionalised surfaces or smart materials. To accomplish this aim, we first designed a bimolecular redox system with *intermolecular* PET to prove the compatibility of the participating donor and acceptor. To find possible candidates, we investigated known photo- and electrochromic systems as donor and acceptor components of our monomolecular *photo-redox switch*. We found *p*-substituted triphenylamines (TPAs) and biaryl-based redox-switching dienes as the best candidates. As TPAs are well-known and intensively studied, our main focus is to synthesise compatible biaryl-based dienes and analyse their photophysical and electrochemical properties. The compatibility of donors and acceptors will be subsequently studied in bidirectional PET.



Syntéza vybraných metabolitů látky

2-fluordeschlorketaminu

Bc. Šárka Friedrichová (M1)

Školitel: Ing. Radek Jurok, Ph.D.

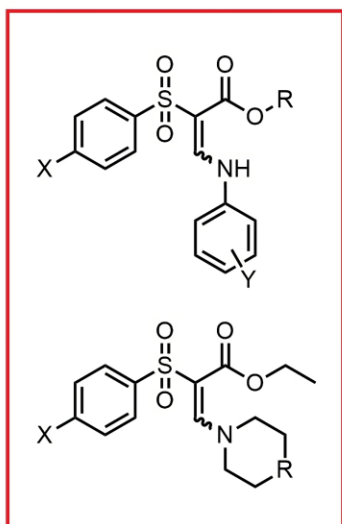
Nové psychoaktivní látky jsou fenomén, se kterým se stále častěji setkáváme na drogové scéně. Jsou často odvozené od známých, zákonem již regulovaných látek. Strukturní změny v molekule mohou mít za následek odlišnou farmakokinetiku od parentní drogy. Pro lepší poznání rizik a vyvinutí nových metod pro jejich detekci je důležité znát jejich metabolismus. Cílem této práce je syntetizovat některé metabolity 2-fluordeschlorketaminu vybrané na základě rešerše metabolismu strukturně podobné látky ketaminu a dostupných dat o metabolismu 2-fluordeschlorketaminu. Syntetizované metabolity budou použity v dalším výzkumu metabolismu této látky jako analytické standardy.

Synthesis of Acrylate-Based DC-SIGN Inhibitors

Bc. Jan Wohlgemuth (M2)

Školitel: Ing. Petra Ménová, Ph.D.

DC-SIGN is a C-type lectin receptor, which can be found on the surface of dendritic cells and macrophages. This protein is prominent in pathogen recognition and antigen presenting during immune response, as its extracellular carbohydrate recognition domain interacts with oligosaccharides rich in D-mannose and L-fucose. Some pathogens, such as HIV, Ebola and *Mycobacterium tuberculosis*, use this interaction in the first stages of infection. HIV in particular uses dendritic cells as a Trojan horse to escape being detected by the immune system. This fact makes DC-SIGN an interesting target for the synthesis of new pharmaceuticals. However, although several DC-SIGN inhibitors have been described in recent years, none are commercially available as medication. During a primary library screening, three 2-phenylsulfonyl acrylates showed moderate affinity towards DC-SIGN. The aim of this work is to expand the acrylate library and identify compounds with higher affinity. In particular, we aim to introduce modifications on the arylsulfonyl moiety and synthesizing derivatives both with primary aromatic amines and secondary amines with proven affinity towards DC-SIGN. Apart from evaluating the affinity to DC-SIGN, the compounds are also being tested for antibacterial and cytostatic properties.



→ Affinity for
DC-SIGN

→ Antibacterial
activity

→ Cytotoxicity

Organická chemie magisterská M3

MÍSTO: B25

KOMISE

doc. Ing. Jan Budka, Ph.D. (předseda)

Mgr. Roman Holakovský, Ph.D. - tajemník

prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc. (ÚOCHB AV ČR)

Ing. Petra Cuřínová, Ph.D.

Ing. Ladislav Cvak, Ph.D. (Mihulka)

RNDr. Jiří Schimer, Ph.D. (DIANA Biotechnologies)

PROGRAM

09:15 [Bc. Kryštof Malý](#) (M1, Ing. Markéta Rybáčková, Ph.D.)

Syntéza chirálních 1,5-disubstituovaných triptycenů

09:30 [Bc. Karolína Vatrová](#) (M2, prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.)

Syntéza stavebních bloků calixarenů s lichým počtem jader

09:45 [Bc. Margarita Faizulina](#) (M2, Ing. Petr Kovaříček, Ph.D.)

Optimalizace hydrosilylační reakce pro povrchové funkcionalizace

10:00 [Bc. Eliška Smolová](#) (M2, Ing. Radek Jurok, Ph.D.)

Syntéza helicenů s fosfininovými kruhy

10:15 Coffee Break

10:30 [Bc. Marie Rozmušová](#) (M1, Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.)

Syntéza analogů flavinových kofaktorů

10:45 [Bc. František Stara](#) (M2, Ing. Petra Ménová, Ph.D.)

The Radiochemistry of Rotaxanes

11:00 [Bc. Šárka Polívková](#) (M2, Ing. Markéta Rybáčková, Ph.D.)

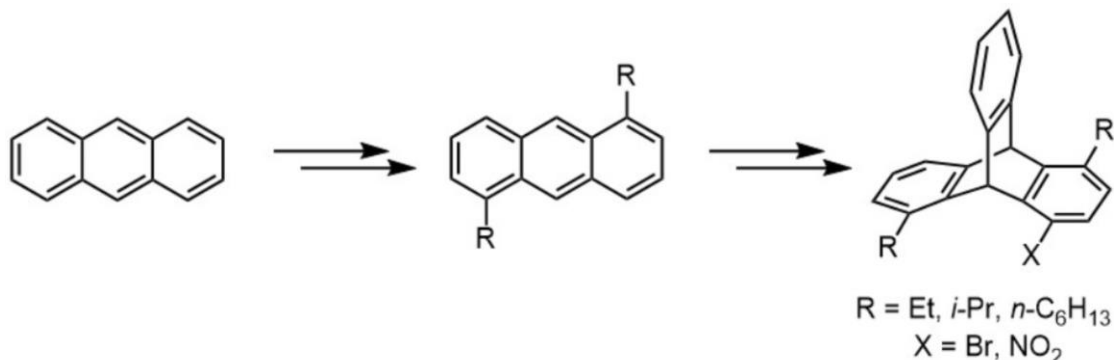
Chirální 9-substituované triptyceny

Syntéza chirálních 1,5-disubstituovaných triptycenů

Bc. Kryštof Malý (M1)

Školitel: Ing. Markéta Rybáčková, Ph.D.

Triptyceny jsou nejjednoduššími molekulami ze skupiny iptycenů. Jedná se o látky obsahující 3 aromatická jádra navzájem spojená můstkovými uhlíkovými atomy. Díky své neobvyklé D_{3h} symetrii našly využití například v chemii materiálů, polymerů ale i v medicíně a v katalýze. Po substituci například v polohách 1 a 5 se stávají chirálními. Tato práce se zabývá syntézou 1,4,5-trisubstituovaných triptycenů jakožto prekurzorů pro přípravu chirálních NHC-ligandů. V první části byly připraveny dva 1,5-dialkylderiváty anthracenu s využitím regioselektivní Friedelovy-Craftsovy acylace a následné Wolffovy-Kižněrovy redukce. Pro přípravu 1,5-diisopropylantracenu byla použita Wittigova reakce 1,5-diacetylantracenu s trifenyl(methyl)fosfonium-bromidem následovaná katalytickou hydrogenací. Dále byla studována reaktivita připravených derivátů anthracenu při nitraci a bromaci. Pro nitraci se jako selektivní činidlo osvědčil *N*-nitrosacharin, nejlepší výsledky bromace dialkylantracenu pak poskytoval brom v přítomnosti železa. Na závěr byla úspěšně provedena syntéza pěti chirálních 1,4,5-trisubstituovaných derivátů triptycenu. Nitroderiváty byly izolovány v nižších výtěžcích (32-44 %), zatímco v případě bromderivátů byl izolovaný výtěžek až 73 %.

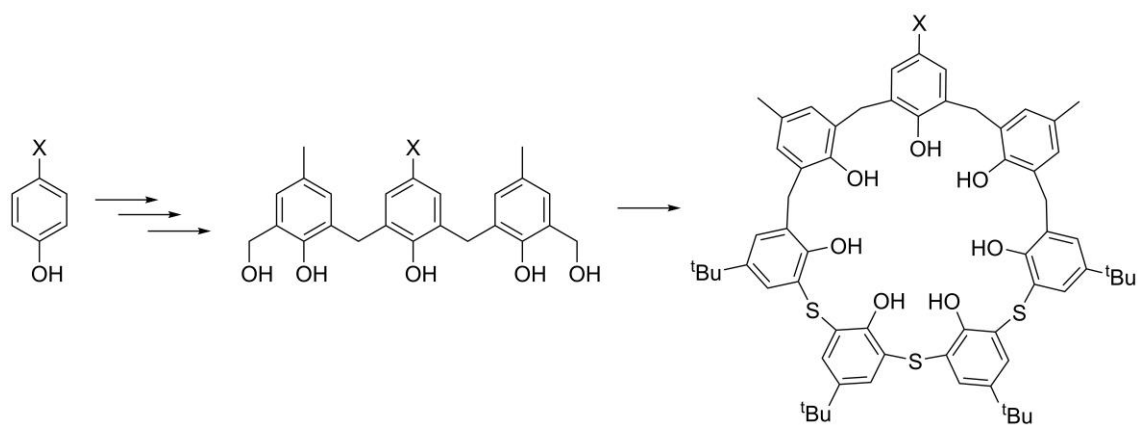


Syntéza stavebních bloků calixarenů s lichým počtem jader

Bc. Karolína Vatrová (M2)

Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Jeden z možných postupů přípravy vyšších calixarenů s lichým počtem představuje postupná konvergentní syntéza, během které jsou pomocí několika kroků připraveny příslušně substituované lineární prekurzory. Ty jsou ve finálním kroku kondenzovány za vzniku nového makrocyklu. V rámci svého tématu pracuji na postupné výstavbě makrocyklů vhodně substituovaných pro následnou derivatizaci. Vzniklé deriváty budou v dalším studiu zkoumány z hlediska jejich schopnosti komplexace některých látek jako jsou například fullereny.



Optimalizace hydrosilylační reakce pro povrchové funkcionalizace

Bc. Margarita Faizulina (M2)

Školitel: Ing. Petr Kovaříček, Ph.D.

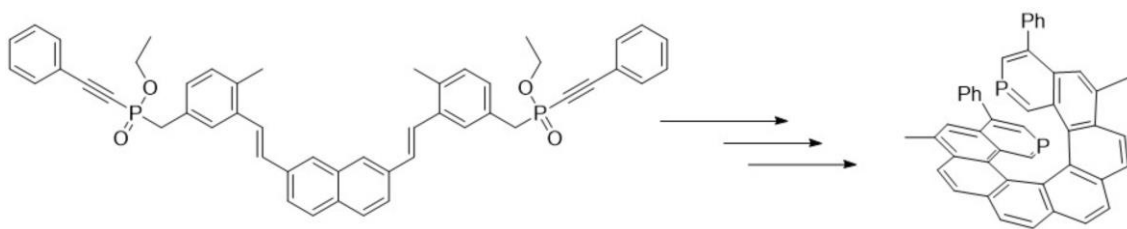
Pro funkcionalizaci jsou běžně používané trialkoxysilany obsahující atom křemíku tetraedricky koordinovaný třemi methoxy nebo ethoxy skupinami a s funkční skupinou vázanou přes Si-C vazbu. Komerčně je dostupná celá řada podobných sloučenin, ale některé z nich je potřeba syntetizovat. Tato práce se zabývá syntézou propargyl-PEG3-triethoxysilanu a optimalizaci nejproblematictějšího kroku- hydrosililace.

Syntéza helicenů s fosfinovými kruhy

Bc. Eliška Smolová (M2)

Školitel: Ing. Radek Jurok, Ph.D.

Molekuly složené z *ortho*-kondenzovaných benzenových jader jsou nazývány helicity dle šroubovice, která vzniká vlivem sterické repulze koncových kruhů helixu. Helicity vykazují výjimečné optické a elektronické vlastnosti, jako například vysoké hodnoty specifické optické otáčivosti, cirkulárně polarizovanou luminiscenci, nebo silný cirkulární dichroismus. Díky tomu jsou v popředí zájmu mnoha vědeckých skupin. Uplatňují se napříč několika oblastmi: lze je aplikovat v asymetrické katalýze, jako chemické senzory či jako součást OLED (organic light-emitting diode). Již takto perspektivní vlastnosti helicity lze dále rozšířit zavedením heteroatomu do jejich šroubovice. Bylo publikováno mnoho metod příprav heterohelicity obsahujících například dusík, síru, křemík a bor. Naproti tomu fosfor, ve formě fosfinového jádra, byl do molekuly šroubovice začleněn teprve nedávno a potenciální využití tohoto spojení je aktuálním tématem. Předkládaná práce navazuje na dosavadní poznání v této oblasti syntézou helicity s fosfinovými kruhy v terminálních pozicích šroubovice.

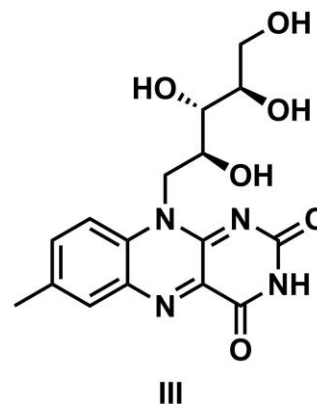
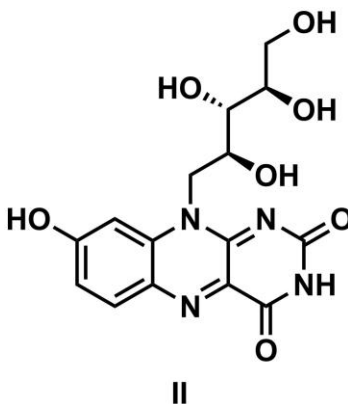
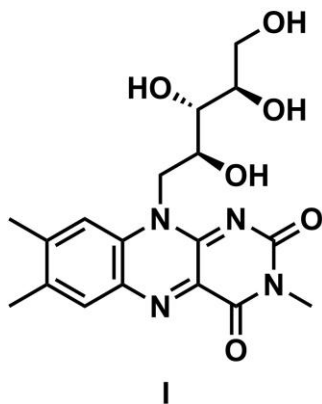


Syntéza analogů flavinových kofaktorů

Bc. Marie Rozmušová (M1)

Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.

Flaviny jsou biologicky aktivní látky, které se jako kofaktory enzymů nacházejí ve všech organismech. Modifikací základního skeletu v přírodě se vyskytujících kofaktorů jsme schopni dosáhnout výrazných změn v jejich vlastnostech, jako je například změna redoxního potenciálu nebo způsob interakce kofaktoru s enzymem či substrátem. Zmíněné změny mohou dále ovlivňovat katalytickou aktivitu flavinů. Cílem mé práce bylo připravit flavinová analoga, která mají deaktivovaná důležitá vazebná místa. Prvním připraveným kofaktorem je 3-methylriboflavin (I), který oproti přírodnímu derivátu obsahuje methylovou skupinou v poloze N³. Substituce methylovou skupinou flavinu zabraňuje v tvorbě vodíkové vazby, což vede ke snížení aktivity enzymu. Druhým syntetizovaným kofaktorem je 8-hydroxy-10-ribitylisoalloxazin (II), analog přírodního deazaflavinu F₀, ve kterém je uhlík C⁵ nahrazen dusíkem, což způsobuje zvýšení redoxního potenciálu a omezuje katalytické schopnosti původního kofaktoru. Třetí analog, 8-desmethylriboflavin (III), na rozdíl od přírodního derivátu nemá substituovanou polohu C⁸. Tato modifikace znemožňuje tvorbu kovalentní vazby mezi enzymem a flavinovým kofaktorem, která enzymu dovoluje modulovat katalytickou aktivitu flavinu nebo vázat objemnější substráty.

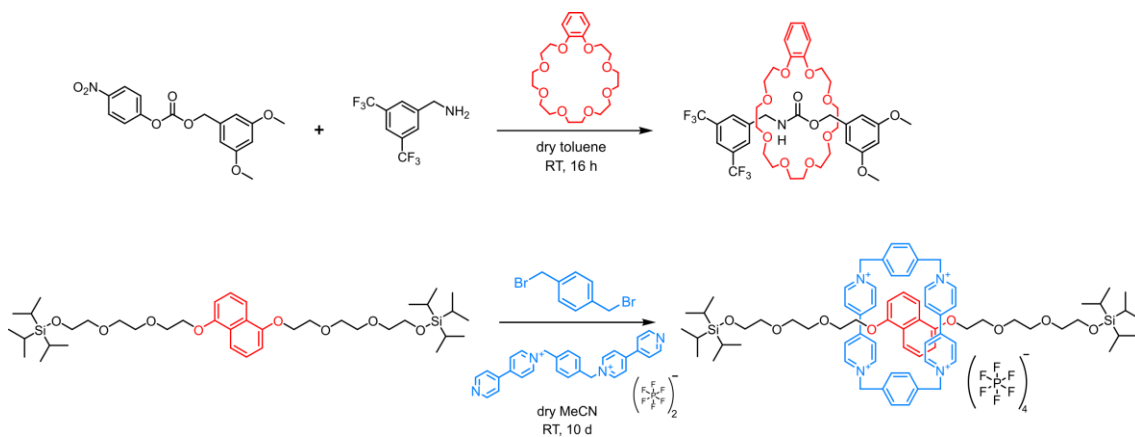


The Radiochemistry of Rotaxanes

Bc. František Stara (M2)

Školitel: Ing. Petra Ménová, Ph.D.

Radiation activated prodrugs represent one approach to developing drugs capable of targeting tissue with high degree of precision. By selectively activating cytotoxic drugs only at the site of an irradiated tumor, the systemic side-effects typical for chemotherapy would be reduced. Such drugs could prove useful for cancer patients that undergo concurrent radiotherapy and chemotherapy treatments. This work looks into the possibility of using mechanically interlocked molecules (MIMs) as a template design for creating these radiation-activated prodrugs. MIMs are a class of chemicals with a unique interlocked molecular structure which were shown to exhibit co-conformational flexibility and dynamic response to stimuli. In order to take advantage of the radiation-activation strategy, MIMs that undergo selective and predictable break-down under radiation need to be developed and tested. This work presents the results of a five-month internship towards this goal. The internship was carried out at the KTH Royal Institute of Technology in the research group of Fredrik Schaefelberger. During this internship, two [2]rotaxanes were successfully synthesized and their stability under γ -radiation was tested.

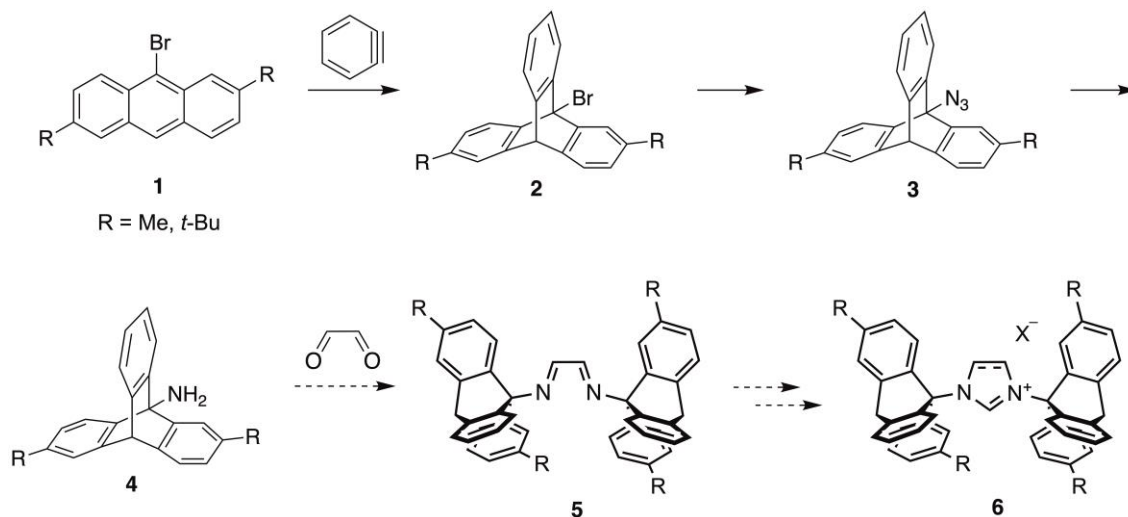


Chirální 9-substituované triptyceny

Bc. Šárka Polívková (M2)

Školitel: Ing. Markéta Rybáčková, Ph.D.

Triptyceny substituované v polohách 2 a 6 patří mezi zajímavé chirální sloučeniny, které by mohly najít uplatnění při asymetrické syntéze jako součást enantioselektivních činidel či katalyzátorů na bázi NHC ligandů, připravených z imidazoliových nebo dihydroimidazoliových solí 6. Tato práce se zabývá přípravou diiminů 5, které představují prekurzory (dihydro)imidazoliových solí 6. Navržená syntéza diiminů 5 vychází z trisubstituovaných 9-bromanthracenů 1, které se převedou na příslušné 9-bromtriptyceny 2 pomocí Dielskovy-Alderovy reakce s *in-situ* generovaným benzynem. Ze vzniklých 9-bromtriptycenů 2 je možné připravit azidy 3, a ty následně zredukovat na aminy 4. Posledním krokem přípravy diiminů 5 je pak kondenzační reakce triptycen-9-aminů 4 s glyoxalem.



