



FAKULTA
CHEMICKÉ TECHNOLOGIE
VŠCHT PRAHA

Studentská Vědecká Konference

2022

24. 11. 2022

SBORNÍK ANOTACÍ

Ústav anorganické chemie (101)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Hana Kotoučová, Ph.D.

SEZNAM SEKČÍ

1. [S1 Ústav anorganické chemie](#)
2. [S2 Ústav anorganické chemie](#)
3. [S3 Ústav anorganické chemie](#)

S1 Ústav anorganické chemie

MÍSTO: LABORATOŘ D1

KOMISE

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

Ing. Vít Jakeš, Ph.D.

Ing. Irena Hoskovcová, CSc.

Ing. Jiří Šturala, Ph.D.

Ing. Tomáš Hartman, Ph.D.

Ing. Štěpán Huber, Ph.D.

PROGRAM

09:30 **zahájení**

09:30 [Anna Mašková](#) (B2, Ing. Martin Pižl, Ph.D.)

Interkalátory DNA na bázi α -diiminových komplexů chromu

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

Supramolekulárne gridy ako multivaletný základ pre prípravu 1D a 2D štruktúr

10:00 [Václav Špička](#) (B2, Ing. Hana Kotoučová, Ph.D.)

Pozorování neobvyklého chování isoalloxazinů v přítomnosti skanditých iontů.

10:15 [Bára Parschová](#) (B3, Ing. Martin Pižl, Ph.D.)

Polypyridylové komplexy ruthenia pro interkalaci DNA

11:15 [Tereza Jilečková](#) (B3, Ing. Martin Pižl, Ph.D.)

Syntéza a charakterizace M(II) komplexů obsahující tetradentární ligandy odvozené od vitamínu B6

11:30 [Pavčina Malečková](#) (B3, Ing. Martin Pižl, Ph.D.)

Syntéza kobaltnatých komplexů odvozených od pyridoxalu

11:45 [Bc. Anastasiia Korzhova](#) (M1, Ing. Vilém Bartůněk, Ph.D.)

Selenové kompozity pro farmakologické využití

12:00 [Bc. Ivana Faltysová](#) (M1, doc. Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.)

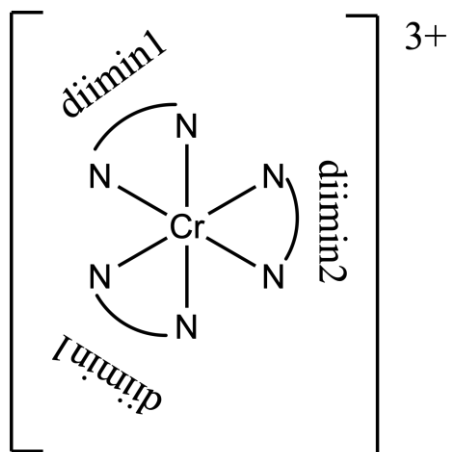
Ekologicky udržitelné kompozity na bázi reaktivního oxidu hořečnatého

Interkalátory DNA na bázi α -diiminových komplexů chromu

Anna Mašková (B2)

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 (dipyrido[3,2-a:2',3'-c]fenazin), který se může interkalovat do DNA. Komplexy chromu(III) s těmito α -diiminovými ligandy vykazují silnější oxidační účinky než jejich ruthenaté analogy. Zatím byl podrobně studován komplex $[\text{Cr}(\text{phen})_2\text{dppz}]^{3+}$, u kterého lze navýšit oxidační vlastnosti pomocí záměny ligandu phen za TAP (1,4,5,8-tetraaza-fenantren). V této práci jsme se zaměřili na komplexy Cr(III) obsahující rozdílné α -diiminové ligandy. Na základě literární rešerše byly vybrány tyto ligandy: TAP, phen, phen-CN (2-kyano-1,10-fenantrolin), dicnq (6,7-dikyanodipyridoquinoxalin), dppz (dipyridofenazin) a CN-dppz (11-kyanodipyridofenazin); díky jejich schopnosti vázat se na sekvence DNA (dppz, CN-dppz) a phen, TAP, phen-CN pro ovlivnění oxidační síly excitovaného stavu. Připravené ligandy byly charakterizovány pomocí ^1H NMR, UV-Vis a FTIR. Následně budou probíhat syntézy heteroleptických komplexů $[\text{Cr}(\text{diimin1})_2(\text{diimin2})]^{3+}$, kde diimin1 je TAP, phen nebo phen-CN a diimin2 je dppz, dppz-CN nebo dicnq.

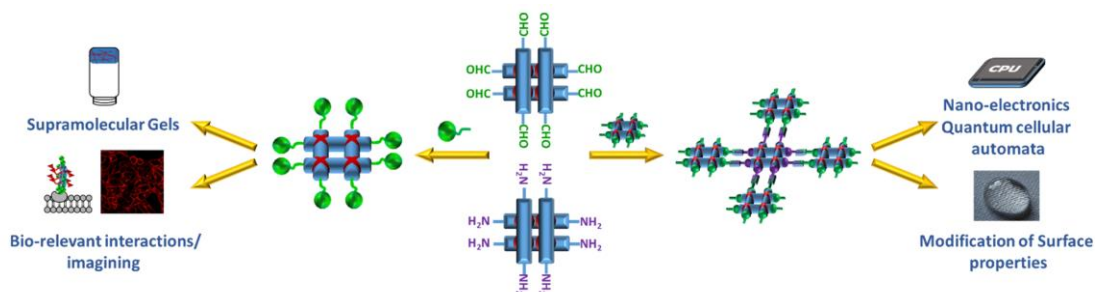


Supramolekulárne gridy ako multivaletný základ pre prípravu 1D a 2D štruktúr

Rebeka Morvaiová (B2)

Školiteľ: Ing. Jan Holub, Ph.D.

Supramolekulárne gridy sú organokovové zlúčeniny tvorené katiónmi kovov a na ne koordinovanými organickými ligandami, ktoré sa skladajú do pravidelnej pravoúhlej mriežky. Vďaka tomuto pravidelnému geometrickému usporiadaniu kovov v priestore sú gridy využiteľné v spintrionike a nanoelektronike. V tomto špeciálnu pozornosť priťahuje alternatívny koncept uchovávaní informácií, takzvaný „quantum cellular automata“. Tu sa informácia uchováva vo forme rôzne nabitých miest – napríklad v rôznych oxidačných stavoch katiónov kovov. 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. Moju prácu som začala prípravou gridov funkcionalizovaných na okrajoch aldehydmi a amínmi. Vyhodou týchto funkčných zlúčenín je ich kompatibilita a ľahká derivatizácia pomocou tvorby imínovej väzby. Vďaka tomu bude v neskoršej fázy možné gridy nielen funkcionalizovať, ale aj spojovať do väčších štruktúr a tak zvýšiť šancu na praktické uplatnenie našich derivátov.

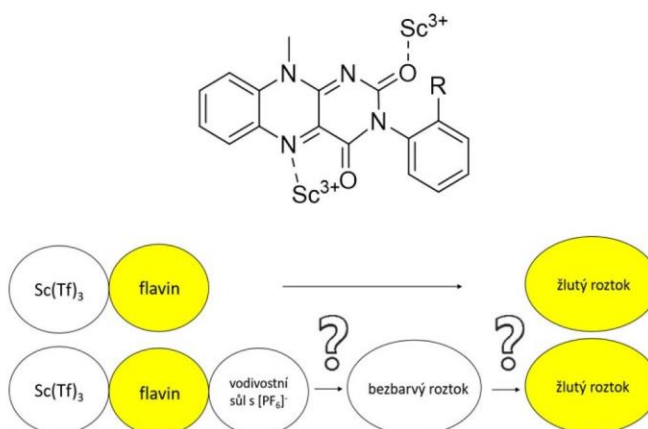


Pozorování neobvyklého chování isoalloxazinů v přítomnosti skanditých iontů.

Václav Špička (B2)

Školitel: Ing. Hana Kotoučová, Ph.D.