Organická chemie magisterská M4

MÍSTO: A278C

KOMISE

prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc. (předseda)

Ing. Radek Jurok, Ph.D. - tajemník

prof. RNDr. Jan Kotek, Ph.D. (PřF UK)

Ing. Ondřej Kunderát, Ph.D.

Ing. Martin Valík, Ph.D. (Teva)

Ing. Aneta Rychtr (DonauLab)

PROGRAM

09:15 [Bc. Adam Pospíšil](#) (M1, doc. Ing. Michal Kohout, Ph.D.)

Design a syntéza polárních materiálů aneb cesta k ferroelektrické nematické mesofázi

09:30 [Bc. Daniel Kozový](#) (M2, Mgr. et Mgr. Pavla Perlíková, Ph.D.)

Příprava proléčiv migrastatických cytochalanových analogů se zvýšenou rozpustností

09:45 [Bc. Scarlet Stefanie Vraník](#) (M2, doc. Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D.)

Příprava amínů z aminoalkoholů

10:00 [Bc. Lukáš Dvořák](#) (M2, Ing. Radek Jurok, Ph.D.)

Syntéza deuterovaných derivátů fytoKANABINOIDŮ jako vnitřních standardů pro LC-MS

10:15 Coffee Break

10:30 [Bc. Hynek Varga](#) (M2, prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.)

Fragmentová syntéza monothiacalix[4]arenů a jejich derivatizace

10:45 [Bc. Ondřej Jeřowicz](#) (M1, Ing. Markéta Rybáčková, Ph.D.)

1-(9-Anthryl)-1H-imidazol jako prekurzor ypticenových imidazoliových solí

11:00 [Bc. Eliška Vlasáková](#) (M2, doc. Dr. Ing. Jana Hodačová)

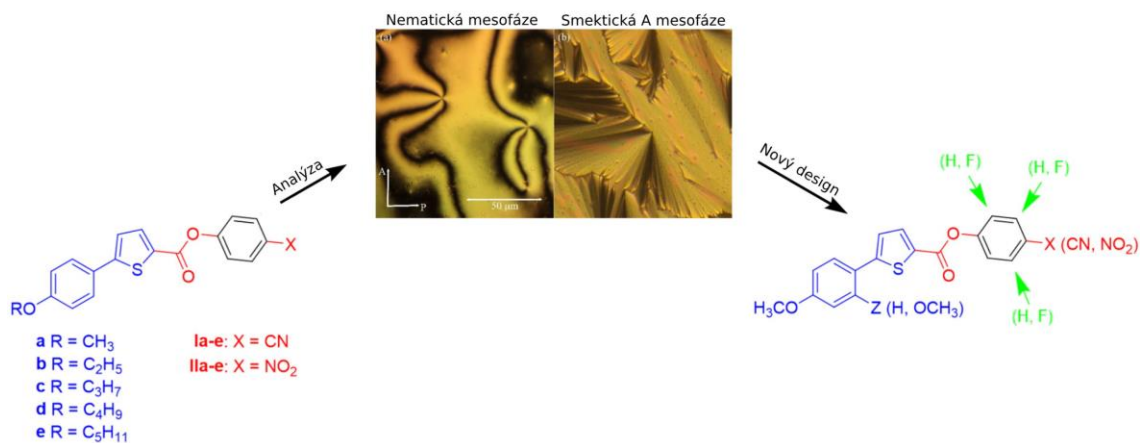
Příprava rel-(1R,2R)-cyklohex-4-en-1,2-diolu a jeho využití při přípravách organokřemičitých materiálů

Design a syntéza polárních materiálů aneb cesta k ferroelektrické nematické mesofázi

Bc. Adam Pospíšil (M1)

Školitel: doc. Ing. Michal Kohout, Ph.D.

Cílem této práce je design a syntéza nových kapalně-krytalických materiálů s ferroelektrickou nematickou mesofází. Byly připraveny celkem 3 série látek s 2,5-disubstituovaným thiofenem jakožto centrálním jádrem, a prodlužujícími rameny obsahující jednu alkoxy skupinu v donorové části molekuly a různé typy elektronakceptororních substituentů v části akceptorové. Série jedna a dvě obsahovaly alkoxy substituenty o délce C_1 až C_5 s rozdílem v akceptorové části molekuly, kde první série měla ve struktuře kyanskupinu a druhá nitroskupinu. Na základě výsledků analýzy mesomorfního chování látek z prvních dvou sérií, literární rešerše a výpočtů dipólových momentů, byla navržena struktura série tři. Tato série byla omezena pouze na methoxy substituent v donorové části molekuly, ale naopak docházelo ke změnám v akceptorové části, kam byly vedle kyan a nitro skupiny do různých poloh zavedeny atomy fluoru. Struktury cílových látek byly ověřeny 1H a ^{13}C NMR spektroskopií a mesomorfní chování bylo určeno pomocí diferenční skenovací kalorimetrie a optické polarizační mikroskopie ve spolupráci s Fyzikálním ústavem AV ČR.



Příprava proléčiv migrastatických cytochalanových analogů se zvýšenou rozpustností

Bc. Daniel Kozový (M2)

Školitel: Mgr. et Mgr. Pavla Perlíková, Ph.D.

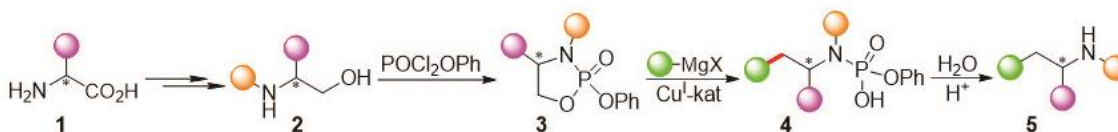
Syntéza proléčiv migrastatických cytochalanových analogů. Cytochalasany jsou metabolity hub, produkované především zástupci z řádu dřevnatkotvarých (*Xylariales*). Mnohé cytochalasany disponují biologickou aktivitou, jako např.: inhibice růstu rostlin, antimikrobiální působení, ale hlavně inhibice polymerizace aktinu. Cytochalasin B a D mají následkem destabilizace aktinového cytoskeletu migrastatickou aktivitu. Migrastatická aktivita je definována jako schopnost inhibovat všechny typy invazivity nádorových buněk a tvořit metastázy. V naší laboratoři již byly připraveny aktivní analogy cytochalinů, ale vzhledem k tomu, že jsou cytochalasiny velmi špatně rozpustné ve vodě, je cílem této práce syntéza proléčiv se zvýšenou rozpustností. Několikastupňová syntéza cytochalinových analogů vycházející z l-fenylalaninu byla optimalizována a následně bude připravena řada proléčiv pro testování biologické aktivity. Připravovanými typy proléčiv budou N-Mannichovy báze (I) a poté proléčiva esterového (II) nebo fosfátového typu (III).

Príprava amínov z aminoalkoholov

Bc. Scarlet Stefanie Vraník (M2)

Školiteľ: doc. Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D.

Amíny ako celok majú nezastupiteľné miesto v medicínálnej chémii. Počet syntetických ciest vedúcich k amínom je veľké množstvo, avšak pri viacerých sa stretávame s problémami so stereoselektivitou, či jednoduchosťou prevedenia. V tejto práci sa sústreďí na syntézu amínov z aminoalkoholov, čo je výhodné z viacerých hľadísk. Sú to jednoducho dostupné látky a v budúcnosti existuje potenciál použitia prirodzene enantiomerne čistých aminokyselín ako východiskových látok. Syntéza je navrhnutá tak, že sa očakáva stereospecificita jednotlivých krokov. Kľúčovým krokom je výroba fosformamidátu z aminoalkoholu, ktorý sa následne podrobí cross-coupling reakcii. Práca sa aktuálne sústreďí sa štúdium reaktivity fosforamidátu s organokovmi.



Syntéza deuterovaných derivátů fytoKANABINOIDŮ jako vnitřních standardů pro LC-MS

Bc. Lukáš Dvořák (M2)

Školitel: Ing. Radek Jurok, Ph.D.

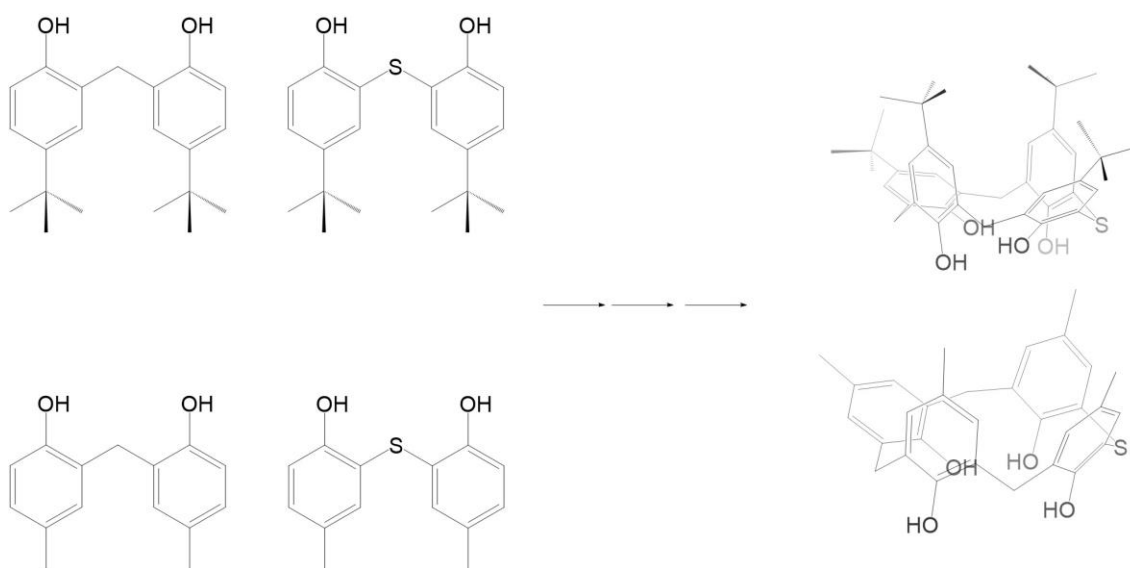
FytoKANABINOIDY, zejména pak KANABIDIOL (CBD) a Δ^9 -tetrahydroKANABINOL (Δ^9 -THC), jsou klíčovými bioaktivními složkami, které se vyskytují v rostlinách konopí (*Cannabis*). S rostoucím vědeckým poznáním jejich terapeutických vlastností a také rozšiřující se legalizací konopí po celém světě neustále stoupá poptávka po komerčních produktech obsahující fytoKANABINOIDY. Pro zajištění bezpečnosti a přesnosti těchto produktů je nezbytné jejich důkladné analytické hodnocení. Deuteriem značené deriváty fytoKANABINOIDŮ jsou nezbytné v hmotnostní spektrometrii jako vnitřní standardy pro přesnou kvalitativní a kvantitativní analýzu. Tato práce se zaměřuje na výběr vhodného syntetického přístupu pro nejdůležitější fytoKANABINOIDY, optimalizaci jednotlivých kroků a syntézu příslušných deuterovaných derivátů. Cílem této práce bylo vyvinout univerzální syntézu fytoKANABINOIDŮ, umožňující efektivní přípravu jednotlivých deuterovaných derivátů. Vzhledem k ceně výchozích deuterovaných sloučenin bylo nezbytné optimalizovat syntézu tak, aby bylo dosaženo co nejvyšších výtěžků. Takto bylo úspěšně připraveno několik deuterovaných derivátů fytoKANABINOIDŮ, které byly následně přečištěny na čistotu vhodnou pro použití jako vnitřních standardů v LC-MS/MS.

Fragmentová syntéza monothiacalix[4]arenů a jejich derivatizace

Bc. Hynek Varga (M2)

Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Cílem práce je syntéza monothiacalix[4]arenů coby představitelů nové skupiny calixarenů se smíšenými můstky. Syntéza je založena na kondenzaci vhodně substituovaných fragmentů – dimerů, které byly připraveny z výchozích para-substituovaných fenolů. Takto získané makrocykly, nesoucí na horním okraji methylové, popř. terc-butylové skupiny, jsou podrobeny alkylačním reakcím spodního okraje za účelem studia konformačních preferencí těchto systémů. Výsledky budou porovnány se situací v mateřských makrocyclech, tedy v klasických calix[4]arenech a thiacalix[4]arenech.

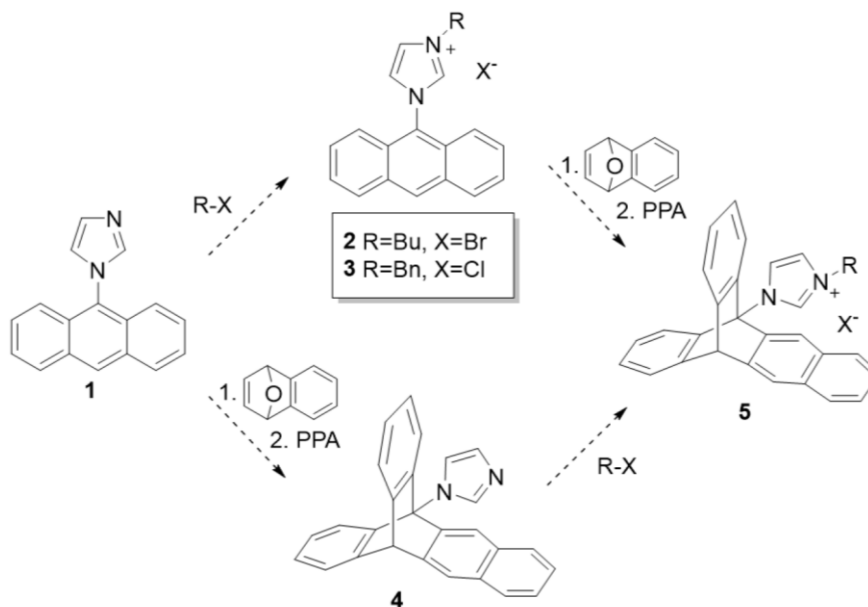


1-(9-Anthryl)-1H-imidazol jako prekurzor ypticenových imidazoliových solí

Bc. Ondřej Jeřowicz (M1)

Školitel: Ing. Markéta Rybáčková, Ph.D.

NHC ligandy jsou součástí celé řady katalyzátorů, jako je například rutheniový Grubbsův katalyzátor 2. generace, který se používá při metatezi alkenů nebo palladiový PEPPSI katalyzátor využívaný pro Suzukiho coupling. Cílem této práce je příprava 1-(9-anthryl)-1H-imidazolu (1), který představuje prekurzor imidazoliových solí 5. Pro jejich přípravu byly navrženy dvě syntetické cesty. První spočívá v převedení anthrylimidazolu 1 na imidazoliové soli 2 a 3, které by reakcí s 1,4-epoxy-1,4-dihydronaftalenem a následnou aromatizací polyfosforečnou kyselinou (PPA) poskytly imidazoliovou sůl 5 nesoucí ypticenovou stavební jednotku vázanou přes můstkový atom. Druhá cesta vedoucí k imidazoliové soli 5 je založena na vybudování triptycenového jádra za vzniku imidazolu 4 a následné tvorbě imidazoliové soli. Oba syntetické přístupy budou porovnány.



Příprava *rel*-(1*R*,2*R*)-cyklohex-4-en-1,2-diolu a jeho využití při přípravách organokřemičitých materiálů

Bc. Eliška Vlasáková (M2)

Školitel: doc. Dr. Ing. Jana Hodačová

Práce se zabývá přípravou enantiomerně čistého hybridního organokřemičitého materiálu **1**, který by sloužil jako heterogenní katalyzátor v enantioselektivních reakcích. V křemičitém materiálu je zabudován strukturní motiv *trans*-cyklohexan-1,2-diaminu, který je součástí mnoha homogenních katalyzátorů^{1,2}. V rámci bakalářské práce byla vypracována syntetická sekvence (Schéma 1), pomocí které byly později syntetizovány dva enantiomerně čisté hybridní organokřemičité materiály. Jeden z materiálů byl otestován na enantioselektivní Henryho reakci nitromethanu s benzaldehydem, která poskytla 2-nitroalkohol ve výtěžku 48 % s *ee* 59 %. Pro další studie bude potřeba připravit větší množství prekursoru **2**. Klíčovým krokem celé syntézy je štěpení racemického *trans*-cyklohex-4-en-1,2-diolu (**3**), proto jsem se zaměřila na hledání vhodné štěpící metody, která by umožnila multigramovou přípravu diolu **3**. Dalším důležitým intermediátem je *rel*-(1*R*,2*R*)-1,2-diazidocyklohex-4-en (**4**). Věnovala jsem se proto též optimalizaci této syntézy.

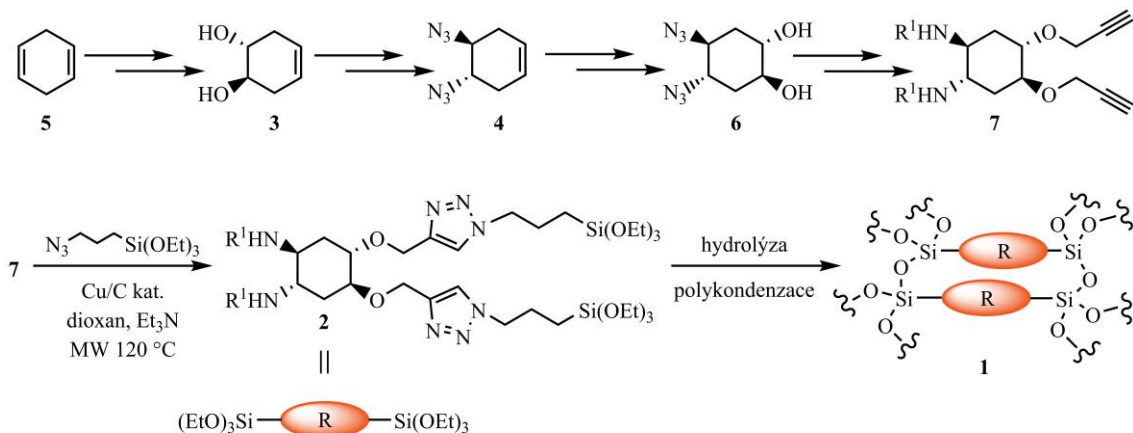


Schéma 1: Syntéza organokřemičitého materiálu **1**, kde $\text{R}^1 = \text{Boc}, \text{Bn}$

Literatura:

- Bennani, Y. L.; Hanessian, S., Chem. Rev., **1997**, 97 (8), 3161-3196.
- Tetour, D.; Novotná, M.; Hodačová, J., Catalysts, **2021**, 11, 41.

Ústav organické technologie

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Iva Paterová, Ph.D.

SEZNAM SEKČÍ

1. [Organická a farmaceutická technologie I](#)
2. [Organická a farmaceutická technologie II](#)
3. [Organická a farmaceutická technologie III](#)
4. [Organická a farmaceutická technologie IV](#)
5. [Organická a farmaceutická technologie V](#)

Organická a farmaceutická technologie I

MÍSTO: A77C

KOMISE

prof. Ing. Petr Zámotný, Ph.D. (předseda)

Ing. Iva Paterová, Ph.D.

Ing. Martin Zapletal, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

[Lucia Gabošová](#) (B3, Ing. Maria Kotova, Ph.D.)

Příprava linalyl-acetátu.

[Ludmila Kolářová](#) (B3, doc. Ing. Eliška Vyskočilová, Ph.D.)

Příprava citronellyl acetátu transesterifikací

[Bc. Lucie Kočová](#) (M1, doc. Mgr. Jarmila Zbytovská, Dr. rer. nat.)

Příprava a charakterizace polymerních nanočástic s dexamethasonem

[Bc. Martin Králík](#) (M1, Ing. Tereza Školáková, Ph.D.)

Formulace a in vitro charakterizace liquisolid systémů

[Martin Kubelka](#) (B3, doc. Mgr. Jarmila Zbytovská, Dr. rer. nat.)

Vliv typu ceramidu na obnovu poškozené kožní bariéry

[Bc. Anna Křížová](#) (M1, doc. Ing. Eliška Vyskočilová, Ph.D.)

Příprava molekulárně otištěných polymerů s využitím thymolu jako templátu

[Nikolas Letzel](#) (B2, Ing. Martin Veselý, Ph.D.)

Minimalizace uvolňování hliníku z Raneyova niklového katalyzátoru do reakční směsi

[Bc. Jitka Malínská](#) (M1, Ing. Iva Paterová, Ph.D.)

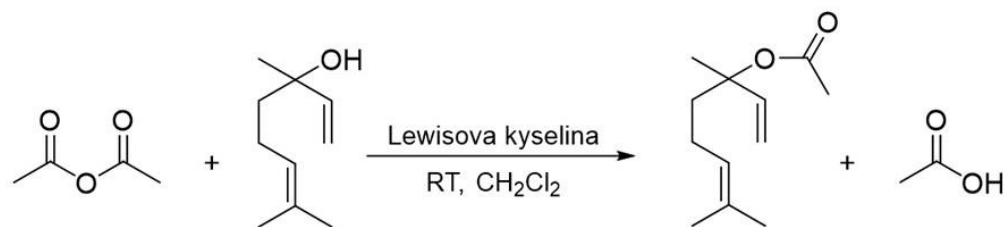
Hydrogenace dehydrosantalínu na Ru katalyzátoru

Príprava linalyl-acetátu.

Lucia Gabošová (B3)

Školiteľ: Ing. Maria Kotova, Ph.D.