Chování isoalloxazinů v přítomnosti skanditých iontů. Isoalloxazinový sklet je základem přírodních látek zvaných flaviny, které se vyskytují například jako kofaktory některých enzymů. Tyto látky mají ve své molekule konguovaný elektronový systém, který je příčinou jejich charakteristického žlutého zabarvení. Zároveň tento systém zajišťuje jejich redoxní aktivitu. Přírodní i synteticky připravené isoalloxaziny mohou vystupovat při interakci s přechodnými kovy jako ligandy. Zajímavou je interakce těchto látek se skanditými ionty, které mohou s molekulou isoalloxazinu interagovat ve dvou místech. Buď prostřednictvím atomu kyslíku v poloze 4 a atomu dusíku v poloze 5 nebo může vzhledem ke svému tvrdému Lewisovsky kyselému charakteru skanditý kation interagovat pouze s kyslíkem v poloze 2. Interakce mezi skanditými ionty a ligandem byla sledována pro sérii N3-aryl-isoalloxazinů (viz obázek). Zajímavým pozorovaným jevem bylo zcela neočekávané vratné odbarvení roztoku flavinu a skandité soli po přidání vodivostní soli s hexafluoridofosfátovým aniontem.

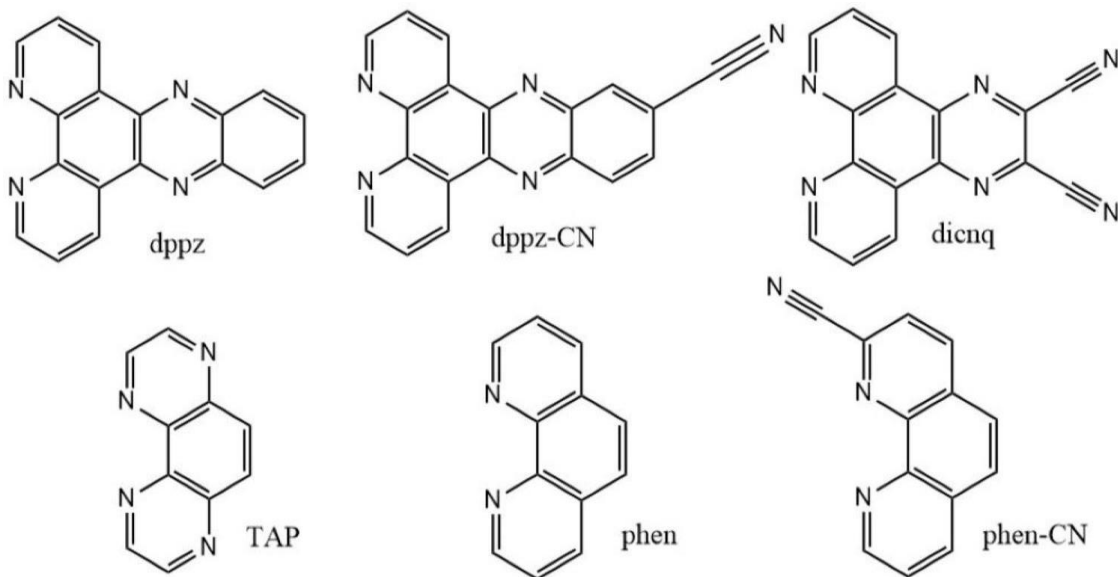


Polypyridylové komplexy ruthenia pro interkalaci DNA

Bára Parschová (B3)

Školitel: Ing. Martin Pižl, Ph.D.

V posledních letech jsou častým předmětem studia ruthenaté polypyridylové komplexy pro jejich rozsáhlé fotofyzikální a redoxní vlastnosti a také pro jejich potenciál (foto)oxidovat DNA. Zejména dipyrido[3,2-a:2',3'-c]fenanzin (dppz) se ukázal jako vhodný polypyridylový ligand pro interakci s DNA. Interkalací do DNA dochází k výraznému zvýšení luminiscence u komplexů obsahujících dppz ligand. Většina studií se následně zaměřuje na modifikaci koordinační sféry Ru(II) komplexů pro dosažení vyšší afinity k duplexu DNA a pro změnu rozložení HOMO a LUMO, což vede k úpravě redoxního chování tak, aby bylo možné použít tyto komplexy k oxidaci DNA. Moje práce se věnuje syntéze polypyridylových ligandů (viz obrázek) - dipyrido[3,2-a:2',3'-c]fenanzinu (dppz), 1,4,5,8-tetraazafenanthrenu (TAP), 2-kyano-1,10-fenantrolinu (phen-CN), 11-kyano-dipyrido[3,2-a:2'3'-c]fenanzinu (dppz-CN), 6,7-dikyanodipyrido[2,2-d:2'3'-f]quinoxalinu (dicnq). Dále se věnuje heteroleptickým komplexům s obecným vzorcem $[Ru(L1)_2(L2)]^{2+}$, kde L1 může být TAP, phen či phen-CN a L2 může být dppz, dppz-CN nebo dicnq. Momentálně se snažím připravit první komplexy z této série, konkrétně $[Ru(phen)_2dppz]^{2+}$ a $[Ru(phen)_2dppz-CN]^{2+}$.



Syntéza a charakterizace M(II) komplexů obsahujících tetradentátní ligandy odvozené od vitaminu B6

Tereza Jilečková (B3)

Školitel: Ing. Martin Pižl, Ph.D.

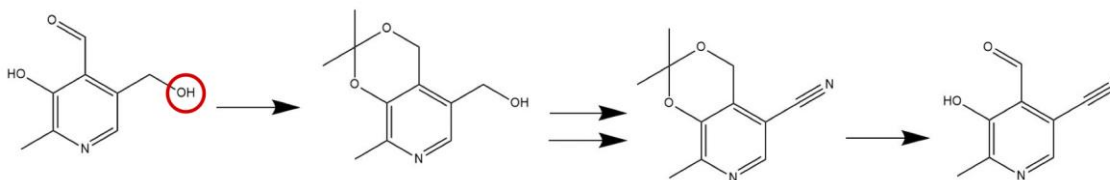
Vitamin B6 je označení pro soubor tří příbuzných pyrimidinových derivátů lišící se v poloze 4, kde může být $-\text{CH}_2\text{-OH}$ (pyridoxin, PN), $-\text{CHO}$ (pyridoxal – PL) či $-\text{CH}_2\text{NH}_2$ (pyridoxamin, PM), a jejich 5-fosfátových analogů (např. pyridoxal-5-fosfát, PLP). Keto deriváty (PL a PLP) reagují s primárními aminy za vzniku Schiffových bází (SB), neboli iminů. SB se používají v organické syntéze, a mají také potenciál v terapii různých onemocnění. Díky volnému elektronovému páru na dusíku, se iminy mohou vázat na většinu kovových iontů. Například měďnaté a manganaté komplexy vykazují protinádorové účinky, zinečnaté a kobaltnaté komplexy mají antibakteriální účinky. U Zn(II) komplexů pak byla zjištěna selektivní fluorescenční detekce ADP a ATP ve vodných roztocích. Cílem této práce je studium Co(II) , Ni(II) a Cu(II) komplexů obsahujících tetradentátní ligandy, které jsou syntetizovány kondenzací pyridoxalu či pyridoxal-5-fosfátu s ethylendiaminem ($-\text{PL}_2\text{en}$ a PLP_2en) nebo *o*-phenyldiaminem (PL_2op a PLP_2op). Srovnáním spektroskopických vlastností ligandů a jejich příslušných komplexů lze identifikovat a potvrdit donorové atomy ligandu a navrhnout struktury koordinačních sloučenin. To bude demonstrováno na příkladu Co(II) a Ni(II) komplexů obsahujících PL_2en a PLP_2en .

Syntéza kobaltnatých komplexů odvozených od pyridoxalu

Pavlína Malečková (B3)

Školitel: Ing. Martin Pižl, Ph.D.