Linalool (3,7-dimethyl-1,6-oktadien-3-ol) je terciárny alkohol vyskytujúci sa vo forme dvoch enantiomérov, ktoré sa líšia svojimi fyzikálnymi vlastnosťami. Linalool a jeho ester linalyl-acetát sa vďaka vonným vlastnostiam používajú v kozmetike a drogérií ako vonná prísada. Štúdiami bola preukázaná taktiež rôznorodá biologická aktivita linalyl-acetátu. Kvôli sterickému bráneniu hydroxylovej skupiny je príprava linalyl-acetátu technologicky náročná a spravidla poskytuje malé výťažky. Cieľom tejto práce je príprava linalyl-acetátu kyslo katalyzovanou acetyláciou linaloolu pomocou anhydridu kyseliny octovej (obr. 1) a optimalizácia reakčných podmienok. Ako katalyzátory boli použité Lewisove kyseliny, napríklad BiBr_3 , $\text{Sc}(\text{OTf})_3$ a $\text{Zn}(\text{OTf})_2$ ($\text{OTf} = \text{CF}_3\text{SO}_3^-$). V tejto práci bol sledovaný vplyv druhu katalyzátora a pomeru reaktantov na konverziu linaloolu a selektivitu tvorby linalyl-acetátu.



Obr. 1: Syntéza linalyl-acetátu acetyláciou linaloolu anhydridom kyseliny octovej

Příprava citronellyl acetátu transesterifikací

Ludmila Kolářová (B3)

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

Citronellol a citronellyl-acetát patří mezi přírodní látky, konkrétně mezi kyslíkaté deriváty monoterpenů. Jsou to sekundární metabolity rostlin, které slouží především jako atraktanty nebo repelenty. Díky své vůni mohou lákat opylovače nebo naopak odpuzovat škůdce. Obě látky se využívají jako vonné látky v kosmetice a mohou být také součástí parfémových kompozic nebo aromat v potravinách. (*R*)-citronellol má citrónovou vůni a citronellyl-acetát voní jako růže. Tato práce je zaměřená na přípravu citronellyl-acetátu kysele katalyzovanou transesterifikací citronellolu. V první části práce byl zkoumán vliv katalyzátoru na průběh reakce. Na studium tohoto vlivu byl použit jako transesterifikační činidlo ethyl-acetát. Z pěti testovaných katalyzátorů se jako nejlepší ukázala kyselina *p*-toluensulfonová (PTSA). Po dvou hodinách při použití 12 mol. % PTSA byla konverze citronellolu 76 % se selektivitou 95 % pro citronellyl-acetát. PTSA byla dále použita jako katalyzátor ve všech následujících reakcích. Další část práce se týkala vlivu množství katalyzátoru s použitím ethyl-acetátu jako transesterifikačního činidla. Práce má potenciál pro využití mimo jiné i proto, že je v souladu s principy zelené chemie. Produkt vzniká poměrně rychle a s vysokou selektivitou i při nízké teplotě.

Příprava a charakterizace polymerních nanočástic s dexamethasonem

Bc. Lucie Kočová (M1)

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

Formulace a in vitro charakterizace liquisolid systémů

Bc. Martin Králík (M1)

Školitel: Ing. Tereza Školáková, Ph.D.

Cílem práce byla formulace liquisolid systémů (LSS) a jejich následné zhodnocení. Liquisolid systémy neboli systémy kapalina v pevné fázi jsou lékovou formulací zlepšující biodostupnost léčivé látky. K přípravě LSS byl použit indomethacin jako modelová léčivá látka, Neusilin® US2, FujiSil® a Avicel® PH-101 byly použity jako nosiče, Aerosil® 200 a Syloid® Al-1 FP byly použity jako obalovací materiály a PEG 200, PEG 400 a Tween® 80 byly použity jako rozpouštědla. Připravené LSS byly tabletovány při různém lisovacím zatížení a poté byla proměřena radiální pevnost jejich tablet. Nejvyšší hodnoty radiální pevnosti vykazovaly tablety připravené ze směsi indomethacin, Neusilin® US 2, Syloid® Al-1 FP a PEG 200. Dále byly tablety z LSS podrobeny disoluční zkoušce (USP 2). Bylo zjištěno, že dané LSS jsou na základě disolučních křivek potenciálně vhodné k prodlouženému uvolňování. Dále bylo zjištěno, že LSS obsahující Avicel® PH-101 mají menší schopnost zadržet použitá rozpouštědla než systémy, které jako nosič obsahují Neusilin® US2 či FujiSil®. LSS obsahující Neusilin® US2 vykazovaly vyšší nebo srovnatelnou rychlost uvolňování API jako LSS obsahující FujiSil®.

Vliv typu ceramidu na obnovu poškozené kožní bariéry

Martin Kubelka (B3)

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

Stratum corneum, nejvrchnější vrstva kůže, slouží jako klíčová bariéra proti toxinům z prostředí a dehydrataci. Jeho zdraví a funkčnost jsou úzce spojeny s přítomností sfingolipidů jménem ceramidy, které se zde přirozeně vyskytují a jsou esenciální pro tvorbu lipidové matrix, která je zodpovědná za bariérové schopnosti kůže. Pokles jejich koncentrace vede k oslabení kožní bariéry, což může způsobit různá onemocnění kůže, jako je ekzém nebo psoriáza. V současné době se pro řešení tohoto problému používají léčiva na bázi kortikosteroidů, které ale mají mnoho vedlejších účinků a mohou na ně vznikat alergické reakce. Naproti tomu regenerace pokožky přímou aplikací chybějících ceramidů se jeví jako kvalitní alternativa. Naše vědecká skupina prokázala pozitivní účinky lipozomální formulace obsahující dva typy ceramidů – C3 a C6, na regeneraci pokožky. Dosud ale nebyla popsána účinnost samotného C3 a C6. Cílem mé práce bylo popsat rozdíl mezi cerosomy obsahující pouze zmíněný C3 či C6, které byly připraveny metodou hydratace lipidového filmu a vysokotlakou homogenizací. Cerosomy byly charakterizovány pomocí dynamického rozptylu světla, čímž byla stanovena jejich velikost a povrchový náboj. Efekt na obnovu bariérových schopností kůže byl ověřen v rámci *ex vivo* studií na prasečí kůži.

Příprava molekulárně otištěných polymerů s využitím thymolu jako templátu

Bc. Anna Křížová (M1)

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

Molekulárně otištěné polymery (MIPy) jsou polymerní materiály při jejichž syntéze je do vznikající struktury otištěna cílová (templátová) molekula, která po sobě zanechá v polymerní matici komplementární kavity. MIPy je možné využít pro analytické metody jako jsou chromatografická separace, či extrakce na pevné fázi, další jejich významnou aplikací je cílený transport léčiv a mohou být taktéž použity jako rozpoznávací prvek pro elektrochemické biosenzory. Tato práce se zabývala syntézou molekulárně otištěných polymerů blokovou polymerací s thymolem jako templátem, optimalizací extrakce (metoda – třepání, míchání, Soxhletova extrakce; rozpouštědlo – methanol, isopropylalkohol, diethylether) thymolu z připraveného polymeru a využitím připraveného polymeru jako stacionární fáze pro extrakci na pevné fázi (SPE). Z testovaných extrakčních metod dosáhla nejlepších výsledků extrakce v Soxhletově extraktoru při použití methanolu jako extrakčního činidla (výtěžek extrakce 60 % po 5 h). Byla potvrzena možnost využití připraveného molekulárně otištěného polymeru jako stacionární fáze pro SPE, přičemž minimální kapacita polymeru byla 20 mg thymolu/g MIPu. Zachycený thymol byl následně kvantitativně eluován jak methanolem, tak isopropylalkoholem.

Minimalizace uvolňování hliníku z Raneyova niklového katalyzátoru do reakční směsi

Nikolas Letzel (B2)

Školitel: Ing. Martin Veselý, Ph.D.

Raneyův niklový katalyzátor je jedním z nejpoužívanějších hydrogenačních činidel. Při reakcích se z něho do reakční směsi uvolňuje hliník, který je nedílnou součástí při výrobě katalyzátoru, ale nežádoucí při jeho použití. V úvodní části této práce byla provedena série vyluhovacích experimentů, při nichž bylo sledováno množství uvolňovaného hliníku v závislosti na pH, teplotě a času. Při provedení 72hodinového experimentu s pH 13 a teplotou 35 °C bylo z Raneyova niklu vylouženo 30 % hliníku. Následně byla modelovými hydrogenacemi (glukózy a benzonitrilu) ověřena nesnížená aktivita takto vylouženého katalyzátoru a zároveň bylo dosaženo poklesu kontaminace produktu hliníkem až na desetinu oproti použití čerstvého katalyzátoru. Koncentrace hliníku byly stanovovány pomocí atomové absorpční spektrometrie a UV/VIS spektrofotometrie.

Hydrogenace dehydrosantalínu na Ru katalyzátoru

Bc. Jitka Malínská (M1)

Školitel: Ing. Iva Paterová, Ph.D.

2-Methyl-4-(2,2,3-trimethyl-3-cyclopenten-1-yl)-1-butanol známý pod komerčním názvem Brahmanol je alkohol s širokým využitím v parfumářském a potravinářském průmyslu. Cílem této práce byla příprava výchozích látek a následná optimalizace přípravy Brahmanolu. Syntéza začíná izomerací α -pinenoxidu a vzniklý kamfolenický aldehyd je následně kondenzován s propanalem za vzniku dehydrosantalínu. Ten je následně hydrogenován v autoklávu s využitím Ru katalyzátorů. Byl studován vliv různých rozpouštědel, Ru katalyzátorů, reakční teploty a tlaku vodíku na průběh reakce. Optimalizací reakčních podmínek bylo při hydrogenaci dosaženo 100% konverze a 80% selektivity k Brahmanolu.

Organická a farmaceutická technologie II

MÍSTO: S02

KOMISE

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

Ing. Aneta Kalvodová

doc. Ing. Bohumír Dvořák, CSc.

PROGRAM

09:00 zahájení

[Bc. Simona Havrilová](#) (M1, Ing. Martin Veselý, Ph.D.)

Heterogenita katalytické aktivity hydrotalcitů na úrovni jednotlivé částice katalyzátoru

[Bc. Jan Hladovec](#) (M1, doc. Ing. Eliška Vyskočilová, Ph.D.)

Sorpce biologicky aktivních látek s pyridinovou jednotkou na silikátové materiály

[Bc. Anna Kutějová](#) (M1, Ing. Tereza Školáková, Ph.D.)

Vliv doby mletí v kulovém mlýnu na povrchovou energii léčivé látky

[Bc. Radek Ludas](#) (M1, prof. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.)

Efektivita lubrikace z pohledu přípravy směsi a typu použitého lubrikantu

[Bc. Lucie Stoupová](#) (M1, Ing. Eva Zapletalová, Ph.D.)

Příprava thymyl esterů

[Bc. Anna Tvrdá](#) (M1, Ing. Lada Dolejšová Sekerová, Ph.D.)

Optimalizace přípravy molekulárně otištěných polymerů s využitím kyseliny laurové jako templátu

[Bc. Tereza Vršatová](#) (M1, Ing. Jan Patera, Ph.D.)

Úprava rychlosti rozpouštění špatně rozpustné léčivé látky společným mletím

[Bc. Aneta Vyskočilová](#) (M1, doc. Mgr. Jarmila Zbytovská, Dr. rer. nat.)

*Charakterizace nanonosičových systémů pro topické podání léčiv pomocí
membránové dialýzy*

Heterogenita katalytickej aktivity hydrotalcitov na úrovni jednotlivej častice katalyzátoru

Bc. Simona Havrilová (M1)

Školiteľ: Ing. Martin Veselý, Ph.D.

Hydrotalcity sú podvojné vrstevnaté hydroxidy, ktorých vlastnosti sa dajú potenciálne využiť, ako vo farmaceutickom, tak v chemickom priemysle. Sú napríklad schopné vystupovať ako heterogénne katalyzátory so schopnosťou katalyzovať širokú škálu chemických reakcií. Nehomogenita jednotlivých hydrotalcitových častíc je zodpovedná za ich variabilnú aktivitu, ako aj rozdielnú selektivitu v priebehu chemickej reakcie. Cieľom práce bol preto vývoj metodiky chemického značkovania jednotlivých hydrotalcitových častíc pomocou modelovej reakcie, ktorou bola disproporcionácia furfuralu, tak aby celkové množstvo prebehnutých reakčných obrátov na jednotlivých časticách mohlo byť stanovené na základe snímok z fluorescenčného mikroskopu. Výsledkom bol rozsah heterogénnej katalytickej aktivity naprieč jednotlivými časticami. Snímky z fluorescenčného mikroskopu boli doplnené o snímky zo SEM, ktoré boli využité ku korelácii samotného chemického (prvkového) zloženia jednotlivých častíc s ich pozorovanou katalytickou aktivitou. Tieto zistenia možno implementovať pri syntéze hydrotalcitových katalyzátorov, a tak spoľahlivo produkovať katalyzátory s uniformnou katalytickou aktivitou a selektivitou.

Sorpce biologicky aktivních látek s pyridinovou jednotkou na silikátové materiály

Bc. Jan Hladovec (M1)

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

V této práci byla sledována adsorpce kyseliny nikotinové, pyridoxinu a alopurinolu. Jde o běžně užívané biologicky aktivní látky. Použitými adsorbenty byly MCM-41 a jeho modifikované varianty MCM-COOH a MCM-NH₂, u kterých byl sledován vliv modifikací na průběh sorpce. Dále bylo pro porovnání zvoleno aktivní uhlí Norit™ SX1 a montmorillonit. Adsorpce byla provedena z roztoků methanolu, dimethylsulfoxidu a ze směsi těchto rozpouštědel, vše za laboratorní teploty. MCM-41 byl schopný díky svému velkému specifickému povrchu (1052 m²/g) adsorbovat modelové látky ze všech rozpouštědel. Množství adsorbované látky a vliv modifikace závisel na použitém rozpouštědle a látce, která byla sorbována. Vhodným rozpouštědlem pro adsorpci kyseliny nikotinové a pyridoxinu byl methanol, v případě alopurinolu pak směs methanolu a dimethylsulfoxidu v objemovém poměru 9:1. Kyselinu nikotinovou nejvíce adsorboval MCM-41 a to v množství 150-200 mg/g adsorbentu. Pyridoxin byl z MeOH nejvíce adsorbován na MCM-NH₂, kde bylo dosaženo adsorpce až 270 mg/g adsorbentu. Alopurinol byl nejvíce adsorbován na MCM-41 a MCM-COOH. U obou těchto materiálů bylo dosaženo adsorpce 700 mg/g adsorbentu. Ze směsi MeOH:DMSO 9:1 byl nejvíce adsorbován alopurinol, z MeOH byl více adsorbován pyridoxin než kyselina nikotinová.

Vliv doby mletí v kulovém mlýnu na povrchovou energii léčivé látky

Bc. Anna Kutějová (M1)

Školitel: Ing. Tereza Školáková, Ph.D.

Cílem této práce bylo zjistit vliv doby a způsobu mletí v kulovém planetovém mlýnu na povrchovou energii léčivé látky naproxenu. Naproxen byl namlet metodou suchého a mokrého mletí. Bylo zjištěno, že velikost částic se obecně s délkou mletí zmenšuje a že menší částice mají tendenci aglomerovat, což bylo potvrzeno i pomocí optického mikroskopu. Pomocí rentgenové práškové difrakce bylo zjištěno, že délka a způsob mletí nemají vliv na formu naproxenu. Pomocí inverzní plynové chromatografie bylo zjištěno, že disperzní složka tvořila vždy větší příspěvek k celkové povrchové energii než složka specifická. Při suchém mletí docházelo při prodlužující se době mlecího procesu k růstu povrchové energie (především její specifické složky) pouze do určité doby, poté dochází pravděpodobně ke stabilizaci povrchu a jeho vlastnosti se tak již neměnily. U mokrého mletí bylo pozorováno, že heptan stabilizuje dle obou hodnot složek povrchové energie povrchové vlastnosti, které jsou tak téměř neměnné po všech dobách mlecího procesu. Dále bylo pozorováno, že menší částice mají obecně větší povrchovou energii. Byly změřeny i kontaktní úhly na tabletách, které byly připraveny z prášků namletého naproxenu. Bylo zjištěno, že všechny vytvořené tablety vykazovaly dobrou smáčivost.

Efektivita lubrikace z pohledu přípravy směsi a typu použitého lubrikantu

Bc. Radek Ludas (M1)

Školitel: prof. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.

Jedním z problémů při výrobě tablet je nadměrná lepivost API, v důsledku čehož jsou produkovány tablety nedostatečné kvality. Nástrojem k eliminaci tohoto problému jsou lubrikanty. Jejich použití je však limitováno obsaženým množstvím v lékové formulaci, jelikož jejich nadměrné množství zhoršuje pevnost tablet a uvolňování API. Klíčovým parametrem je tak co největší efektivita lubrikantu při jeho co nejnižším použitém množství. Práce studuje efekt dvou typů lubrikantů o rozdílném mechanismu účinku a odpovídá na otázku vlivu pořadí přidávaných látek při přípravě směsi na její vlastnosti. Použitými lubrikanty byly stearát hořečnatý a Syloid®. Pro účely práce byly formulovány binární směsi lubrikantu s API a ternární směsi obou lubrikantů s API. Efektivita lubrikace byla studována skrze měření separačního a ejekčního napětí, jakožto lisovacích parametrů. U tablet byla zhodnocena jejich radiální pevnost. Výsledek ukázal, že binární směs Syloidu® s API je nefunkční a vede ke zhoršení studovaných parametrů. Naopak účinky stearátu hořečnatého byly pozitivní. Výsledky ternárních směsí však překvapivě odhalily pozitivní synergický účinek Syloidu® v kombinaci se stearátem, kdy tato směs byla nejefektivnější. Je tak zřejmé, že příprava vícesložkových směsí je závislá na kompozici směsi.

Příprava thymyl esterů

Bc. Lucie Stoupová (M1)

Školitel: Ing. Eva Zapletalová, Ph.D.

Předkládaná práce se zabývá syntézou vybraných thymyl esterů z chloridů či anhydridů příslušných karboxylových kyselin. V rámci práce byl testován vliv reakčních podmínek – volba rozpouštědla, teplota reakce, použitá báze, poměr reaktantů na průběh reakce. Cílem práce bylo nalezení optimálních reakčních podmínek pro syntézu a přípravu vybraného thymyl esteru ve větším měřítku. Z hlediska volby rozpouštědla bylo zjištěno, že optimální výsledky poskytují reakce v dichlormethanu, acetonitrilu, toluenu a 1,4-dioxanu. Bylo zjištěno, že terciární aminy s krátkým uhlíkatým řetězcem – triethylamin, tripropylamin a tributylamin jsou vhodné báze dané syntézy. V malých navážkách nebyl pozorován vliv teploty na průběh reakce. Délka uhlíkatého řetězce pro všechny použité chloridy (C_2 – C_{14}) neměla na průběh reakce vliv. Pro syntézu thymyl esterů je obecně výhodnější využití příslušných chloridů oproti anhydridům z důvodu reakční rychlosti. Po navýšení měřítka bylo zapotřebí reakční směs chladit v ledové lázni. Pro přípravu thymyl esteru ve větším měřítku byl zvolen thymylbutanoát, který byl připraven reakcí butyrylchloridu s thymolem za přítomnosti triethylaminu v dichlormethanu. Po následné extrakci a destilaci byl získán produkt s 99% čistotou.

Optimalizace přípravy molekulárně otištěných polymerů s využitím kyseliny laurové jako templátu

Bc Anna Tvrdá (M1)

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

Molekulárně otištěné polymery (zkratka MIPy) jsou látky schopné specificky navázat určitou látku. Při jejich přípravě dochází k zakomponování molekuly templátu do struktury polymeru. Po odstranění templátu, např. extrakcí, vzniknou specifická vazebná místa pro danou molekulu. Vlastnosti MIPu závisí na polymerizačním mechanismu, typu a množství použitých reaktantů a na dalších podmínkách syntézy (např. teplota či přítomnost inertní atmosféry). MIPy nachází uplatnění např. v analýze odpadních vod, katalýze, při cíleném transportu léčiv, či jako stacionární fáze při extrakci na pevné fázi. Tato práce se zabývala optimalizací podmínek přípravy MIPů, a to teploty, reakční doby a množství reaktantů. Přípravené polymery byly následně použity jako stacionární fáze pro extrakci na pevné fázi. Po zhodnocení průběhu extrakce byl jako nejlepší vybrán polymer připraven při 60 °C, s molárními poměry templát:monomer 1:6, monomer:síťovací činidlo 1:6 a 3 ml porogenu po dobu 60 min.

Úprava rychlosti rozpouštění špatně rozpustné léčivé látky společným mletím

Bc. Tereza Vrňatová (M1)

Školitel: Ing. Jan Patera, Ph.D.

V současné době se stále více nově vyvíjených léčiv potýká se špatnou rozpustností ve vodném prostředí, což může negativně ovlivňovat jejich biodostupnost. Jelikož biodostupnost závisí především na rozpustnosti léčiva, rychlosti rozpouštění a permeabilitě léčiva, je hlavním úkolem pro farmaceutické firmy optimalizace právě těchto parametrů. Rozpustnost léčiva lze zvýšit různými chemickými nebo fyzikálními metodami, mezi které spadá i snížení velikosti částic společným mletím. U společného mletí dochází nejen k zmenšení částic, ale také k zesílení interakcí mezi léčivou látkou a koformerem, což často vede k hydrofilizaci povrchu. Cílem práce bylo zhodnotit vliv různých koformerů na rychlost rozpouštění ezetimibu. Byly připraveny fyzikální i společně mleté směsi v poměrech ezetimib:pomocná látka 1:1 a 1:4, které byly následně podrobeny disolučním testům s průtokovou celou. Pomocí rentgenové práškové difrakční analýzy bylo zjištěno, že jen u společně mletých směsí s laktózou, v obou poměrech, dochází k přechodu mezi krystalickými fázemi ezetimibu – z formy anhydrátu na monohydrát. Z výsledků disolučních testů vyplývá, že fyzikální i společně mleté směsi v poměru 1:4 vykazují vyšší množství uvolněné léčivé látky než směsi v poměru 1:1.