Pyridoxal (PL) je jednou ze tří forem vitamínu B6. Aktivní formou vit. B6 je pyridoxal-5'-fosfát (PLP), který je koenzymem při metabolismu aminokyselin. PLP na sebe reverzibilně váže aminokyselinu, čímž vzniká Schiffova báze (imin). Schiffova báze obecně vzniká reakcí aminů se sloučeninou obsahující karbonylovou skupinu. Kobaltnaté komplexy s těmito ligandy jsou často předmětem studia pro své magnetické vlastnosti. Tato práce se zabývá syntézou kobaltnatých komplexů odvozených od pyridoxalu a jeho derivátů připravených substitucí OH skupiny v poloze 5 (červené kolečko na obrázku). Zvolili jsme tyto substituenty - fosfát (PLP), nitril (PL-CN) a *O*-tercbutyl (PL-OtBut). Z těchto variant substituovaného pyridoxalu lze následně připravit Schiffovy báze, které vzniknou reakcí s vybranými aminokyselinami – alaninem (Ala) a tyrosinem (Tyr). Z těchto ligandů a vhodné kobaltnaté soli mohou být poté připraveny příslušné komplexy. Prozatím byly úspěšně syntetizovány tyto ligandy – PL-Ala, PLP-Ala, PL-Tyr, PLP-Tyr. Syntéza modifikovaných variant PL (PL-CN a PL-OtBut) v současné době teprve probíhá. Dále byly syntetizovány a charakterizovány kobaltnaté komplexy s ligandy PLP-Ala a PL-Ala.



Selenové kompozity pro farmakologické využití

Bc. Anastasiia Korzhova (M1)

Školitel: Ing. Vilém Bartůněk, Ph.D.

V této práci jsou zkoumány nanočástice amorfního selenu pro jejich možné antimikrobiální účinky. Připravené nanočástice selenu byly charakterizovány pomocí vybraných analytických metod jako je Ramanova spektroskopie nebo rentgenová prášková difrakce. Antibakteriální vlastnosti selenových nanočástic byly zkoumány pomocí metody nejmenší inhibiční koncentrace. Následně byla vyzkoušena formulace lékové formy ve formě masti. Součástí práce je i důkladná patentová rešerše.

Ekologicky udržitelné kompozity na bázi reaktivního oxidu hořečnatého

Bc. Ivana Faltysová (M1)

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

Tématem této práce je příprava a charakterizace pojiv na bázi oxidu hořečnatého šetrných k životnímu prostředí. Nejdříve byly připraveny referenční vzorky obsahující čistou fázi 5 Sorelova cementu. Následně byly připraveny kompozitní materiály s různým obsahem grafenu, oxidu grafenu a uhlíkových nanotubic, ve kterých byla využita fáze 5 jako matrice. Bylo zjištěno, že grafen výrazně zvýšil pevnost materiálu v tlaku, oxid grafenu měl pozitivní vliv na Youngův modul pružnosti a pevnost v ohybu, a díky přidavku uhlíkových nanotubic vzrostla odolnost materiálu vůči vodě. Následně byly vyrobeny lehčené kompozity na bázi MOC. Jako plnivo bylo použito pěnové sklo, které plně nahradilo běžně užívaný křemenný písek. Dále byl využit elektrářenský popílek jako náhrada skelného plniva v množství 5, 10, a 15 hm. %. Všechny připravené materiály byly analyzovány rentgenovou difrakční analýzou, skenovací elektronovou mikroskopií, energiově disperzní spektroskopií, laserovou difrakcí, optickou mikroskopií a simultánní termickou analýzou. Na závěr byly testovány mechanické vlastnosti. Připravené materiály vykazovaly dostatečnou mechanickou odolnost a vynikající tepelně-izolační vlastnosti, díky čemuž by mohly být využívány jako alternativa Portlandského cementu šetrná k životnímu prostředí.

S2 Ústav anorganické chemie

MÍSTO: LABORATOŘ D2

KOMISE

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

Ing. Hana Kotoučová, Ph.D.

Ing. Vlastimil Mazánek, Ph.D.

Ing. Vilém Bartůněk, Ph.D.

Ing. Tomáš Hlásek, Ph.D.

Ing. Jindřich Vítek

PROGRAM

09:30 **zahájení**

09:30 [Jiří Prikner](#) (B2, doc. Ing. Kateřina Rubešová, Ph.D.)

Keramické preformy yttriem stabilizovaného HfO₂ pro rekrystalizaci pomocí OFZ

09:45 [Oskar Chmel](#) (B3, doc. Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.)

Syntéza pinningových fází GdBCO-2411-M

10:00 [Tomáš Chvojka](#) (B3, doc. Ing. Kateřina Rubešová, Ph.D.)

Příprava tenkých vrstev Ce:GGAG pro optické aplikace

10:15 [Adam Fiedler](#) (B3, doc. Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.)

Příprava a charakterizace ReBCO supravodičů

11:15 [Matyáš Jandík](#) (B3, Ing. Vít Jakeš, Ph.D.)

Příprava denzní aluminátové keramiky pomocí SPS

11:30 [Petr Kupka](#) (B3, Ing. Jan Luxa, Ph.D.)

Příprava MAX fáze Mo₂TiAlC₂ a MXenu Mo₂TiC₂ pro katalytický vývoj vodíku

11:45 [Julie Slámová](#) (B3, doc. Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.)

Příprava a vlastnosti kodopovaných kompozitních materiálů na bázi reaktivního oxidu hořečnatého

12:00 [Antonín Ďurana](#) (B3, Ing. Tomáš Hartman, Ph.D.)

Funkcionalizace germananů organickými činidly a jejich využití pro lithium-iontové akumulátory

12:15 [Tomáš Vrba](#) (B3, doc. Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.)

Environmentální aplikace oxidu grafenu

Keramické preformy yttriem stabilizovaného HfO₂ pro rekrytalizaci pomocí OFZ

Jiří Prikner (B2)

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

Oxid hafničitý je podobně jako oxid zirkoničitý aplikovatelný v mnoha oblastech. Zejména po stabilizaci kubické struktury se jejich použití ještě rozšiřuje. Hafnium jako těžký prvek je navíc vhodný pro detekci vysokoenergetického záření. Pro tyto účely se většinou používá právě ve formě oxidů. Oxid hafničitý má monoklinickou strukturu a vysokou teplotu tání, což ztěžuje jeho přípravu ve formě monokrystalů. Předmětem naší práce je stabilizovat kubickou krystalovou mřížku HfO₂ dopováním Y₂O₃. Jelikož se nutné množství použitého yttria mění v závislosti na použité metodě přípravy, byly připraveny vzorky s různým zastoupením Y₂O₃. Část vzorků jsme se též rozhodli dopovat Ce³⁺, který je využitelný při detekci vysokoenergetického záření (má rychlý dosvit luminiscence ve viditelné části spektra). Byly připraveny vzorky ve formě polykrystalických preforem reakcí v pevné fázi několikanásobným žíháním. Byla sledována krystalová struktura v závislosti na obsahu yttria a také mikrostruktura pomocí SEM. V současnosti jsou vzorky zkoumány pomocí luminiscenčních měření. Tyto keramické preformy budou použity pro výrobu monokrystalů pomocí metody OFZ.

Syntéza pinningových fází GdBCO-2411-M

Oskar Chmel (B3)

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

Supravodiče jsou materiály s velkým potencionálním využitím kvůli jejich unikátním vlastnostem, jako je levitační síla a schopnost zachycení magnetického pole. Tyto vlastnosti lze zlepšit pomocí přidání pinningové (nesupravodivé) fáze do supravodivého krystalu. Selektce vhodné pinningové fáze je jeden z klíčových faktorů při přípravě supravodivých krystalů. Cílem práce je příprava pinningových fází Gd-2411-M ($\text{Gd}_2\text{Ba}_4\text{CMO}_x$, kde $M = \text{Sm, Cr, W, V}$) pomocí reakce v pevné fázi. Tyto fáze budou poté charakterizovány a použity pro přípravu supravodivých krystalů GdBCO. Klíčové supravodivé vlastnosti budou poté studovány a porovnány s referenčním GdBCO krystalem.