Charakterizace nanonosičových systémů pro topické podání léčiv pomocí membránové dialýzy

Bc. Aneta Vyskočilová (M1)

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

Tato práce se zabývá využitím membránové dialýzy pro stanovení disolučního profilu léčiv z nanočásticových formulací. V první řadě se testuje vhodnost této metody pro léčiva indometacin a kofein. Obě tyto látky byly inkorporovány do lipidových a polymerních nanočástic. Poté byly podrobeny *in vitro* membránové dialýze a následně *ex vivo* permeačnímu experimentu. Pomocí membránové dialýzy můžeme stanovit disoluční profil léčiva. Ten popisuje rychlost uvolňování léčiv z různých typů nanočástic. Druhým cílem bylo zjistit, zda výsledky *in vitro* membránové dialýzy korelují s výsledky *ex vivo* permeačního experimentu. Z výsledků *in vitro* membránové dialýzy indometacinu lze usoudit, že lipofilní látka se rychle a prudce uvolňuje z polymerních nanočástic. Oproti tomu z lipidových nanočástic uvolňování probíhá postupně v průběhu celého experimentu. Pro kofein již rozdíly v uvolňování z lipidových a polymerních nanočástic nejsou tak výrazné. Rychlostní profil je pro oba typy nanočástic téměř stejný, z lipidových nanočástic je však látka uvolňována až na úroveň sta procent a z polymerních nanočástic uvolňování probíhá okolo osmdesáti procent. Výsledky pro obě látky korelují s výsledky *ex vivo* permeačního experimentu.

Organická a farmaceutická technologie III

MÍSTO: A01

KOMISE

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

Ing. Tomáš Sommer, Ph.D.

Ing. Martin Veselý, Ph.D.

Ing. Tereza Školáková, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

[Bc. Jakub Bočko](#) (M2, Ing. Tomáš Sommer, Ph.D.)

Výzkum výťažku FAME z hlediska vstupných surovín

[Bc. Helena Hinterholzová](#) (M2, Ing. Iva Paterová, Ph.D.)

Studium kinetiky esterifikace glycerolu kyselinou propanovou a butanovou

[Bc. Veronika Hrůzová](#) (M2, prof. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.)

Optimalizace výroby tablet přímým lisováním

[Bc. Jiří Machyán](#) (M2, Ing. Tereza Školáková, Ph.D.)

Studium disolučního chování pevných disperzí naproxenu

[Bc. Jana Mušková](#) (M2, Ing. Maria Kotová, Ph.D.)

Hydrogenace esterů kyseliny itakonové

[Bc. Martin Sap](#) (M2, Ing. Kamila Syslová, Ph.D.)

Zkoumání vlivu bezlepkové diety na Parkinsonovu chorobu s využitím NMR metabolomiky

[Bc. Tereza Staňková](#) (M2, prof. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.)

Vliv přidání rozvolňovadla na velikost částic během dezintegrace tablet

[Bc. Kateřina Čermáková](#) (M2, doc. Mgr. Jarmila Zbytovská, Dr. rer. nat.)

Role kyseliny hyaluronové jako vehikula nanosystémů pro dermální podání

Výzkum výťažku FAME z hlediska vstupných surovín

Bc. Jakub Bočko (M2)

Školitel: Ing. Tomáš Sommer, Ph.D.

Projekt byl zaměřen na sledování přeměny látek v čase při kyselé esterifikaci s následnou transesterifikací jako podkladu k vyhodnocení optimalizace procesu průmyslového partnera. Laboratorní experimenty byly provedeny na šesti různých vstupních surovinách, které byly charakterizovány jejich složením a výpočtem teoretického výtěžku FAME. Vzorky byly analyzovány metodou plynové chromatografie vyvinutou na míru tomuto projektu. Metodou totální methanolýzy byla stanovena minimální teoretická spotřeba vstupních surovin k výtěžku FAME. U nejlepších vzorků je teoreticky dosažitelná spotřeba vstupní suroviny na výrobu 1 t FAME menší než při stávající průmyslové výrobě. Zároveň byla zjištěna korelace s obsahem glyceridů ve vstupní surovině. Suroviny obsahující glyceridy vykazovali lepší teoretickou výtěžnost než suroviny, které glyceridy neobsahují. Byly provedeny laboratorní experimenty kyselé esterifikace při 60 °C za atmosférického tlaku a při 120 °C za tlaku 4,5–5,5 bar. Z experimentů vyplývá, že byl dosažen významně vyšší obsah esterů ve výsledném proudu FAME než udává průmyslný partner. To lze vysvětlit kvalitou dispergace reakční směsi v laboratorních podmínkách, kdy je snáze a rychleji dosaženo kinetické oblasti a požadované koncentrace esterů v reakční směsi.

Studium kinetiky esterifikace glycerolu kyselinou propanovou a butanovou

Bc. Helena Hinterholzová (M2)

Školitel: Ing. Iva Paterová, Ph.D.

Díky obavám z antimikrobiální rezistence je používání antibiotik jako stimulátorů růstu u zvířat v EU od roku 2006 zakázáno a je zde snaha nacházet látky nové, na které rezistence nevzniká. Monoglyceridy kyseliny propanové či butanové vykazují antimikrobiální aktivitu a jsou tak vhodnými látkami, které by nahradily antibiotika např. v krmivech pro drůbež. Jejich hlavní výhodou je nevznikající rezistence, zrychlování růstu zvířat a zvyšování kvality vajec a masa drůbeže. Práce se zaměřuje na studium kinetiky esterifikace glycerolu s kyselinou butanovou či propanovou a na optimalizaci podmínek této reakce. Byl studován vliv teploty reakce a množství katalyzátoru H_2SO_4 . Pro reakci s kyselinou butanovou bylo nejvyšší koncentrace monoglyceridů dosaženo při teplotě $80\text{ }^\circ\text{C}$ a $0,1\text{ hm. \% H}_2\text{SO}_4$. Po 300 minutách reakce byla výsledná koncentrace monoglyceridů $3,37\text{ mol/l}$ a rychlostní konstanta vypočtená regresí v programu ERA byla $0,16\text{ dm}^3\cdot\text{mol}^{-3}\cdot\text{min}^{-1}$. Nejlepších výsledků s kyselinou propanovou bylo dosaženo za stejné teploty i množství katalyzátoru jako s kyselinou butanovou. Výsledná koncentrace monoglyceridů po 300 minutách reakce byla $3,71\text{ mol/l}$ a rychlostní konstanta vypočtená regresí v programu ERA byla $0,211\text{ dm}^3\cdot\text{mol}^{-3}\cdot\text{min}^{-1}$.

Optimalizace výroby tablet přímým lisováním

Bc. Veronika Hrůzová (M2)

Školitel: prof. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.

Směs pro přípravu farmaceutických tablet (tabletovina) musí splňovat mnoho kritérií, aby vyhověla požadavkům na efektivitu výroby a legislativě. Pro tablety s vysokým obsahem účinné látky (API) je běžnou praxí tabletovinu po smísení složek dále upravovat např. granulací. Cílem této práce je vyvarovat se zmíněných dalších úprav směsi a připravit vysokodávkové tablety ibuprofenu metodou přímého lisování. V první fázi výzkumu byly studovány binární směsi ibuprofenu a plniva (laktosa, mikrokrytalická celulóza), u nichž bylo při lisování zjištěno, že nevyhovují svými kompaktačními vlastnostmi, proto byly rozšířeny o lubrikant. Racionálním přístupem byly vybrány směsi, na nichž byl v další fázi studován rozpad tablet. Zde se ukázala nutnost přidání rozvolňovadla do tablet obsahujících laktosu. Směsi byly nakonec komplexně zhodnoceny bezrozměrným kritériem vyrobitelnosti, které ukázalo, že nejlepší vlastnosti vykazuje směs s mikrokrytalickou celulózou obsahující 0,75 hm.% lubrikantu. Z laktosových směsí se nejlépe jevila směs s 0,75 hm. % lubrikantu a 2 hm. % rozvolňovadla. Vhodnost tablet z vybraných směsí byla ověřena disoluční zkouškou.

Studium disolučního chování pevných disperzí naproxenu

Bc. Jiří Machyán (M2)

Školitel: Ing. Tereza Školáková, Ph.D.

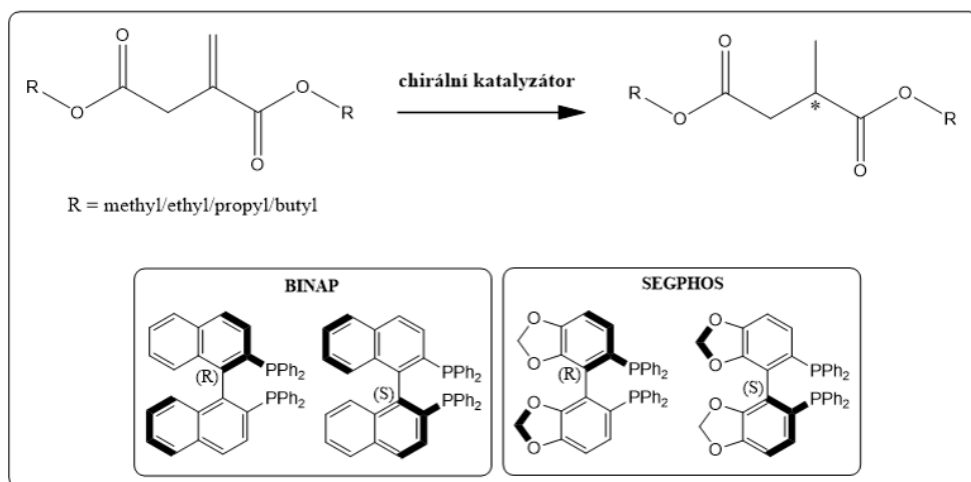
Mnoho léčivých látek (API) vykazuje špatnou rozpustnost ve vodném prostředí, což představuje problém při formulaci pevných lékových forem, které musí zaručit odpovídající biodostupnost. U API s nízkou permeabilitou ji lze zlepšit pomocí zvýšení rychlosti rozpouštění, protože právě ta je krokem určujícím absorpci. Cílem práce je popsat rozpouštěcí rychlost analgetika naproxenu (NPX) v pevných disperzích s 5 různými mezoporézními nosiči (Syloid®, Neusilin® UFL2, Neusilin® US2, FujiSil™ a FujiCalin®). Pevné disperze byly připraveny metodou společného mletí. Byl sledován vliv složení pevné disperze (1:1 a 1:5, hm. %), dále vliv doby mletí (1 h, 3 h) a vliv stárnutí během skladování při stresových podmínkách (40 °C, 75% RH) na amorficitu pevné disperze a na její rozpouštěcí rychlost. Jednotlivé pevné disperze byly charakterizovány pomocí XRPD a pomocí disoluce v průtokové cele (USP 4) v 0,1M HCl simulující prostředí žaludku. Z výsledků XRPD bylo zjištěno, že u disperzí s nižším obsahem NPX došlo k vymizení krystalické fáze. Doba mletí měla také příznivý účinek pro jeho amorfizaci. U pevných disperzí bylo pozorováno převážně zlepšení rozpouštěcí rychlosti oproti čistému NPX. Disperze stresově namáhané nevykazovaly rekrystalizaci API.

Hydrogenace esterů kyseliny itakonové

Bc. Jana Mušková (M2)

Školitel: Ing. Maria Kotova, Ph.D.

Estery kyseliny 2-methyljantarové (dimethyl, diethyl, dipropyl a dibutyl) se používají jako prekurzory pro syntézu léčiv, pesticidů a polymerních materiálů. Lze je použít v nátěrových hmotách, pojivech, změkčovadlech a tvarovacích plastech. Tyto estery lze získat hydrogenací odpovídajících esterů kyseliny itakonové (Obrázek 1). Cílem práce byla hydrogenace esterů kyseliny itakonové za použití homogenních a heterogenních katalyzátorů. Pro heterogenní katalýzu byl použit Pd/C. Při použití 1 hm. % Pd/C na navážku výchozí látky, tlaku 2 MPa, laboratorní teploty a v 50 ml methanolu bylo totální konverze výchozích látek dosaženo již po 30. minutě reakce. Hlavním produktem byla racemická směs odpovídajících esterů kyseliny 2-methyljantarové. Pro homogenní katalýzu byly použity chirální Ru komplexy, které ve své struktuře obsahovaly chirální difosfinové ligandy BINAP nebo SEGPHOS (Obrázek 1). Hydrogenace byla vedena za použití 1 mol. % katalyzátoru na navážku výchozí látky, laboratorní teploty, tlaku 1 MPa a ve 12 ml rozpouštědla. Hlavním produktem byl odpovídající 2R- nebo 2S- ester kyseliny 2-methyljantarové. Bylo zjištěno, že konverze a stereoselektivita hydrogenací byla značně závislá na struktuře použitého komplexu.



Obrázek 1: Enantioselectivní hydrogenace esterů kyseliny itakonové

Zkoumání vlivu bezlepkové diety na Parkinsonovu chorobu s využitím NMR metabolomiky

Bc. Martin Sap (M2)

Školitel: Ing. Kamila Syslová, Ph.D.

Parkinsonova choroba (PD) je druhé nejčastější neurodegenerativní onemocnění, které je spojeno s úbytkem dopaminergních neuronů v mozku a na něž v současnosti neexistuje vhodná léčba. Protože patogeneze neurodegenerativních onemocnění může být spojena s chronickým zánětem střeva, nedávňe studie ukázaly pozitivní vliv protizánětlivé diety na průběh a rozvoj PD. Jedním z nástrojů ke sledování a diagnostice onemocnění je metabolomika, která stav organismu charakterizuje na základě komplexní analýzy všech metabolitů ve studovaném vzorku. Cílem této výzkumné práce je zhodnotit efekt bezlepkové diety podávané pacientům s PD po dobu 12 měsíců. Pomocí NMR metabolomiky je průběžně monitorován metabolomický profil plasmy a moči u pacientů s bezlepkovou a normální dietou. Detekované změny jsou hodnoceny metodami statistické analýzy. Cílem této části studie je identifikovat změny metabolomu spojené s podáváním bezlepkové diety a korelovat je s dostupnými klinickými parametry pacientů s PD.

Vliv přidání rozvolňovadla na velikost částic během dezintegrace tablet

Bc. Tereza Staňková (M2)

Školitel: prof. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.

Rozvolňovadla se do tablet přidávají za účelem efektivnějšího rozpadu tablety na menší částice a rychlejšího uvolňování API ze struktury tablety. Množství a způsob přidání rozvolňovadla může mít značný vliv na výsledný proces dezintegrace tablet. Tato práce se zabývá studiem změny velikosti uvolněných částic při procesu dezintegrace tablet, v závislosti na fázi homogenizačního procesu, v níž bylo rozvolňovadlo přidáno, různých kombinací předmísení a hlavního mísení tabletoviny a množství rozvolňovadla ve směsi. Získané hodnoty ekvivalentních průměrů částic z laserové difrakce byly poté graficky znázorněny a porovnány. Výsledky ukázaly, že u tablet vylisovaných ze směsi, kde byl předmíchán ibuprofen s laktózou a následně přidáno rozvolňovadlo, se při procesu dezintegrace uvolňovaly mnohem menší částice, než u tablet vylisovaných z ostatních směsí. Na základě sledování vlivu rozdílné doby přidání rozvolňovadla do tabletové směsi bylo pozorováno, že v případě kdy je rozvolňovadlo přidáno až po 5 minutách mísení, dochází k uvolnění menších částic než v případě, kdy je přítomno od začátku míchání. Při sledování vlivu přidání rozdílného množství rozvolňovadla bylo zjištěno, že optimální proces dezintegrace tablet nastal u tabletoviny obsahující 3 hm. % rozvolňovadla.

Role kyseliny hyaluronové jako vehikula nanosystémů pro dermální podání

Bc. Kateřina Čermáková (M2)

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

Kyselina hyaluronová je biologicky aktivní polymer, který má významný potenciál v oblasti farmaceutického výzkumu, zejména pro svou schopnost udržovat vlhkost a interagovat s kůží. Hlavním cílem této práce je sledovat vliv molekulové hmotnosti kyseliny hyaluronové na záchyt léčivé látky imiquimod, který je využíván v léčbě (pre)karcerózních stavů kůže. Z důvodu jeho nízké biodostupnosti byl imiquimod nejdříve zformulován do nanosystémů (konkrétně nanokrystalů o velikosti 206 ± 13 nm a PLGA nanočástic o velikosti 164 ± 6 nm) a až poté kombinován s kyselinou hyaluronovou o různých molekulových hmotnostech. Byly testovány celkově tři molekulové hmotnosti kyseliny hyaluronové, a to 1-1,5 MDa, 90-130 kDa a 8-15 kDa. Celkově tedy bylo testováno 6 různých gelů – 3 obsahující PLGA nanočástice s celkovou koncentrací imiquimodu 0,1 hm. % a 3 nanokrystalické formulace s 2 hm. % imiquimodu. Vliv jak nanoformulace, tak kyseliny hyaluronové byl pozorován už na stabilitě a viskozitě vzniklých kombinovaných systémů. Účinek typu hyaluronové kyseliny na záchyt imiquimodu v kůži z nanočástic i nanokrystalů byl hodnocen v *ex vivo* permeační studii na prasečí kůži.

Organická a farmaceutická technologie IV

MÍSTO: A81A

KOMISE

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

Ing. Adam Karaba, Ph.D.

Ing. Maria Kotova, Ph.D.

Ing. Lada Dolejšová Sekerová, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

[Linda Chárová](#) (M2, Ing. Iva Paterová, Ph.D.)

Heterogenně katalyzovaná aldolová kondenzace kamfolenického aldehydu s butanalem

[Bc. Barbora Haláková](#) (M2, prof. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.)

Studium smáčivosti povrchu interaktivních směsí meloxikam-nosič

[Bc. Nikola Strnádková](#) (M2, doc. Mgr. Jarmila Zbytovská, Dr. rer. nat.)

Lipozomy jako prostředek možné terapeutické aplikace léčiv indometacinu a diklofenaku

[Bc. Jana Vostrá](#) (M2, Ing. Martin Zapletal, Ph.D.)

Vliv podmínek destilace kaprolaktamu na jeho čistotu

[Bc. František Vávra](#) (M2, Ing. Tomáš Sommer, Ph.D.)

Řešení problému průmyslové separace azeotropické směsi TMEDA-H₂O

[Bc. Šimon Zahradník](#) (M2, prof. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.)

Optimalizace procesu přípravy nosičových systémů meloxikamu metodou částečného zvlhčení

[Bc. Terézia Šlosárová](#) (M2, Ing. Lada Dolejšová Sekerová, Ph.D.)

Identifikácia biologicky aktívnych látok v extrakte z listov rakytníku

[Bc. Matúš Švichký](#) (M2, Ing. Jan Patera, Ph.D.)

Meranie závislosti degradácie na pH

Heterogenně katalyzovaná aldolová kondenzace kamfolenického aldehydu s butanalem

Linda Chárová (M2)

Školitel: Ing. Iva Paterová, Ph.D.

Práce se zabývá optimalizací podmínek aldolové kondenzace kamfolenického aldehydu s butanalem za využití heterogenních bazických katalyzátorů typu hydrotalcitů. Žádaným produktem této reakce je 2-ethyl-4-(2,2,3-trimethylcyklopent-3-en-1-yl)but-2-enal, který po následujícím zpracování lze použít pro výrobu vonných látek s oděrem santalového dřeva. Cílem práce byla příprava hydrotalcitů, jejich aktivace a optimalizace podmínek aldolové kondenzace. Byl sledován vliv rozpouštědla, teploty, množství katalyzátoru a poměru výchozích látek s cílem dosáhnout vysoké konverze kamfolenického aldehydu a selektivity k žádanému produktu. Dále byl sledován vliv poměru Mg:Al v připravených hydrotalcitech a způsob jejich aktivace a schopnost regenerace. Jako nejvhodnější byla vybrána teplota reakce 75 °C, poměr výchozích látek 1:1, dávkování butanalu a ethanol jako rozpouštědlo. Pro reakci byly využity aktivované hydrotalcity s poměrem Mg:Al iontů 3,4:1 a hmotnostním poměrem katalyzátoru vůči kamfolenickému aldehydu 0,4:1. Za těchto podmínek po 3. hodině reakce bylo dosaženo konverze kamfolenického aldehydu 68 % a selektivity k žádanému produktu 84 %.

Studium smáčivosti povrchu interaktivních směsí meloxikam-nosič

Bc. Barbora Haláková (M2)

Školitel: prof. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.

Mnoho účinných látek dnešní doby se vyznačuje nevyhovující rozpustností a ve svém důsledku tak představuje problém pro jednoduché uplatnění v praxi. Zájem o využití interaktivních směsí proto každým rokem roste zejména díky možnosti optimalizace rozpouštěcí rychlosti. Použitím interaktivních směsí zahrnujících léčivo nanesené na povrchu pevného nosiče vzniká strukturovaný povrch tvořený doménami hydrofilnějšího nosiče a hydrofobního léčiva, který je klíčový pro smáčivost systému, jeho povrchovou energii a v konečném důsledku i kinetiku uvolňování léčiva a jeho biologickou dostupnost. Cílem této práce je studium interakce kapaliny s povrchem kompozitních materiálů určením povrchové energie za pomoci měření kontaktního úhlu a následné porovnání s výsledky z disolučních testů. Modelovou interaktivní směsí zde byla směs Neusilin-meloxikam. Porovnáním výsledků pro různě strukturované směsi bylo možno získat korelaci mezi množstvím obsaženého meloxikamu na povrchu a smáčivostí povrchu a následně uvést vše do souvislosti s výsledky disolučních zkoušek. V širším kontextu je možné na základě získaných dat dospět ke zobecnění vlivu struktury povrchu na smáčivost systémů hydrofobního léčiva naneseného na hydrofilnější nosič.

Lipozomy jako prostředek možné terapeutické aplikace léčiv indometacinu a diklofenaku

Bc. Nikola Strnádková (M2)

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

Ochranná funkce kůže představuje hlavní limitaci pro vstup vnějších látek do organismu. To, v jakém rozsahu může být kůže efektivně využita k podání léčiv, určuje *stratum corneum*, nejsvrchnější vrstva kůže, která svými vlastnostmi a složením představuje největší překážku pro prostup léčiv kůží. Snaha o překonání této bariéry vedla k vývoji systémů, které by umožnily dopravu léčiv lokálně, do jednotlivých vrstev kůže, či do systémové cirkulace. Takovými systémy mohou být různé nanočásticové nosiče, vektory nebo systémy s využitím urychlovačů transdermální absorpce. Projekt byl zaměřen na vývoj lipozomů v kombinaci s urychlovačem transdermální absorpce Azone® s následným hodnocením fyzikálně–chemických vlastností vzniklých formulací, optimalizací složení, snížením velikosti částic pomocí vysokotlaké homogenizace a sledováním jejich stability. Dále byl zkoumán vliv přídatku cholesterolu, množství a druhu léčiva či urychlovače. V rámci práce byly provedeny permeační experimenty *in vitro* pro stanovení efektivity formulací. V neposlední řadě byl sledován vliv kombinovaných nanočástic na integritu kůže. Bylo prokázáno, že kombinace lipozomů s urychlovačem je efektivní pro transdermální cílení léčiva.

Vliv podmínek destilace kaprolaktamu na jeho čistotu

Bc Jana Vostrá (M2)

Školitel: Ing. Martin Zapletal, Ph.D.

Kaprolaktam je organická látka se sumárním vzorcem $(CH_2)_5C(O)NH$. Je to cyklický amid primárně využívaný při výrobě nylonu 6, který je široce používán v textiliích, a průmyslových vláknech. Kaprolaktam je jeho významným meziproduktem, protože nylon 6 se vyrábí přímo polymerací molekuly kaprolaktamu. Aby měl polymer požadované vlastnosti, je při jeho výrobě vyžadována vysoká čistota kaprolaktamu. Proto je tato práce věnována právě problematice čištění surového kaprolaktamu. V České republice se výrobou kaprolaktamu zabývá Spolana s.r.o. v Neratovicích. Pro finální čištění surového kaprolaktamu se používá extrakce do trichlorethylenu následovaná destilací. To vede k uvolňování trichlorethylenu do okolí a společnost se díky tomu dlouhodobě potýká s neschopností plnit ekologické cíle EU. Existuje však snaha o zavedení nového postupu čištění kaprolaktamu tak, aby se omezilo vypouštění chlorovaných odpadních látek. V této práci navazuji na dlouhodobý projekt laboratoře výzkumu a vývoje chemických technologií a diplomové práce Judity Fojtákové (2019) a Valentiny Shcherbii (2019) a zabývám se vlivem teploty a tlaku při destilačním čištění na obsah síry a kvalitu přečištěného produktu.

Řešení problému průmyslové separace azeotropické směsi TMEDA-H₂O

Bc. František Vávra (M2)

Školitel: Ing. Tomáš Sommer, Ph.D.

Tetramethylethyldiamin (TMEDA) se uplatňuje jako katalyzátor polymeračních reakcí nebo jako ligand v homogenní katalýze. Průmyslový partner zkoumal pro účely výroby TMEDA možnosti separace azeotropické směsi TMEDA-H₂O pomocí azeotropické rektifikace. Cílem práce bylo nalézt vhodnou pomocnou látku, která by tuto separaci umožnila, a popsat příslušné fázové rovnováhy. Azeotropická rektifikace byla provedena v přítomnosti isobutylalkoholu (IBOL) a diisopropylaminu (DIPA). DIPA se ukázal jako vhodnější z důvodu účinnější separace a vyšší čistoty produktu, a proto s ním byly proměřeny fázové rovnováhy kapalina-pára a kapalina-kapalina příslušných binárních systémů. Na základě získaných dat byly pro rovnováhy kapalina-pára vytvořeny modely NRTL a pro rovnováhu kapalina-kapalina model UNIQUAC. Tyto modely lze ve vhodném simulačním programu použít k návrhu azeotropické rektifikace směsi TMEDA-H₂O.

Optimalizace procesu přípravy nosičových systémů meloxikamu metodou částečného zvlhčení

Bc. Šimon Zahradník (M2)

Školitel: prof. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.

V oblasti moderní farmakologie a lékařství hraje výroba léčiv a jejich efektivní formulace zásadní roli při zajištění terapeutické účinnosti a bezpečnosti pacientů. Jedním z klíčových aspektů této problematiky je vývoj nosičových systémů, které umožňují cílené a kontrolované uvolňování léčivých látek, zvyšují jejich stabilitu a zlepšují jejich biologickou dostupnost. V rámci tohoto výzkumu se zaměřujeme na přípravu nosičových systémů, ve kterých je jako modelová léčivá látka využit meloxikam. Ten patří do skupiny nesteroidních protizánětlivých léčiv (NSAID) a je využíván k úlevě od bolesti a zánětu. Tato studie se zaměřila na vývoj nosičového systému s cílem zvýšit biologickou dostupnost a kontrolu uvolňování. Byl studován proces postupného nanášení léčiva na porézní nosič a následné vysoušení. Rostoucí počet nanášecích cyklů snižuje počáteční uvolňovací rychlost, ale zvyšuje množství uvolněného meloxikamu na jednotku hmotnosti nosiče. Prostudování těchto parametrů a stanovení jejich vlivu na celkovou biologickou dostupnost účinné látky, umožní přípravu formulací se specifickými profily uvolňování.

Identifikácia biologicky aktívnych látok v extrakte z listov rakytníku

Bc. Terézia Šlosárová (M2)

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

Rakytník, latinsky *Hippophae rhamnoides L.*, je trnitý opadavý ker pôvodom z Ázie a Európy. Všetky časti rastliny sú považované za vysoký zdroj biologicky aktívnych látok. Rakytník bol využívaný už v tradičnej medicíne na liečbu rôznych druhov ochorení ako napríklad na liečbu kašľa, kožných problémov, žalúdočných ťažkostí, astmy a pľúcnych porúch. Jednou z možností stanovenia biologicky aktívnych látok je HPLC-MS analýza. V rámci tejto práce bola optimalizovaná HPLC-MS metóda pre stanovenie bioaktívnych látok v superkritickom extrakte z listov rakytníku. Pre získanie vhodnej metódy je nutné vziať do úvahy viacero faktorov ako napríklad výber kolóny, zloženie mobilných fázy, priebeh gradientu metódy a radu ďalších. Získané chromatogramy boli následne vyhodnocované v programe Compound Discoverer, ktorý využíva chemické knižnice k identifikácii jednotlivých separovaných látok a umožňuje zároveň i štatistické spracovanie získaných dát. Takto bola identifikovaná celá rada zlúčenín ako napríklad kyselina medronová, kyselina myristová, lauryldimethylamín oxid, myristamín oxid a ďalšie, vďaka ktorým sa rakytníku pripisujú pozitívne účinky na ľudské zdravie.

Meranie závislosti degradácie na pH

Bc. Matúš Švichký (M2)

Školiteľ: Ing. Jan Patera, Ph.D.

Stabilita liečivých látok (LL) je jedna z najdôležitejších vlastností liečivých prípravkov (LP) či už ide o stabilitu chemickú alebo fyzikálnu. Počas formulácie či skladovania liečivého prípravku môže dochádzať k degradácii liečivej látky, čo vedie k vzniku degradantov a úbytku účinnej látky. To má vplyv na zhoršenie čistoty LP, jeho bezpečnosti a môže mať vplyv aj na jeho účinnosť. Degradanty vznikajúce v LP musia byť jasne definované a ich množstvo prísne kontrolované. Liečivá látka môže byť chemicky degradovaná rôznymi degradačnými mechanizmami. Ide najmä o hydrolytickú degradáciu, termické štiepenie, oxidačnú degradáciu a degradáciu svetlom. Identifikácia degradačných mechanizmov uplatňujúcich sa pri degradácii LL je preto dôležitým vodítkom pri vývoji chemicky stabilného liečivého prípravku. Cieľom tejto práce bola charakterizácia závislosti degradácie liečivej látky na pH a stanovenie hydrolytickej degradácie. Závislosť bola stanovená experimentálne na modelovej látke za využitia ôsmich rôznych stresových podmienok pH pri teplote 60°C a 75% RH. Na stanovenie prítomnosti degradantov bola použitá metóda UPLC s vlastnou vyvinutou metódou. Ukázalo sa, že zmena pH má vplyv na degradáciu LL, kde bolo možné sledovať niekoľko rôznych degradantov líšiacich sa retenčnými časmi.

Organická a farmaceutická technologie V

MÍSTO: AS31A

KOMISE

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

Ing. Martina Pitínová, Ph.D.

Ing. Eva Zapletalová, Ph.D.

Ing. Jan Patera, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

[Bc. Ondřej Holoubek](#) (M2, Ing. Jiří Trejbal, Ph.D.)

Použití zeolitových katalyzátorů při přípravě methylaminů reakcí methanolu s amoniakem

[Bc. Markéta Hudcová](#) (M2, doc. Ing. Eliška Vyskočilová, Ph.D.)

Katalyzátory na bázi solí N-heterocyklů pro přípravu styrenkarbonátů

[Bc. Zuzana Kubešová](#) (M2, doc. Mgr. Jarmila Zbytovská, Dr. rer. nat.)

Kombinované formulace lipidových nanočástic s urychlovači permeace aneb ve dvou se to lépe táhne

[Bc. Martin Mařa](#) (M2, Ing. Jan Patera, Ph.D.)

Zlepšování rozpouštění ezetimibu impregnací SiO_2 jako nosiče

[Bc. Marcel Mimra](#) (M2, prof. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.)

Vliv mikrostruktury tablet na jejich deintegraci

[Bc. Huyen Thao Nguyen](#) (M2, Ing. Tereza Školáková, Ph.D.)

Využití bifázické disoluční metody pro studium rozpouštění ternárních pevných disperzí

[Anna Šmídová](#) (M2, Ing. Lada Dolejšová Sekerová, Ph.D.)

Profilování plazmatických metabolitů u psů s rakovinnými onemocněními a gastrointestinálními potížemi

Použití zeolitových katalyzátorů při přípravě methylaminů reakcí methanolu s amoniakem

Bc. Ondřej Holoubek (M2)

Školitel: Ing. Jiří Trejbal, Ph.D.

Syntéza methylaminů je technologicky důležitý proces vzhledem k jejich hlavnímu využití jako meziproduktů pro výrobu rozpouštědel, pesticidů a chemikálií pro úpravu vody. Methylamin se vyskytuje ve třech substituovaných formách: monomethylamin (MMA), dimethylamin (DMA) a trimethylamin (TMA). Průmyslová výroba methylaminů je založena na reakci methanolu s amoniakem na pevném kyselém katalyzátoru, kdy dochází ke společnému vzniku všech forem. Největší poptávka na trhu je po DMA, ale při vysokých konverzích je termodynamicky preferovaným produktem TMA. Použití zeolitů jako katalyzátorů pro tuto reakci se zakládá na odlišných velikostech molekul jednotlivých methylaminů. Jednou z vlastností zeolitů je totiž schopnost tvarové (velikostní) selektivity. To znamená, že je možné potlačit vznik TMA, jehož molekula je největší, pokud máme zeolit s vhodnou strukturou a dostatečně malými póry. Cílem této práce bylo otestovat několik různých zeolitových katalyzátorů a následně výsledky porovnat s katalyzátorem, který se při výrobě běžně používá. Konkrétně se jednalo o zeolity Mordenit, MFI-240, Beta, Ferrierit, Y ($\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3 = 5,2$) a Y ($\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3 = 80$). Porovnání bylo zaměřeno na selektivitu a aktivitu katalyzátorů.

Katalyzátory na bázi solí N-heterocyklů pro přípravu styrenkarbonátů

Bc. Markéta Hudcová (M2)

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

Cyklické karbonáty nacházejí uplatnění jako aprotická rozpouštědla, elektrolyty v lithiových článcích, prekurzory pro výrobu polymerů, či jako intermediáty při přípravě biologicky aktivních látek. Možným způsobem přípravy cyklických karbonátů je cykloadice oxidu uhličitého na epoxidy. Cílem práce byla příprava materiálů na bázi pyridiniových a imidazoliniových solí katalyzujících reakci styrenoxidu s CO_2 a následné studium reakce za různých podmínek (Schéma 1). S výzkumem chirálních materiálů výrazně vzrostla i poptávka po opticky čistých sloučeninách. Proto byla rovněž studována asymetrická cykloadice CO_2 na styrenoxid v přítomnosti chirálních katalyzátorů za vzniku preferenčního enantiomeru žádaného styrenkarbonátu. Reakce byly vedeny při mírných podmínkách. Katalyzátory byly úspěšně připraveny a charakterizovány. Katalytická aktivita byla ověřena při cykloadici CO_2 na styrenoxid. Pozorována byla konverze výchozí látky, která rostla s rostoucí teplotou a s klesajícím tlakem. Při studiu asymetrické cykloadiční reakce nedocházelo k preferenčnímu vzniku jednoho enantiomeru. Ve všech případech však vznikl styrenkarbonát se 100% selektivitou. Tyto nově připravené katalyzátory tak představují jednoduché a perspektivní materiály pro reakci epoxidů s oxidem uhličitým.

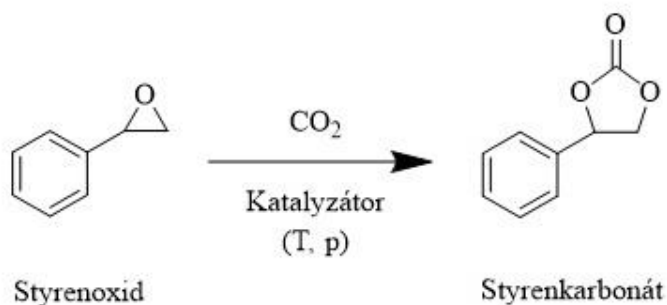


Schéma 1: Cykloadice CO_2 na styrenoxid za vzniku styrenkarbonátu

Kombinované formulace lipidových nanočástic s urychlovači permeace aneb ve dvou se to lépe táhne

Bc. Zuzana Kubešová (M2)

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

Topické podání léčiv má řadu výhod – je neinvazivní, nedochází při něm k first-pass efektu ani dráždění trávicího traktu a obecně má méně vedlejších účinků než jiné způsoby podání. Nevýhodou je však nutnost překonání kůže, hlavní ochranné bariéry před vnikem cizorodých látek (tedy i léčiv) do organismu. Cílem práce bylo zvýšení efektivity absorpce léčiv kůží za pomoci lipidových nanotobolek (LNC) v kombinaci s urychlovači permeace. LNC enkapsulují léčivou látku v lipidovém jádře, čímž zvyšují její rozpustnost a chrání ji před degradací. Po aplikaci na kůži se rozkládají a léčivo je z nich uvolněno. Difuze léčiva kůží je usnadněna urychlovači permeace, které dočasně rozruší její uspořádanou strukturu. Byly připraveny LNC s obsahem dvou léčiv – diklofenaku sodného (DF) a indomethacinu (IND). Součástí formulací byly také urychlovače kožní absorpce – isopropylmyristát, Azone® a N-alkylmorfoly Mo12 a Mo14. Byl sledován vliv urychlovačů na základní charakteristiky částic (velikost, polydisperzitu a stabilitu) a efektivitu transdermální absorpce *in vitro* permeačními experimenty. Všechny připravené formulace byly stabilní, ale vliv urychlovačů na kožní absorpci léčiv se lišil. U DF se projevil pouze urychlovací efekt isopropylmyristátu, kdežto u IND se projevil efekt všech urychlovačů.

Zlepšování rozpouštění ezetimibu impregnací SiO₂ jako nosiče

Bc. Martin Mařa (M2)

Školitel: Ing. Jan Patera, Ph.D.

V současnosti je největším problémem při vývoji nových léčiv špatná rozpustnost ve vodném prostředí, což významně komplikuje formulaci lékové formy. Je proto důležitým cílem výroby zvýšení rozpustnosti a rychlosti rozpouštění léčivých látek a tím i zvýšení biodostupnosti. Používají se různé metody modifikace účinné látky. Jednou z nich je použití nosičů pro účinné látky, které by umožnily optimální a kontrolované uvolňování léčivých či jiných aktivních složek. Stále větší pozornost v této oblasti získává silikagel, který se vyznačuje výjimečnými povrchovými vlastnostmi a chemickou stabilitou, což ho činí atraktivním kandidátem. Cílem této práce je podrobněji zkoumat povrchové vlastnosti SiO₂ v závislosti na relativní vlhkosti vzduchu při přípravě nosiče. Ta může mít za následek změnu chemické struktury povrchu. Právě tato změna povrchových vlastností by mohla mít vliv na uchycení a/nebo uvolnění API z/na povrchu nosiče. Jako účinná látka byl použit ezetimib, kterým byl silikagel impregnován. Takto se připravili vzorky za použití SiO₂ uchovávaného při různé vzdušné vlhkosti. Byla zkoumána míra tvorby skelné fáze pomocí XRD, disoluční chování bylo sledováno pomocí disoluce v průtokové cele a povrchové vlastnosti byly měřeny pomocí IGC a BET metody.

Vliv mikrostruktury tablet na jejich deintegraci

Bc. Marcel Mimra (M2)

Školitel: prof. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.

Dezintegrace tablet je jedním ze základních faktorů ovlivňujících biologickou dostupnost, a proto se používá jako důležitý kvalitativní atribut tablet s okamžitým uvolňováním. Cílem výzkumu bylo zjistit závislost mezi složením formulace, její mikrostrukturou a dezintegrací tablet. Modelové ternární tablety obsahující účinnou látku amlodipin a excipienty $\text{CaHPO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ a mikrokrystallickou celulózu byly připraveny ve 4 variantách složení a za použití tří lisovacích tlaků. Dezintegrace jednotlivých tablet byla sledována v disolučním médiu pomocí optického mikroskopu na začátku experimentu a posléze ve stanovených časových intervalech. Mezi jednotlivými časovými úseky bylo disoluční médium s tabletou promícháváno tak, aby se zamezilo sedimentaci tablety/dezintegrovaných částic a agregátů. Snímky pořízené v průběhu experimentu byly podrobeny obrazové analýze. Ze získaných výsledků bylo zjištěno, že se zvyšujícím se lisovacím tlakem dochází k pomalejšímu rozpadu fragmentů na menší částice. Data budou dále využita k propojení známých disolučních profilů modelových tablet s jejich dezintegračním chováním a nalezení souvislostí mezi těmito faktory. To by umožnilo připravovat tablety s určitou distribucí velikosti částic v průběhu rozpadu a dosáhnout tak řízení disolučního profilu.

Využití bifázické disoluční metody pro studium rozpouštění ternárních pevných disperzí

Bc. Huyen Thao Nguyen (M2)

Školitel: Ing. Tereza Školáková, Ph.D.

V současnosti je přibližně 40 % na trhu dostupných léčivých látek (API) prakticky nerozpustných ve vodě. Špatná rozpustnost tedy představuje jeden z největších problémů během vývoje nových léčiv, protože s klesající rozpustností rovněž klesá i biodostupnost dané API v těle. Zlepšení rozpustnosti lze docílit např. přípravou ternárních pevných disperzí (TSD), které vykazují lepší rychlost rozpouštění a fyzikální stabilitu. Tato práce je zaměřena na studium uvolňování špatně rozpustného indomethacinu z TSD, které byly připraveny metodou volného odpařování rozpouštědla. V rámci práce byly připraveny TSD se třemi různými polymerními nosiči (Benecel™ K250 PH PRM, Natrosol™ 250L PHARM a Plasdon S- 630) a laurylsulfátem sodným. Cílem práce je poté prozkoumat vliv použitých nosičů na uvolňování léčivé látky pomocí pádlové metody (USP2) a dále pomocí bifázické disoluce, jež umožňuje odhadnout i absorpci. Získané profily tak rámcově odpovídají průběhu plazmatické koncentrace v čase po perorálním podání.