Příprava tenkých vrstev Ce:GGAG pro optické aplikace

Tomáš Chvojka (B3)

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

Granáty jsou oxidové materiály, které lze popsat vzorcem $A_3B_2C_3O_{12}$, kde A jsou kationty s osmi-, B šesti- a C čtyřčetnou koordinací. Vlastnosti granátových materiálů je předurčují k využití v optice. Jsou navíc vhodnou maticí pro řadu dopantů, vytvářejíc tak perspektivní materiály (Nd:YAG lasery, Pr:LuAG fotodiody). Gadolinito-hlinito-gallitý granát dopovaný cerem (Ce:GGAG) patří k nejvyspělejšími scintilátorům. Jeho objemové monokrystaly jsou komerčně vyráběny Czochralského metodou. Růst monokrystalů ovšem provází řada úskalí. Řešením může být příprava Ce:GGAG ve formě tenkých vrstev. Tyto se řadí mezi 2D nanomateriály, jejich vlastnosti jsou tedy funkcí jejich rozměrů. Po nanesení na vhodný substrát vzniká kompozit, jehož chování lze ovlivnit tloušťkou nanášené vrstvy. Tato práce se zabývá přípravou tenkých vrstev GGAG o různé míře dopování cerem s případným kodopováním hořčíkem metodou sol-gel. Realizovaná složení Ce:GGAG by byla jen velice obtížně připravená technologiemi růstu monokrystalů, připravené látky tedy umožňují studovat tento materiál v širším intervalu složení. Fázová čistota vzorků byla sledována rentgenovou difrakcí. Momentálně probíhá studium luminiscence připravených materiálů pro identifikaci optimálního složení a pro určení trendů v jejich optickém chování.

Příprava a charakterizace ReBCO supravodičů

Adam Fiedler (B3)

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

Vysokoteplotní supravodivé materiály na bázi směsných oxidů mědi se nejčastěji připravují postupem opakované kalcinace výchozích surovin. Ve formě krystalů se následně připraví z prekurzorového prášku metodou infiltračního růstu TSIG (top-seeded infiltration growth) či růstu z taveniny TSMG (top-seeded melt growth). Základními rozdíly mezi těmito postupy je nejen časová náročnost, ale i fázové a chemické složení, které úzce souvisí s materiálovými vlastnostmi. Nejdříve byly připraveny referenční vzorky vysokoteplotních supravodivých materiálů na bázi směsných oxidů mědi YBCO, EuBCO a GdBCO. S těmito vzorky budou následně srovnány materiály připravené metodou TSIG. Připravené vzorky budou studovány pomocí rentgenové difrakce (XRD), rentgenové fluorescence (XRF), laserové difrakce (LD), elektronově disperzního spektrometru (EDS) a skenovacího elektronového mikroskopu (SEM). Výsledky výzkumu by měly přispět k optimalizaci přípravy vysokoteplotních supravodičů a zvýšení dostupnosti těchto materiálů pro komerční využití.

Příprava denzní aluminátové keramiky pomocí SPS

Matyáš Jandík (B3)

Školitel: Ing. Vít Jakeš, Ph.D.

Denzní keramika představuje novou generaci optických materiálů; při dostatečně kvalitní mikrostruktuře u ní lze dosáhnout translucence až transparentnosti pro viditelné záření. Ke slinování takového materiálu je možné použít proces Spark plasma sintering (SPS), pro nějž jsou nejvhodnější fáze s kubickou strukturou. Transparentní denzní keramika pak může posloužit jako matrice pro dopování různými ionty a v budoucnu by mohla najít uplatnění např. jako aktivní materiál pevnolátkových laserů a scintilátorů. Její výhoda oproti pěstování monokrystalů spočívá v jednodušší přípravě a modifikaci vstupních surovin. Mezi nadějně materiály pro průmyslově využívanou denzní keramiku patří i LiAl_5O_8 , který lze připravit z LiAc a $\text{Al}(\text{NO}_3)_3$ metodou sol-gel, ko-precipitací či reakčním slinováním. Cílem této práce je příprava a charakterizace nedopovaných keramických tablet fáze LiAl_5O_8 metodou SPS a optimalizace procesu přípravy pro dosažení nejlepších možných výsledků, tj. co nejvyšší transmitance a zamezení praskání tablet.

Příprava MAX fáze $\text{Mo}_2\text{TiAlC}_2$ a MXenu Mo_2TiC_2 pro katalytický vývoj vodíku

Petr Kupka (B3)

Školitel: Ing. Jan Luxa, Ph.D.