Profilování plazmatických metabolitů u psů s rakovinnými onemocněními a gastrointestinálními potížemi

Anna Šmídová (M2)

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

V dnešní době jsou psi pro mnoho lidí nedílnou součástí rodiny a péče o jejich zdraví a kvalitu jejich života je stále důležitější. Jedním z významných zdravotních problémů, který může psy postihnout, jsou různé formy rakoviny. Diagnostika těchto onemocnění je obtížná a nádory jsou tak často odhaleny až v pokročilých stádiích, což může mít vliv na úspěšnost léčby. Výsledky metabolomických studií ukazují, že tento přístup má slibný potenciál pro brzkou diagnostiku rakoviny u psů a může nabídnout jednoduchý a rychlý způsob vyšetření, což může znamenat zlepšení prognózy a úspěšnosti léčby. Tento projekt byl zaměřen na využití metabolomiky k identifikaci biomarkerů pro diagnostiku rakoviny u psů. Předmětem práce bylo provedení analýzy vzorků krevní plazmy s využitím LC-ESI-MS s následným zpracováním výsledků v programu Compound Discoverer, kde byla provedena identifikace metabolitů a následné statistické vyhodnocení. Výstupem bylo porovnání plazmatických koncentrací vybraných metabolitů psů s rakovinným onemocněním s kontrolní skupinou klinicky zdravých psů a psů s gastrointestinálními potížemi. Mezi sledované metabolity patřily plazmatické aminokyseliny (prolin, tryptofan, tyrosin) a některé karboxylové kyseliny (stearová, eikosapentaenová, linolová, jalovcová).

Ústav polymerů

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Drahomír Čadek, Ph.D.

SEZNAM SEKČÍ

1. [Ústav polymerů](#)

Ústav polymerů

MÍSTO: BUDOVA B, B11

KOMISE

Doc. Ing. Antonín Kuta, CSc. (předseda)

Prof. Ing. Jiří Brožek, CSc.

Prof. Ing. Petr Sysel, CSc.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

[Bc. Tomáš Beinhauer](#) (M2, Ing. Radka Kalousková, CSc.)

Modifikace PVC přidavkem recyklátu vulkanizovaného NBR

[Bc. Anežka Chodounská](#) (M1, Ing. Radka Kalousková, CSc.)

Příprava a charakterizace hydrofilní epoxidové pryskyřice

[Bc. Tomáš Doubek](#) (M1, prof. Ing. Jan Merna, Ph.D.)

Koncově funkcionalizované polyolefiny připravené chain-walking katalyzátory

[Marika Julie Gregorová](#) (B3, Ing. Drahomír Čadek, Ph.D.)

Porovnání metod hodnocení hustoty taveniny přírodního kaučuku při 105 °C

[Bc. Michal Handt](#) (M1, prof. Ing. Jan Merna, Ph.D.)

Příprava blokových kopolymerů přepínáním koordinačního a radikálového mechanismu

[Bc. Michaela Jindrová](#) (M1, Ing. Drahomír Čadek, Ph.D.)

Příprava a vlastnosti esterifikovaného termoplastického škrobu

[Marie Kolářová](#) (B3, Ing. Václava Benešová)

Polyesteramidové membrány pro pervaporaci

[Bc. Lucie Reinšteinová](#) (M1, prof. Ing. Jiří Brožek, CSc.)

Polyamid 4 — nanovláknenné vrstvy a jejich degradace

[Sára Trnková](#) (B3, Ing. Drahomír Čadek, Ph.D.)

Vliv různých parametrů na tahové zkoušky pryží přírodního kaučuku

[Adriana Šmejkalová](#) (M2, Ing. Radka Kalousková, CSc.)

Polymerace ϵ -kaprolaktonu iniciovaná laktamátem vápenatým a hořečnatým a jeho využití při měkčení PVC.

Modifikace PVC přidavkem recyklátu vulkanizovaného NBR

Bc. Tomáš Beinhauer (M2)

Školitel: Ing. Radka Kalousková, CSc.

Práce ověřuje možnost využití prášku sesíťovaného butadienakrylonitrilového kaučuku (NBR) jako aditiva proměkčené i neměkčené PVC. NBR inkorporovaný v PVC zvyšuje odolnost blendy povětrnosti a působení ozónu a může působit, s ohledem na podíl nitrilových skupin v kaučuku, i jako změkčovaadlo, plnivo či modifikátor houževnatosti. NBR s dostatečným množstvím nitrilových skupin je snášenlivý s polárním PVC, působí jako permanentní změkčovaadlo atakové blendy PVC/NBR jsou v praxi běžně užívány. Co se týče modifikace houževnatosti PVC jsou v současné době preferovány spíše chlorovaný PE, EPM kaučuk, kopolymer PE-PVAc a Core-Shell kopolymery. Tato práce zkoumá využitelnost zcela konkrétního NBR recyklátu získaného drcením použitých jednorázových rukavic.

Příprava a charakterizace hydrofilní epoxidové pryskyřice

Bc. Anežka Chodounská (M1)

Školitel: Ing. Radka Kalousková, CSc.

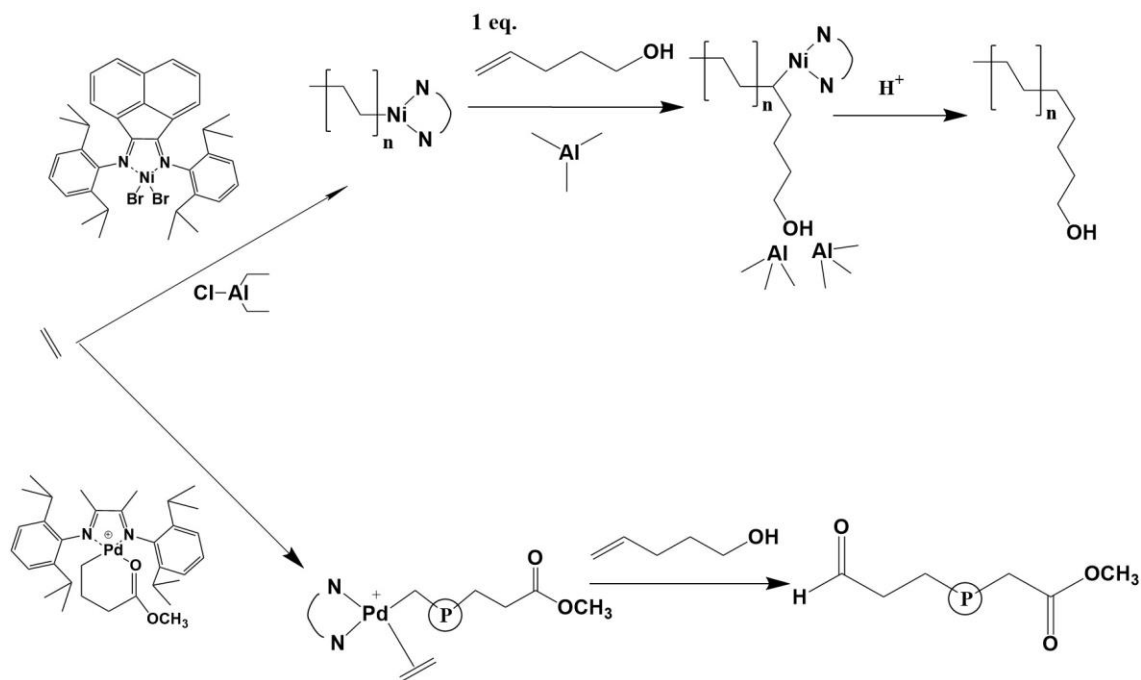
Epoxidové pryskyřice jsou díky malému smrštění při vytvrzování, vysoké chemické a teplotní odolnosti a díky vysoké korozní odolnosti hojně využívány. Většina používaných epoxidů jsou hydrofobní materiály, pro některé aplikace je ovšem zapotřebí materiálů hydrofilních. V rámci mé práce byly zkoumány epoxidové pryskyřice na bázi bisfenol A propoxylát diglycidyl etheru (PDGEBA) vytvrzovaného vodorozpustným polyetherdiaminem (Jeffamin® ED-900), které vykazují díky polyethylen glykolovému bloku hydrofilní chování. Byly zkoumány některé materiálové vlastnosti jako obsah gelu, sorpce vody, teplota skelného přechodu, mechanické vlastnosti a vliv UV záření na tyto pryskyřice. Jako testovací vzorky byly použity destičky epoxidové pryskyřice z ekvimolární směsi s různými vytvrzovacími časy a destičky plněné různým množstvím suspenze grafen oxidu.

Koncově funkcionalizované polyolefiny připravené chain-walking katalyzátory

Bc. Tomáš Doubek (M1)

Školitel: prof. Ing. Jan Merna, Ph.D.

Tato práce se zabývá možnostmi zavedení koncových funkčních skupin do struktury polyolefinů připravených živou CW polymerací olefinů katalyzovanou diiminovými komplexy niklu a palladia (viz schéma). Strategie funkcionalizace spočívá na přidání pent-4-en-1-olu k živým polymerním řetězcům. Hodnotí se způsob a účinnost zapojení funkční skupiny na konec řetězce. Cílem práce je získání makroiniciátorů pro následné kopolymerace. Polymery vzniklé za katalýzy komplexu niklu s koncovou hydroxy skupinou byly podrobeny reakci ϵ -kaprolaktonem s cílem získání blokového kopolymeru. Polymery připravené pomocí komplexu palladia mají zabudovanou na konci aldehydovou skupinu. Reakcí této skupiny s diaminem jsme se pokusili o přípravu polyethylenu s koncovou amino skupinou. Molární hmotnost získaných polymerů byla analyzována pomocí vysokoteplotní rozměrově-vylučovací chromatografie (SEC/GPC) a účinnost funkcionalizace a určení koncových skupin pomocí ^1H -NMR spektroskopie.

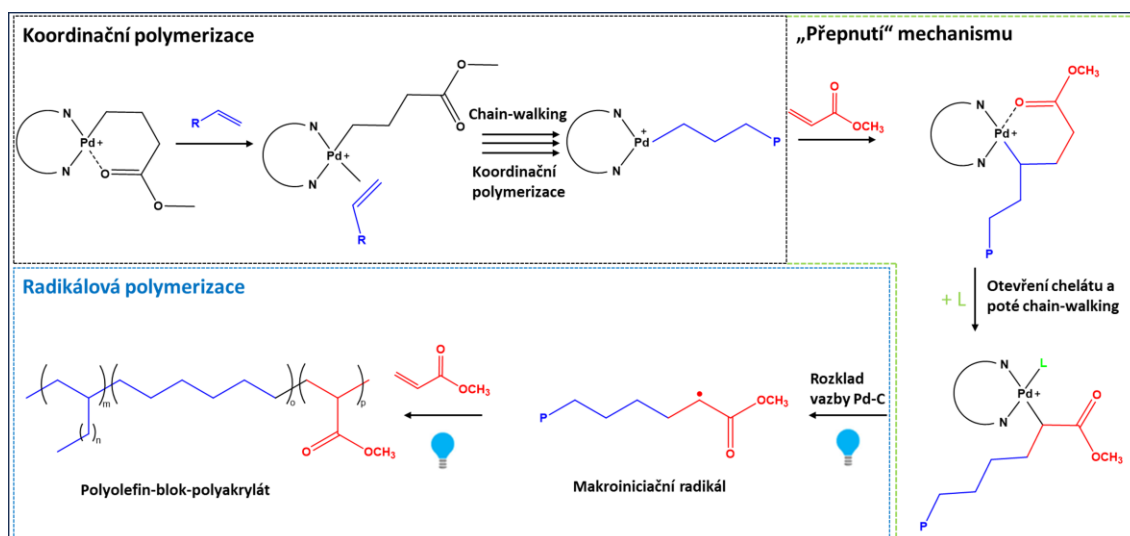


Porovnání metod hodnocení hustoty taveniny přírodního kaučuku při 105 °C

Marika Julie Gregorová (B3)

Školitel: Ing. Drahomír Čadek, Ph.D.

Pro zpracování přírodního kaučuku řadou technik (lisování, kalandrování, vytlačování) jsou nesmírně důležité jeho tokové vlastnosti. Pro stanovení viskozity kaučuku nebo kaučukové směsi při dané teplotě je potřebná i hustota taveniny, jež se pro nekompaktní materiály nesnadno měří. Stanovit hustotu taveniny lze více způsoby, a to přímo a nepřímo. Tato práce je zaměřena na tři metody stanovení hustoty taveniny přírodního kaučuku a jeho směsi. Použitými metodami byly pyknometrická metoda (nepřímé stanovení), měření elektronickým densimetrem (nepřímé stanovení) a stanovení pomocí přístroje pro měření tavného indexu (přímé stanovení). Každá metoda je jinak přesná a časově náročná. Cílem bylo vybrat neoptimálnější metodu pro použití v praxi.



Příprava a vlastnosti esterifikovaného termoplastického škrobu

Bc. Michaela Jindrová (M1)

Školitel: Ing. Drahomír Čadek, Ph.D.

Termoplastický bramborový škrob (TPS), materiál na bázi přírodního polysacharidu a glycerolu, je levný, obnovitelný a kompletně rozložitelný. K jeho dalším výhodám se řadí možnost zpracování běžnými plastikářskými technikami, čímž se nabízí jako ekologická náhrada nerozložitelných plastů, zvláště těch na jednorázové použití. TPS je ovšem citlivý na vlhkost, která zhoršuje jeho vlastnosti. Proto bylo cílem této práce bramborový škrob nejdříve esterifikovat a poté z něj připravit takzvaný esterifikovaný termoplastický škrob (TPES), jež by byl více odolný vůči vlhkosti než klasický TPS. Před samotnou plastifikací byly provedeny analýzy ke zjištění rozsahu esterifikace, po plastifikaci byla zjišťována nasákavost a také mechanické vlastnosti.

Polyesteramidové membrány pro pervaporaci

Marie Kolářová (B3)

Školitel: Ing. Václava Benešová

Kopolymery obsahující strukturní jednotky ϵ -kaprolaktonu a ϵ -kaprolaktamu – polyesteramidy - vykazují zajímavé vlastnosti. Jejich mechanické vlastnosti a citlivost k biologické rozložitelnosti jsou určovány poměrem strukturních jednotek. Při určitých poměrech těchto jednotek má polymer amorfni charakter. Této vlastnosti se může využít například v membránových procesech, například pervaporativního dělení kapalných roztoků. Tato práce se zabývá přípravou polyesteramidů aniontovou polymerizací ϵ -kaprolaktonu a ϵ -kaprolaktamu v různých poměrech tak, aby výsledný materiál obsahoval co nejvyšší podíl amorfni struktury a zároveň vykazoval potřebnou mechanickou odolnost. Z těchto kopolymerů byly připraveny folie lisováním a odpařením rozpouštědla z polymerních roztoků, a byly studovány jejich pervaporační charakteristiky pro směsi isopropylalkoholu a vody. Cílem práce je optimalizace složení folií pro dělení azeotropů pervaporativní dehydratací.

Polyamid 4 — nanovláknenné vrstvy a jejich degradace

Bc. Lucie Reinšteinová (M1)

Školitel: prof. Ing. Jiří Brožek, CSc.

Polyamid 4 byl v 70. letech minulého století považován za perspektivní vláknařský materiál vykazující dobré mechanické vlastnosti, vysokou hydrofilitu a sorpci vody podobnou bavlně. Problémem byla jeho nízká tepelná stabilita v blízkosti jeho teploty tání, a tak nebylo možné ho zvláknovat z taveniny. S rozvojem technologie elektrostatického zvláknování polymerů z roztoků a vytváření nanovláknenných vrstev se pozornost vrátila k polyamidu 4. V rámci této práce byly elektrostatickým zvláknováním z roztoku kyseliny mravenčí a dichlormethanu připraveny nanovláknenné vrstvy z polyamidu 4. Následně byly vrstvy podrobeny degradaci ve fosfátovém pufru. Míra degradace v průběhu pokusu byla posuzována na základě změn hmotnostních úbytků vzorků a změn molární hmotnosti stanovené viskozimetrickou metodou. Morfologie vrstev byla zkoumána pomocí skenovací elektronové mikroskopie. Informace o teplotách tání byly získány z diferenciální snímací kalorimetrie.

Vliv různých parametrů na tahové zkoušky pryží přírodního kaučuku

Sára Trnková (B3)

Školitel: Ing. Drahomír Čadek, Ph.D.

Tahové zkoušky pryží patří mezi základní metody charakterizace v gumárenském průmyslu, díky kterým lze stanovit např. pevnost, tažnost či gumárenský modul. Na základě tahových zkoušek lze stanovovat výsledné vlastnosti výrobků a předvídat jejich chování. Mezinárodní norma ČSN EN ISO 37 jasně popisuje stanovování tahových zkoušek – tloušťka a typ vzorků, rychlost trhání, teplota při zkoušce, ... V rámci této práce byly prováděny experimenty na vulkanizátech neplněné a plněné směsi přírodního kaučuku, z nichž byly připraveny tělesa (oboustranné lopatky) pro měření tahových vlastností. Parametry, jež byly při tahových zkouškách hodnoceny, byly rozdílná rychlost posuvu příčnicku trhačím stroje (100, 500 a 1000 mm/min), různá tloušťka (1 a 2 mm) a typ zkušebních těles (typ těles 1 a 2). I když se řada těchto parametrů považuje za zanedbatelné z pohledu provádění zkoušky (kromě rychlosti posuvu, kde teorie říká, že s rostoucí rychlostí posuvu roste pevnost v tahu), ukazuje se, že situace nebude úplně jednoznačná. Cílem realizovaných experimentů bylo zjistit vlivy výše zmíněných parametrů na výsledné tahové vlastnosti použitých pryží.

Polymerace ϵ -kaprolaktonu iniciovaná laktamátem vápenatým a hořečnatým a jeho využití při měkčení PVC.

Adriana Šmejkalová (M2)

Školitel: Ing. Radka Kalousková, CSc.

Poly(ϵ -kaprolakton) je považován, díky nízké teplotě skelného přechodu, zdravotní přijatelnosti a dobré mísitelnosti s PVC za nejslibnější náhradu potenciálně toxických ftalátových změkčovadel. K iniciaci polymerace kaprolaktonu (CLO) jsou běžně užívány organocínaté, resp. zinečnaté sloučeniny, které do řetězce polymeru vnášejí nežádoucí prvek. Ze zdravotního hlediska se jeví vhodnějšími kandidáty iniciace CLO sloučeniny vápníku a hořčíku. Předmětem práce je příprava ekologického polymerního změkčovadla na bázi ϵ -kaprolaktonu, přiraveného v přítomnosti laktamátu vápníku, resp. hořčíku a jeho aplikace v polyvinylchloridu.

Ústav inženýrství pevných látek

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

prof. Ing. Jindřich Leitner, DrSc.

SEZNAM SEKČÍ

1. [Materiálové inženýrství](#)

Materiálové inženýrství

MÍSTO: B360

KOMISE

prof. Ing. Jindřich Leitner, DrSc. (předseda)

prof. Ing. Václav Švorčík, DrSc.

doc. Ing. Jakub Siegel, Ph.D.

Ing. Alena Řezníčková, Ph.D.

Ing. Nikola Slepíčková Kasálková, Ph.D.

doc. Ing. Jaromír Lederer, CSc. (UniCRE)

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:10 [Bc. Oleg Gorin](#) (M2, Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.)

Plasmon-assisted electrochemical C-H amination

09:25 [Bc. Lenka Hrudníková](#) (M2, Ing. Alena Řezníčková, Ph.D.)

Příprava a charakterizace tenkých měděných vrstev žíhaných ve vakuu

09:40 [Bc. Tereza Jílková](#) (M2, Ing. Roman Elashnikov, Ph.D.)

Příprava a charakterizace N-dopovaných uhlíkových nanostruktur dekorovaných kovovými nanočásticemi pro katalytické aplikace

09:55 [Bc. Daria Karepova](#) (M1, Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.)

Příprava smart antimikrobiálních povrchů na bázi hydrofobního MOFu a jeho elektro-aktivací samočisticích vlastností

10:10 [Bc. Kristýna Požárová](#) (M1, Ing. Ondřej Kvítek, Ph.D.)

Příprava a řízené uvolňování Ag nanočástic z hydrogelu karboxymethylcelulózy

10:45 [Bc. Jonáš Priškin](#) (M2, prof. Ing. Petr Slepíčka, Ph.D.)

Solvent casting COC: povrchové a tepelné úpravy a charakterizace

11:00 [Bc. Laura Špaková](#) (M2, prof. Ing. Petr Slepíčka, Ph.D.)

Systémy polymer-protoporfyrin pro fotodynamickou terapii nádorů

11:15 [Bc. Andrea Tošovská](#) (M2, Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.)

Chirální plazmon-aktivní nanostruktury pro enantioselektivní detekci léčiv na základě SERS

11:30 [Bc. Šárka Trhoňová](#) (M2, Ing. Nikola Slepíčková Kasálková, Ph.D.)

Příprava hydrogelů na bázi PVA pro tkáňové inženýrství

11:45 [Bc. Cyril Vacek](#) (M2, prof. Ing. Petr Slepíčka, Ph.D.)

Charakterizace a povrchová modifikace nového biopolymerního nanokompozitu Hastalex

Plasmon-assisted electrochemical C-H amination

Bc. Oleg Gorin (M2)

Školitel: Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.

Organická elektrochemie právě prochází érou renesance, což je úzce spojeno s možností provádět organické transformace za mírných podmínek, s vysokou selektivitou, vysokým výtěžkem a bez použití toxických rozpouštědel. Kombinace organické elektrochemie s alternativními přístupy, jako je fotochemie, má velký potenciál díky indukovaným synergickým efektům. V této práci poprvé navrhujeme využití plazmoniky pro zvýšení rychlosti a regioselektivity chemické reakce provedené ve fotoelektrochemickém režimu. Výhody navrhované cesty jsou demonstrovány na modelové reakci s tvorbou vazby C-N mezi pyrazolem a substituovanými deriváty benzenu. Reakce byla provedena ve fotoelektrochemickém režimu na povrchu plazmonicky aktivní elektrody Au@Pt a pozorovali jsme vliv plazmonu na výtěžek reakce a regioselektivitu. Bylo demonstrováno výrazné zvýšení rychlosti reakce a změna regio-selektivity produktů za tvorby převážně "stericky nevýhodných" ortho izomerů.

Příprava a charakterizace tenkých měděných vrstev žíhaných ve vakuu

Bc. Lenka Hrudníková (M2)

Školitel: Ing. Alena Řezníčková, Ph.D.

Náplní této práce je charakterizace povrchových vlastností tenkých měděných vrstev, které byly připraveny katodovým naprašováním na plazmaticky aktivované sklo s následným žíháním ve vakuu. Fyzikální, chemické a morfologické vlastností povrchu měděných vrstev byly zkoumány řadou analytických metod. Pomocí rentgenové fotoelektronové spektroskopie (XPS) bylo zjištěno, že množství Cu roste se zvyšující se dobou depozice. S vyšším obsahem mědi na povrchu také narůstá i hodnota u kontaktního úhlu vody. Snímky z mikroskopu atomárních sil (AFM) a skenovacího elektronového mikroskopu (SEM) potvrzují, že povrch silnějších vrstev je jednolitý. Stárnutím vzorků se mírně snižuje jejich smáčivost a jsou tedy hydrofobnější. Takto připravené materiály nacházejí uplatnění v elektronice (díky jejich vodivosti) či optoelektronice (solární panely). Dalším cílem práce je pozorovat antibakteriální, cytotoxické či fungicidní účinky měděných nanovrstev, neboť měď silně inhibuje růst některých bakterií a zároveň je biogenním prvkem, což má potenciál v medicíně aplikacích.

Příprava a charakterizace N-dopovaných uhlíkových nanostruktur dekorovaných kovovými nanočásticemi pro katalytické aplikace

Bc. Tereza Jílková (M2)

Školitel: Ing. Roman Elashnikov, Ph.D.

Plazmon-aktivní materiály si díky svým vlastnostem získávají pozornost mimo jiné na poli elektrochemie a katalýzy. V této práci jsme se zabývali přípravou plazmon-aktivního katalyzátoru na bázi karbonizovaných polypyrrolových nanotrubiček (cPPyNTs) a měděných nanočástic (CuNPs). Nejdříve byly syntetizovány a poté žíhány polypyrrolové nanotrubičky jako templát pro přípravu N-dopovaných uhlíkových nanostruktur. Následně byly na jejich povrchu redukovány CuNPs s cílem zavést do struktury plazmon-aktivní komponent. Úspěšná syntéza požadovaných struktur byla prokázána pomocí skenovací elektronové mikroskopie (SEM) a SEM-EDX analýza potvrdila chemické složení připravených nanostruktur. Kromě toho metody XPS a XRD neukázaly přítomnost oxidů mědi. Tvorba kovových nanočástic byla potvrzena i pomocí UV-Vis spektroskopie, která zaznamenala absorpční maximum kolem 600 nm typické pro nanočástice mědi. Následně byla prozkoumána elektrochemická aktivita pomocí modelových reakcí HER a ORR bez osvětlení a při osvětlení různými vlnovými délkami. ORR měření ukázala zvýšení hustoty proudu při ozáření vzorků v závislosti na používaných vlnových délkách. Získané výsledky prokázaly, že připravený materiál má vysoký potenciál pro katalytické aplikace v oblastech palivových článků a použití zeleného vodíku.

Příprava smart antimikrobiálních povrchů na bázi hydrofobního MOFu a jeho elektro-aktivací samočisticích vlastností

Bc. Daria Karepova (M1)

Školitel: Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.

Metal-organické sítě jsou porézní koordinační sloučeniny složené z organických ligandů a kovových iontů nebo shluků kovových atomů. Velká rozmanitost struktur metal-organických sítí skýtá potenciál pro jejich použití v různých aplikacích včetně přípravy antibakteriálních materiálů pro zdravotnické prostředí. Tato práce se zabývá vývojem antibakteriálního materiálu na bázi metal-organické sítě UiO-66 poskytujícího elektrickým proudem přepínatelné samočisticí a antimikrobiální vlastnosti založené na vzniku plynné vrstvy na povrchu substrátu ve vodném prostředí. Vzorky byly připraveny roubováním UiO-66 na povrch skla s tenkou vrstvou platiny. Následně u vzorků byly sledovány spektrální a chemické změny na povrchu, byla studována změna jejich hydrofobnosti v každém kroku syntézy a optimalizovány vlastnosti finálních hydrofobních povlaků. Výsledný materiál byl podroben zkouškám samočisticích vlastností v imitovaném kontaminovaném a vodném prostředí.

Příprava a řízené uvolňování Ag nanočástic z hydrogelu karboxymethylcelulózy

Bc. Kristýna Požárová (M1)

Školitel: Ing. Ondřej Kvítek, Ph.D.

Nanočástice stříbra mají díky prokázaným antibakteriálním účinkům široké uplatnění, např. ve zdravotnictví, chemickém průmyslu a kosmetice, ale ve vyšších koncentracích jsou toxické. Řešením tohoto problému by mohlo být jejich řízené uvolňování z polymerních hydrogelů. Hydrogely byly připraveny z karboxymethylcelulózy síťováním pomocí kyseliny citronové. Kyselina citronová byla rovněž využita pro redukci AgNO_3 při přípravě stříbrných nanočástic, které byly následně do hydrogelu zabudovány. Připravované nanočástice byly kulovitého tvaru o průměru cca 20 nm. K jejich uvolnění ze struktur hydrogelů docházelo během 24 hodin. Připravované vzorky byly stabilní v destilované vodě a málo stabilní v pufovaném fyziologickém roztoku. U vzorků byla sledována prokazatelná antibakteriální aktivita vůči *E. Coli* a *S. aureus*. Tyto kompozitní materiály se jeví jako perspektivní pro využití v medicíně např. pro prostředky ke krytí ran.

Solvent casting COC: povrchové a tepelné úpravy a charakterizace

Bc. Jonáš Priškin (M2)

Školitel: prof. Ing. Petr Slepíčka, Ph.D.

Cyklické olefinové kopolymery patří mezi novou třídou polymerních materiálů. Tyto materiály nacházejí použití ve výrobě transparentních výlisků pro ukládání optických dat nebo v optice, např. pro čočky či senzory. Tyto materiály jsou také zvláště zajímavé pro primární balení léčiv, zdravotnické prostředky a diagnostické jednorázové produkty. V práci jsou charakterizovány folie vyrobené metodou solvent casting a podrobené povrchové plazmatické aktivaci či s deponovanými Au nanovrstvami. V rámci práce byl charakterizován vliv plazmatické modifikace na povrchovou morfologii a chemii připravených struktur. U vzorků s naprašovanými Au vrstvami byly sledovány jejich morfologické a optické vlastnosti. Při přípravě folií metodou solvent casting zůstává zbytkové množství chloroformu v polymeru jako změkčovaadlo, čehož bylo využito pro tvorbu 3D bublinkaté struktury obohacené o ušlechtilý kov. Takto připravené materiály mohou nalézt uplatnění jak 3D skefoldy pro růst buněk.

Systémy polymer-protoporfyrin pro fotodynamickou terapii nádorů

Bc. Laura Špaková (M2)

Školitel: prof. Ing. Petr Slepíčka, Ph.D.

Experimentálna fotodynamická terapia nádorov v súčasnosti na seba púta veľkú pozornosť pre svoju efektivitu v liečbe rakoviny vďaka použitiu špecifických fotosenzibilizátorov – látok, ktoré absorbujú žiarenie určitej vlnovej dĺžky a premieňajú ho na fluorescenciu alebo aktivujú kyslík na reaktívne kyslíkové radikály. Efektivita spočíva v cieleaní na rakovinové bunky, pričom bunky zdravého tkaniva nie sú liečbou zaťažované. Pre tento proces je dôležitý tzv. EPR efekt, vďaka ktorému je zabezpečená preferenčná akumulácia polymérneho konjugátu s fotosenzibilizátorom v nádorovom tkanive v dôsledku jeho poškodenej vaskulatury a nevyvinutému lymfatickému systému. Po akumulácii konjugátu a následnom odštiepení fotosenzibilizátoru v nádore je na aktiváciu fotosenzibilizátoru použité žiarenie s vhodnou vlnovou dĺžkou, čo zabezpečí tvorbu cytotoxických reaktívnych foriem kyslíka, singletový kyslík, a zničenie rakovinových buniek. Spomínaná fluorescencia môže byť nápomocná pri diagnostike rakoviny a fluorescenčne riadených chirurgických zákrokov. Cieľom tejto práce bolo pripraviť konjugáty biokompatibilných polymérov s fotosenzibilizátorom Pyf-B (Pyropheophorbide B), ich charakterizácia, štúdium fluorescencie a štúdium uvoľňovania fotosenzibilizátoru z konjugátov.

Chirální plazmon-aktivní nanostruktury pro enantioselektivní detekci léčiv na základě SERS

Bc. Andrea Tošovská (M2)

Školitel: Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.

Interakci mezi světlem a hmotou lze výrazně posílit pomocí excitace povrchových plazmonů, která umožňuje subdifrakční fokusování světelné energie. Tento jev je zvláště výrazný v případě tzv. plazmonických horkých míst, která našly široké uplatnění v oblasti povrchově zesílené Ramanovy spektroskopie (SERS). Tato práce se zabývá přípravou a použitím chirálních nanostruktur zlata, které mají unikátní tvar helikoidů a chiralitu zakódovanou v každé jednotlivé nanočástici. Zkoumá se vliv chirálních analytů umístěných v plazmonickém horkém místě na intenzitu lokálního elektrického pole a jejich SERS odezvu. Byla vyrobena uspořádaná vrstva Au helikoidů s konzistentní mezerou mezi nanočásticemi na plazmonově aktivní zlaté mřížce, která je schopna podporovat excitaci a šíření povrchových plazmon-polaritonů. Chirální molekuly analytu, konkrétně R(+) nebo S(-) enantiomery naproxenu, byly umístěny v prostoru mezi Au helikoidy a byl pozorován významný rozdíl v zesílení SERS mezi enantiomery v závislosti na chiralitě helikoidů. Tyto experimentální poznatky mají potenciál výrazně přispět k rozvoji enantioselektivní detekce léčiv.

Příprava hydrogelů na bázi PVA pro tkáňové inženýrství

Bc. Šárka Trhoňová (M2)

Školitel: Ing. Nikola Slepíčková Kasálková, Ph.D.

Polyvinylalkohol (PVA) je hydrofilní polymer s vynikající biokompatibilitou, který díky svým vlastnostem nachází uplatnění v různých biomedicínských oblastech. Hydrogely na bázi PVA se v průběhu času ukázaly jako slibné biomateriály pro nejrůznější aplikace tkáňového inženýrství, zejména pro krytí ran, kultivaci vaskulárních buněk a cévní implantace. V této práci byly porovnávány vlastnosti PVA hydrogelů síťovaných kyselinou citronovou, jednak čistých a jednak dotovaných polyethylengykolem (PEG). Metodou gravimetrie byl studován hmotnostní úbytek materiálu po expozici vodě a hmotnostní úbytek způsobený ablací po modifikaci argonovým plasmatem. Dále byla stanovována změna pH vody a buněčných kultivačních médií, které byly ve styku s hydrogely. V neposlední řadě bylo sledováno stárnutí hydrogelů a změny jejich povrchové morfologie.

Charakterizace a povrchová modifikace nového biopolymerního nanokompozitu Hastalex

Bc. Cyril Vacek (M2)

Školitel: prof. Ing. Petr Slepíčka, Ph.D.

Při hledání materiálů s unikátními vlastnostmi je nutné tyto vlastnosti velmi často optimalizovat pomocí vhodné kombinace materiálů při tvorbě kompozitů. Jedním takovým je i nový biopolymerní nanokompozit Hastalex obsahující grafen. Tato práce se zabývá jeho povrchovou modifikací plazmatem, depozicí ušlechtilého kovu či tepelným namáháním s cílem změnit jeho povrchové vlastnosti pro použití v tkáňovém inženýrství. Modifikovaný povrch byl studován pomocí mikroskopie atomárních sil, goniometrie a SEM. Byla sledována cytokompatibilita, antibakteriální vlastnosti, smáčivost a morfologie povrchu, jeho prvkové složení a mechanické vlastnosti. Plazmatická expozice měla významný vliv na cytokompatibilitu fólie Hastalex pro oba výkony plazmatu 3 W i 8 W. Počet buněk lidských fibroblastů na plazmaticky exponované fólii Hastalex se výrazně zvýšil ve srovnání s původním polymerem a předčil tkáňový polystyren. Plazmatická expozice také ovlivnila růst a tvar buněk fibroblastů. Depozice Ag v kombinaci s tepelným namáháním významně ovlivnila antibakteriální vlastnosti polymeru Hastalex.

Ústav informatiky a chemie

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Petr Čech, Ph.D.

SEZNAM SEKCI

1. [Bioinformatika a chemická informatika](#)

Bioinformatika a chemická informatika

MÍSTO: B1322

KOMISE

prof. Mgr. Daniel Svozil, Ph.D. (předseda)

doc. Ing. Filip Lankaš, Ph.D.

prof. Andrea Brancale

Mgr. Jan Pačes, Ph.D.

Ing. David Staněk, Ph.D.

Ing. David Příhoda

PROGRAM

15:00 **zahájení**

15:10 [Bc. Martin Engst](#) (B1, prof. Mgr. Daniel Svozil, Ph.D.)

Gathering the knowledge of terpene biosynthesis

15:25 [Bc. Jozef Fülöp](#) (M2, prof. Mgr. Daniel Svozil, Ph.D.)

A comprehensive analysis of RNA binders

15:40 [Bc. Adam Hanzlík](#) (M1, Ing. Petr Čech, Ph.D.)

Applications for Optical Chemical Structure Recognition

15:55 [Oleksandra Shumilina](#) (B4, doc. Ing. Filip Lankaš, Ph.D.)

Sequence dependent structural dynamics of DNA containing radiation damage

16:10 [Pavlína Slavníková](#) (M1, doc. Ing. Filip Lankaš, Ph.D.)

Modelling sequence dependant structure and deformability of DNA

16:25 [Bc. Antonín Zajíček](#) (M1, Ing. Ivan Čmelo, Ph.D.)

Stratified data selection using Kohonen maps

Gathering the knowledge of terpene biosynthesis

Bc. Martin Engst (B1)

Školitel: prof. Mgr. Daniel Svozil, Ph.D.

About 60% of all known natural products are terpenoids, precursors to terpenoids are called terpenes. While there are many terpenes, they are all made from a set of very simple substrates, all comprised of connected isoprene units. The enzymes that catalyze these reactions, terpene synthases, must employ very clever biochemistry, which makes them interesting study subjects for understanding the intricacies of enzymatic catalysis. We have built a comprehensive dataset of known mechanisms of terpene biosynthesis which we are using to assess the feasibility of utilizing machine learning approaches like large language models to predict features and properties of terpene synthases.

A comprehensive analysis of RNA binders

Bc. Jozef Fülöp (M2)

Školitel: prof. Mgr. Daniel Svozil, Ph.D.

The field of RNA-targeted therapeutics is growing quickly and holds great promise for treating many diseases. In my diploma thesis, I analyzed large amounts of data from sources like the Enamine Hit Locator and other RNA libraries to find molecules that can modulate RNA behavior. I focused on the chemical properties and distributions of RNA-binding molecules, using quantitative estimates of drug-likeness (QED), dimensionality reduction, and scaffold analysis to create RNA-binders' comprehensive profile. I also developed a machine learning model that uses ECFP6 fingerprints, which helps us find promising RNA-binding molecules much faster. This study provides valuable insights for developing RNA-based therapies and advances the field of medicinal chemistry.

Applications for Optical Chemical Structure Recognition

Bc. Adam Hanzlík (M1)

Školitel: Ing. Petr Čech, Ph.D.

Chemical literature often presents information in raster images of chemical structures. These are interpretable by humans but are not suitable for computer tasks such as storage and querying. Optical Chemical Structure Recognition (OCSR) tools bridge this gap by converting images into machine-readable formats like SMILES and MOL files, facilitating the extraction of chemical knowledge, most commonly to be stored in large optimized databases. First OCSR tools relied on chemical drawing rules, for example open-source tools OSRA, MolVec, and Imago. Advancements in deep learning have led to the development of machine-learning based tools like Decimer, MolScribe, and MolGrapher. This work benchmarks these tools against a dataset, evaluating their performance against varying degrees of graphical damage. The benchmarking indicates that different tools perform worse when working with different types of damage. As such a composite approach employing multiple OCSR tools in tandem with compound validation checks is appropriate when seeking to maximize successful recognition rates. This strategy has been successfully employed in a real data extraction project.

Sequence dependent structural dynamics of DNA containing radiation damage

Oleksandra Shumilina (B4)

Školitel: doc. Ing. Filip Lankaš, Ph.D.

The photo-induced formation of cyclobutane pyrimidine dimers is a highly mutagenic and cancerogenic DNA lesion. Plants repairing that damage with photolyases, placental mammals with nucleotide excision pathway. However, the exact mechanism how the repair enzymes recognize a damaged site in DNA is not fully understood. Molecular dynamics simulations are very powerful tool for study macromolecular dynamics. It could provide an information about structural changes in DNA sequence and its stability. By analyzing simulation results some patterns in damaged DNA could be detected which is leads to better understanding of recognition mechanisms and even possibly some cure design.

Modelling sequence dependant structure and deformability of DNA

Pavlína Slavníková (M1)

Školitel: doc. Ing. Filip Lankaš, Ph.D.

The sequence of the DNA double helix plays a significant role in determining its three-dimensional structure and mechanical flexibility. This understanding is essential for the shape-specific recognition of DNA's structural motifs by many proteins and small ligands, as it affects their binding affinity and provides us with a way to estimate the specificity of transcription factors, nucleosome core histone proteins, and other regulatory molecules involved in gene expression. The most efficient way to explore and comprehend this matter in greater detail is probably through the use of computer simulations. Atomic-resolution molecular dynamics (MD) simulations are employed to measure the deviations of a DNA molecule from the ideal B-DNA form and model its mechanical properties. To this end, DNA is described in a coarse-grained manner as an ensemble of interacting rigid bodies representing individual bases. The sequence-dependent structure and deformability is then deduced from statistical properties of internal coordinates describing the relative displacement and rotation of the bases. I plan to extend this standard model by adding the phosphate group to the description as another rigid body, so that DNA sequence-specific structure and deformability may be studied at a finer level.

Stratified data selection using Kohonen maps

Bc. Antonín Zajíček (M1)

Školitel: Ing. Ivan Čmelo, Ph.D.

The splitting of data between a training and a testing set is one of the core tasks that contributes to overall quality of the validated machine learning model. There are numerous approaches to conducting this split, all with their own strengths and weaknesses. This work focuses on development and testing of a new approach based on Kohonen self-organizing maps for predicting biological activities of organic compounds from their structures (i.e., QSAR). This approach was compared against a baseline method represented by a random data split between the training and testing set.

Ústav chemické technologie restaurování památek

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Vítězslav Knotek, Ph.D.

SEZNAM SEKCI

1. [Konzervování-restaurování uměleckořemeslných děl z textilních materiálů](#)
2. [Technologie konzervování-restaurování objektů kulturního dědictví](#)

Konzervování-restaurování uměleckořemeslných děl z textilních materiálů

MÍSTO: NEUVEDENO

KOMISE

doc. Dr. Ing. Michal Ďurovič (předseda)

Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.

Ing. Klára Drábková, Ph.D.

Bc. Jana Bureš Víchová, DiS.

PROGRAM

zahájení

[Viktorie Antošová](#) (B4, Ing. Klára Drábková, Ph.D.)

Restaurování panenky z 19. století

[Katerina Lagazzi](#) (B4, Ing. Klára Drábková, Ph.D.)

Restaurování živůtku

[Anna Procházková](#) (B4, Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.)

Restaurování vějíře z období empíru

[Bc. Kristýna Radostová](#) (B3, Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.)

Konzervování fragmentů roušky a textilní korunky abatyše Judity Eibenštolerové z Eibenštolu

[Marie Rafajová](#) (B3, Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.)

Rekonzervace medailonku s textilním závěsem

[Yuliya Ryabyts](#) (B4, Ing. Klára Drábková, Ph.D.)

Restaurování manipulu

[Ľudmila Uhrinová](#) (B4, Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.)

Restaurování pánské vesty

[Anna Čáslavská](#) (B3, Ing. Klára Drábková, Ph.D.)

Restaurování stuh s železným zapínáním

Restaurování panenky z 19. století

Viktorie Antošová (B4)

Školitel: Ing. Klára Drábková, Ph.D.

Má práce se zabývala restaurováním panenky z 19. století ze sbírek Národního muzea. Před restaurováním byl proveden uměleckohistorický a textilně-technologický průzkum předmětu. Panenka se skládá z těla a kabátku se sukní. Ty jsou sešity z více různobarevných textilií. Nejprve byla provedena demontáž kabátku a sukně. Tělo, kabátek i sukně byly odsávány restaurátorským vysavačem. Tělo bylo mechanicky čištěno polyuretanovou houbičkou. Poté bylo stíráno vatovým tamponkem navlhčeným destilovanou vodou. Nakonec byla konsolidována stužka na čelence, která se nachází na hlavě panenky, pomocí 4% roztoku Tylosy MH300. Oblečky nemohly přijít do kontaktu s vodou, kvůli nestálosti některých barev, proto byly stírány tamponkem napuštěným perchlorethylenem. Na podšívce sukně se nacházela popraskaná vrstva škrobu, která byla odstraněna mechanicky pomocí pinzety a skalpelu. Následovala konsolidace poškozených míst na sukni a kabátku. Trhliny na kabátku byly konsolidovány hedvábnou nití taženou z organzy a záplaty z hedvábné krepelíny. U sukně byla bodově přichycena hedvábnou nití ozdobná síťka. Dále byl poškozený ozdobný lem sukně překryt hedvábnou krepelínou a přichycen nití. Po zásahu byl předmět adjustován na lůžko z polyethylenové pěny a uložen do krabice s víkem z nekyselé lepenky.

Restaurování živůtku

Katerina Lagazzi (B4)

Školitel: Ing. Klára Drábková, Ph.D.

Restaurování živůtku V rámci předmětu Semestrální práce III a IV byl v akademickém roce 2022/2023 restaurován zelený živůtek ze sbírek Národního muzea. Restaurování proběhlo v restaurátorských dílnách VOŠTŘ a SUŠTŘ, Praha 1, U Půjčovny 9. Byl proveden uměleckohistorický, textilně-technologický průzkum předmětu a čištění stíráním zvlhčenými vatovými tampónky. Hlavní částí restaurátorského zásahu byla snaha konsolidovat rozsáhlé poškození textilního materiálu v pase živůtku pomocí dvou různých postupů. V prvním semestru bylo postupováno především technikou šité skeletáže na různé druhy pomocného textilního materiálu, zatímco v následujícím semestru bylo přistoupeno ke konsolidaci podlepením polyamidovým práškovým lepidlem na bavlněný pomocný materiál. Dále byla pro předmět vytvořena vhodná adjustace dle přání zadavatele.

Restaurování vějíře z období empíru

Anna Procházková (B4)

Školitel: Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.

Vějíř byl restaurován v rámci předmětu Semestrální práce IV specializace Konzervování – restaurování uměleckořemeslných děl z textilních materiálů. Práce byly prováděny v ateliéru Vyšší odborné školy textilních řemesel a Střední umělecké školy textilních řemesel. Součástí práce byl uměleckohistorický a textilně technologický průzkum. Vějíř byl mechanicky očištěn pomocí PUR houbiček a měkké gumy. Dále následovalo odstranění druhotných oprav, které způsobovaly pnutí a vytvářely žluté skvrny. Opravy byly vlhčeny studenou parou a poté snímány skalpelem. Takto byly odstraněny také žluté skvrny vzniklé při dřívější aplikaci druhotných oprav. Při průzkumu předmětu bylo zjištěno, že malované části vějíře krakelují a sprašují, tato místa byla zafixována 3% roztokem Klucelu G v ethanolu. Vzhledem ke stavu a charakteru tkaniny, byl vějíř restaurován pomocí metod vycházejících spíše z restaurování papíru. Ztráty a praskliny v lomech listu byly konsolidovány pomocí japonského papíru a 5 % roztoku Klucelu G v ethanolu. Prasklá žebra byla lepena v lomu a dále plošně podlepena dlahami z melinexové folie pomocí 60% roztoku Paraloidu B72 v toluenu. Pro adjustaci vějíře bylo vytvořené stupňovité lůžko z polypropylenové pěny umístěné do krabice z kartonu Klug.

Konzervování fragmentů roušky a textilní korunky abatyše Judity Eibenštolerové z Eibenštolu

Bc. Kristýna Radostová (B3)

Školitel: Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.

Restaurování fragmentů roušky a textilní korunky abatyše Judity Eibenštolerové z Eibenštolu. Restaurovaným předmětem byl archeologický soubor fragmentů roušky a textilní korunky abatyše Judity Eibenštolerové z Eibenštolu. Fragmenty, datované do roku 1600, byly nalezeny v hrobu abatyše v bazilice sv. Jiří na Pražském hradě. Během textilně technologického průzkumu bylo zjištěno, že se jedná o několik druhů fragmentů tkanin s rozmanitými vazbami. U port textilní korunky bylo z důvodu degradace kovových nití přistoupeno pouze k čištění suchou cestou a jejímu vyrovnávání pomocí ultrazvukového zvlhčovače. Mokrý cesta čištění byla zvolena pro zbylé fragmenty, především tedy části roušky. Nakonec byla zhotovena vhodná adjustace a byly navrženy doporučené podmínky pro uložení a vystavení archeologického souboru.

Rekonzervace medailonku s textilním závěsem

Marie Rafajová (B3)

Školitel: Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.

Předmětem rekonzervace je medailon s mosaznou obrubou a nekovovou výplní zavěšený na hedvábné stužce a provázku. Medailon je součástí pohřební výbavy svatojiřské abatyše Anny Mechtildy Schenweisové z Ecksteinu, doložené v úřadu v letech 1671-1691. V rámci restaurátorských prací byl proveden mikrobiologický průzkum, uměleckohistorický průzkum, technologický průzkum a následně rekonzervační zásah. Při průzkumu předmětu bylo zjištěno, že byl celý předmět v minulosti nevhodně konzervován ponorem do laku (identifikován pomocí IČ jako nitrát celulózy). Tento zásah znemožnil analýzu materiálového složení výplně medailonu, způsobil křehnutí hedvábné stužky, a tím její mechanické poškození, které vedlo k roztržení stužky na dvou místech. Z jednotlivých částí medailonu byl odstraněn lak pomocí acetonu, následovalo mechanické čištění obruby a výplně medailonu a mokré čištění hedvábné stužky a provázku. Trhliny na stužce byly zajištěny metodou podlepení tavným polyamidem na novou netkanou textilií. Závěrem byl medailon adjustován na podložku z Moltonu a vložen do krabice z lepenky s alkalickou rezervou.

Restaurování manipulu

Yuliya Ryabyts (B4)

Školitel: Ing. Klára Drábková, Ph.D.

Restaurování manipulu. Restaurovaný předmět, s inventárním číslem H2 – 36632, je součástí sbírek Národního muzea. Manipul pochází ze zabaveného německého majetku v Miroticích roku 1946. Jedná se o předmět z 1. poloviny 19. st. Byl proveden umělecko-historický a textilně-technologický průzkum. Čištění bylo uskutečněno pomocí restaurátorského vysavače s regulovatelným odtahem přes sítku, stíráním pomocí PUR houbiček a pryže v tužce. Lokálně, pomocí ultrazvukového párového zvlhčovače, byl odstraněn přilepený papír. Na základě zkoušky stálobarevnosti bylo zvoleno čistit manipul pomocí zvlhčených vatových tampónků a vatových tyčinek za současného vysoušení studeným proudem vzduchu. Byla provedena demontáž inventárního čísla, hnědé nitě, a demontáž světlomodré degradované tkaniny. Po vyčištění předmětu následovalo vyrovnávání – zatěžkáváním sklíčky a pomocí kovových závaží. Konsolidace byla zvolena kombinací podlepování polyamidovým práškem (Lascaux 5350) a šitých oprav (skeletáž, šitý sendvič, přišití zpět demontované tkaniny). Jako adjustace byla zvolena výroba krabice s víčkem z kartonu KLUG a ušití válečku z netkané textilie (Tyveku), vycpaného vatelínem.

Restaurování pánské vesty

Ľudmila Uhrinová (B4)

Školitel: Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.

Predmetom mojej práce bolo reštaurovanie pánskej vesty, ktorá bola podľa karty datovaná na 18. storočie. Prostredníctvom umelecko – historického prieskumu bolo datovanie upresnené na prelom 18. a 19. storočia. Bol uskutočnený textilno – technologický prieskum pomocou optickej mikroskopii a vlákna boli identifikované na základe morfológických znakov. Vesta bola čistená pomocou múzejného vysávača s regulovateľným odsávaním cez sieťku. Následne bola uskutočnená skúška stálofarebnosti, ktorá preukázala nestálosť farbiva vyšívacích priadzí. Preto boli stieraním pomocou navlhčeného tampónu v destilovanej vode čistené len zadné diely, následne boli sušené studeným prúdom vzduchu. Poškodené časti vesty boli konsolidované pomocou šijacích techník alebo kombináciou podlepovania a šitia. Pre vestu bola na mieru vytvorená krabica z lepenky s alkalickou rezervou so zarážkami pre zamedzenie pohybu a vekom. Ďalej bola vytvorená vypchávká z nebielenej bavlny, ktorá bola vyplnená vatelínom.

Restaurování stuhy s železným zapínáním

Anna Čáslavská (B3)

Školitel: Ing. Klára Drábková, Ph.D.

Předmětem restaurování je hedvábná stuha hnědé barvy s železným zapínáním nalezená v hrobě č. 80 abatyše Anny Scholastiky Baulerové z Hohenburku v bazilice sv. Jiří na Pražském hradě. Stuha je datována do poloviny 18. století. V rámci restaurátorské práce byl proveden mikrobiologický průzkum, uměleckohistorický průzkum, technologický průzkum a následně restaurátorský zásah. Pro možnost provedení restaurátorského zásahu bylo nutné stuhu složenou do mašle nejprve rozvázat. Při rozvázání bylo zjištěno, že je stuha složena ze dvou dílů, na jednom z nich byla přichycena část železného zapínání. Obě části stuhy byly ošetřeny nejprve suchou a poté mokrou cestou. Po celém procesu čištění se část kovového zapínání téměř uvolnila a pro lepší manipulaci a konzervování byla šetrně oddělena. Poté bylo možné stuhu svázat zpět do původního stavu. Prvním krokem při konzervaci železného zapínání bylo mechanické čištění, následovalo odsolování, stabilizace tanátováním a závěrečná konzervace. Při manipulaci s částmi zapínání bylo zjištěno, že do sebe dvě části zapadají a byly slepeny zpět k sobě Paraloidem B72. Do ok stuhy byly vytvořeny vhodné vycpávky a následně byla uložena společně s částmi železného zapínání do krabice z lepenky s alkalickou rezervou.

Technologie konzervování-restaurování objektů kulturního dědictví

MÍSTO: NEUVEDENO

KOMISE

doc. Ing. Alena Michalcová, Ph.D. (předseda)

Ing. Vítězslav Knotek, Ph.D.

Ing. Jan Krejčí, Ph.D.

PROGRAM

zahájení

[Laura Fedičová](#) (M2, doc. Dr. Ing. Dana Rohanová)

Robotné známky Múzea mesta Bardejov

[Bc. Ondřej Görtler](#) (M1, doc. Ing. Milan Kouřil, Ph.D.)

Vývoj patinovaných rezistometrických čidel

[Bc. Alexandra Kocmichová](#) (M1, Ing. Michal Novák, Ph.D.)

Vliv přídavku derivátu celulózy na vlastnosti injektážních malt

[Kateřina Mrázková](#) (B3, None)

Využití mikroskopických technik při identifikaci pigmentů v barevných vrstvách

[Elizaveta Vershinina](#) (M1, Ing. Vítězslav Knotek, Ph.D.)

Vliv magnetické zvukové stopy na degradaci kinofilmových pásů z triacetátu celulózy

[Bc. Otto Wiener](#) (M1, Ing. Vítězslav Knotek, Ph.D.)

Možnosti určení obsahu trifenylyfosfátu v kinematografických filmech pomocí rentgenové fluorescence

[Zuzana Štokrová](#) (M1, None)

Chování železa ve vodném prostředí obsahujícím chloridové ionty v přítomnosti migračních inhibitorů koroze

Robotné známky Múzea mesta Bardejov

Laura Fedičová (M2)

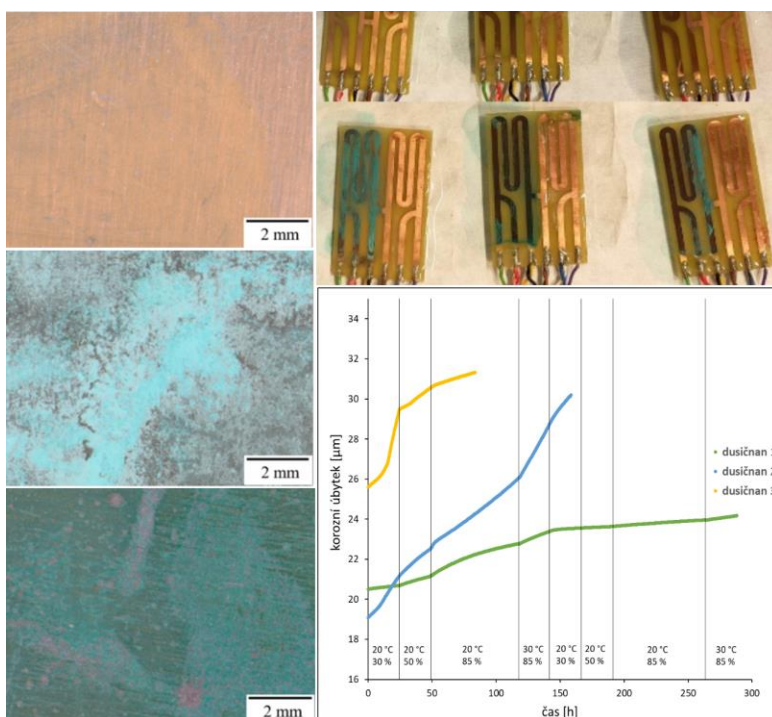
Školiteľ: doc. Dr. Ing. Dana Rohanová

Vývoj patinovaných rezistometrických čidel

Bc. Ondřej Görtler (M1)

Školitel: doc. Ing. Milan Kouřil, Ph.D.

Korozní degradace kovových materiálů je v oblasti ochrany kulturního dědictví jedním z nejzávažnějších problémů. Korozní degradace mědi může vést z dlouhodobého hlediska k nevratným poškozením artefaktů, což vyžaduje vývoj nových a lepších metod jednak pro samotné konzervování a restaurování, tak ale i pro zlepšení korozního monitoringu prostředí. V posledních desetiletích bylo vyvinuto mnoho metod pro monitorování a hodnocení korozního stavu kovů, přičemž jednou z nich je i měření pomocí rezistometrických čidel. Tato metoda je výhodná díky velké přesnosti měření korozního úbytku v čase, a to bez nutnosti kontaktu s kovovou plochou, čímž je minimalizováno poškození předmětů. Tato práce je zaměřena na vývoj nových patinovaných rezistometrických čidel na bázi mědi pro použití v preventivní památkové péči. Hlavním cílem práce bylo zkoumat vliv předkorodování mědi na měření korozní rychlosti pomocí těchto čidel. V rámci práce byl proveden srovnávací výzkum různých metod patinování mědi vzhledem k vhodnosti jejich použití na rezistometrická čidla. Dále byl zkoumán následný vliv vrstvy umělé patiny na korozní chování mědi v atmosférických podmínkách pomocí expozice v klimatické komoře.



Vliv přídavku derivátu celulózy na vlastnosti injektážních malt

Bc. Alexandra Kocmichová (M1)

Školitel: Ing. Michal Novák, Ph.D.

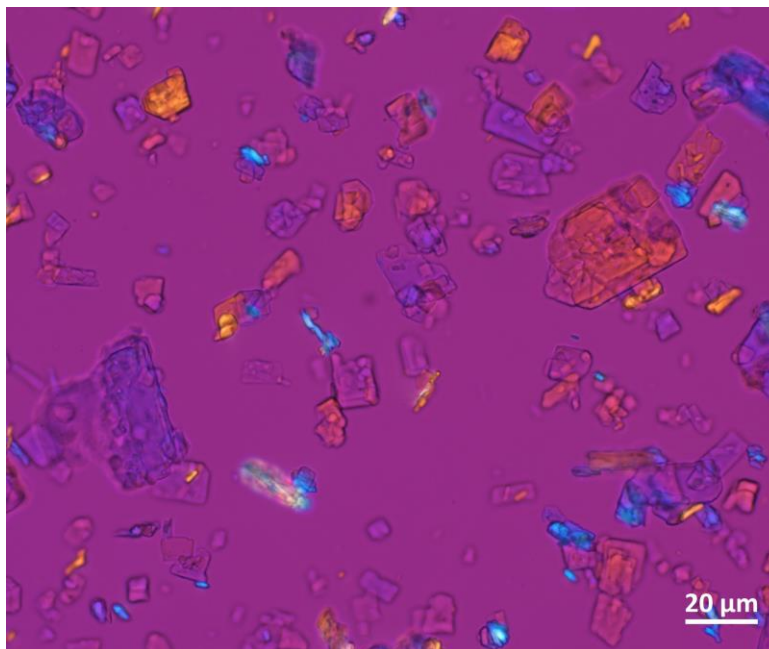
Pro restaurování a konsolidaci cenných delaminovaných vrstev omítek, mozaik či nástěnných maleb lze při restaurování in situ využít techniku injektáže malt. Stabilizací a připevněním povrchové vrstvy k původnímu zdivu tak nemusí dojít k transferu cenné vrstvy na nový podklad a lze dosáhnout maximální autentičnosti a záchrany povrchových vrstev architektonických památek. Účelem bylo popsat chování derivátu celulózy v injektážních maltách na bázi přirozeně hydraulického vápna. Na základě pozorování vlivu přidané methylhydroxyethylcelulózy byl nalezen optimální obsah derivátu pro získání pozitivních účinků na kvalitu a chování malty při injektáži a dosažení přiměřené pevnosti spoje.

Využití mikroskopických technik při identifikaci pigmentů v barevných vrstvách

Kateřina Mrázková (B3)

Školitel: None

Mikroskopické metody jako je skenovací elektronová mikroskopie (SEM) a optická mikroskopie (OM) jsou klíčovými nástroji pro identifikaci a analýzu pigmentů v barevných vrstvách uměleckých děl. Tyto metody umožňují restaurátorům a technologům v oblasti konzervování-restaurování provádět důkladné studie pigmentů a to i například při odhalení padělků. Chemicko-technologická laboratoř Národní galerie v Praze je autorem databáze DatUM, která obsahuje data z analýz standardů pigmentů známého složení od výrobců, jako jsou Kremer, Winsor & Newton a Sigma-Aldrich. Tato databáze bude mimo jiné obsahovat fotografie z optické a elektronové mikroskopie. V rámci práce je představen výběr pigmentů obsahujících ve své struktuře kobalt: coelinová modř (Winsor & Newton), kobaltová modř střední (Kremer 45710), kobaltová violeť světlá (Winsor & Newton), kobaltová violeť tmavá (Kremer 45800), kobaltová violeť světlá (Kremer 45820), kobaltová zeleň namodralá (Kremer 44151) a kobaltová žluť (Kremer 43500). Díky snímkům z mikroskopických metod lze tak pozorovat rozdílnost nejen v barvě, velikosti a v morfologii částic, ale i v jejich optických vlastnostech.



Vliv magnetické zvukové stopy na degradaci kinofilmových pásů z triacetátu celulózy

Elizaveta Vershinina (M1)

Školitel: Ing. Vítězslav Knotek, Ph.D.

Kinofilmy představují rozmanitou a komplexní soustavu materiálů s různým chemickým složením. Většina moderních filmů je složena z želatinové vrstvy obsahující fotocitlivé komponenty, polymerní podložky a antifrikčních vrstev. Od 50. let 20. století se v kinematografii začal využívat záznam zvuku pomocí magnetických částic, které byly dispergovány v pojivu a nanášely se na polymerní podložku ve formě proužků nebo polevu celé šířky pásu. Lepší pochopení vlivu magnetické zvukové stopy na degradační mechanismy acetátové kinematografické podložky má nezanedbatelný vliv na další rozvoj možností uchování a průběžných kontrol stavu archivního materiálů.

Možnosti určení obsahu trifenyolfosfátu v kinematografických filmech pomocí rentgenové fluorescence

Bc. Otto Wiener (M1)

Školitel: Ing. Vítězslav Knotek, Ph.D.

Trifenyolfosfát je běžně používané změkčovadlo triacetátových filmových podložek. Jeho množství v materiálu se časem snižuje s postupující degradací. Proto může obsah změkčovadla vypovídat o míře poškození filmu. Práce zjišťuje použitelnost ručního XRF spektrometru na průzkum tohoto materiálu z hlediska obsahu trifenyolfosfátu. Na základě připravených kalibračních standardů byla nalezena lineární závislost signálu fosforu obsaženého v trifenyolfosfátu na hmotnostním zlomku této látky ve vzorku. V práci jsou diskutovány vlivy různých faktorů na přesnost měření. Zároveň jsou naznačeny směry pro další výzkum.

Chování železa ve vodném prostředí obsahujícím chloridové ionty v přítomnosti migračních inhibitorů koroze

Zuzana Štokrová (M1)

Školitel: None

AnotaceKoroze kovů je poměrně rozsáhlým problémem týkajícím se mnoha oblastí včetně té bezpečnostní, ekonomické a ekologické. Přitom mnoha haváriím, mezi jejichž příčiny patřila koroze materiálu, by se dalo účinně předcházet, kdyby byla dodržována preventivní opatření.Mezi objekty ohrožené korozí kovů patří také železobetonové konstrukce, kde proces může probíhat na ocelové výztuži. Tyto objekty navíc bývají nezdávka postaveny poblíž dopravních komunikací (popř. přímo jsou komunikacemi – mosty) ošetřovaných v zimním období posypovou solí, která má na korozi stimulující vliv. Způsoby prevence objektů před korozí jsou různé. Vedle např. katodové ochrany nebo hydrofobních impregnací sem patří také aplikace migračních inhibitorů koroze. Ty mohou být aplikovány přímo do betonové směsi, nebo na povrch hotové stavby, odkud materiálem migrují k výztuži (odtud „migrační“).Cílem projektu bylo seznámit se se základní problematikou inhibitorů koroze, korozního chování slitin železa a porovnat inhibiční schopnosti vybraných migračních inhibitorů koroze ve vodném prostředí obsahujícím chloridové ionty. Za tímto účelem byly nejdříve provedeny ponorové zkoušky trvající třicet dní a následně elektrochemická měření. Oba typy zkoušek prokázaly inhibiční účinnost inhibitorů.