Příprava MAX fáze $\text{Mo}_2\text{TiAlC}_2$ a MXenu Mo_2TiC_2 pro katalytický vývoj vodíku MAX fáze jsou vrstevnaté krystalické materiály obsahující vrstvy karbidů nebo nitridů přechodných kovů ze začátku d bloku spojených atomy kovů z p bloku. Obecnou strukturu MAX fází lze vyjádřit $\text{M}_{n+1}\text{AX}_n$. M představuje přechodný kov ze skupiny 4 až 6. A zastupuje p kov a X je uhlík nebo dusík. MXeny jsou 2D materiály vzniklé exfoliací jednotlivých M_{n+1}X vrstev odstraněním atomů p kovu pomocí selektivního leptání. Vývoj vodíku (HER) v kyselém prostředí je reakce probíhající na katodě při elektrolýze vody. $2\text{H}^+ + 2\text{e}^- \leftrightarrow \text{H}_2$ Tato práce se zabývá přípravou MAX fáze $\text{Mo}_2\text{TiAlC}_2$ z prvků, karbidů prvků a hydridů prvků za různých teplot a následným zpracováním na MXene. $\text{Mo}_2\text{TiAlC}_2$ bylo připraveno ve stechiometrickém poměru Mo:Ti:Al:C 2:1:1.1:2. Výpal probíhal při teplotách 1500, 1550 a 1600 °C v bezkyslíkové atmosféře. Exfoliace byla provedena pomocí kyseliny fluorovodíkové. Fázové složení bylo určeno pomocí rentgenové difraktometrie a elektronové mikroskopie. Přepětí a proudová hustota byly změřeny nanesením připravených vzorků na elektrodu ze skleněného uhlíku. Bylo zjištěno, že po exfoliaci je materiál pro HER vhodnější. Nejpriznivější výsledky byly zaznamenány u vzorků vypálených na 1550 °C.

Příprava a vlastnosti kodopovaných kompozitních materiálů na bázi reaktivního oxidu hořečnatého

Julie Slámová (B3)

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

Cílem této práce byla příprava a analýza kompozitních materiálů pro náhradu Portlandského cementu. Byl zkoumán vliv 1D a 2D uhlíkových nanomateriálů na hořečnatý cement MOC (magnesium oxychloride cement). Pro přípravu byl použit kaustický MgO, $MgCl_2$, voda a grafen, oxid grafenu, uhlíkové nanotrubičky, a oxidované uhlíkové nanotrubičky. Po 28 dnech byly vzorky analyzovány rentgenovou difrakční analýzou, skenovací a transmisní elektronovou mikroskopií, energiově disperzní spektroskopií a optickou mikroskopií. Dále byla testována jejich pevnost v ohybu a v tlaku, Youngův modul pružnosti a odolnost vůči vodě. Nejdříve byly připraveny vzorky obsahující jednotlivé typy nanoaditiv. Každý nanomateriál ovlivnil konkrétní vlastnost v závislosti na svém charakteru. Grafen zvýšil pevnost v tlaku, oxid grafenu zvýšil pevnost v ohybu a uhlíkové nanotrubičky zvýšily odolnost vůči vodě. Dále byly připraveny vzorky kodopovaných materiálů, ve kterých byly využity 1D a 2D nanomateriály společně. Jejich kombinovaný efekt pomohl vylepšit více materiálových vlastností najednou. Na závěr byl proveden experiment s využitím taninu v kodopovaných kompozitech jako surfaktantu. Tyto vzorky vykazovaly 21,8% zlepšení v pevnosti v tlaku, 9,7% zlepšení v pevnosti v ohybu a 59,3% zlepšení v odolnosti vůči vodě.

Funkcionalizace germananů organickými činidly a jejich využití pro lithium-iontové akumulátory

Antonín Ďurana (B3)

Školitel: Ing. Tomáš Hartman, Ph.D.

Germanan patří mezi 2D materiály 14. skupiny a je analogický grafanu. Jedná se o perspektivní materiály pro použití v oblasti elektroniky, katalýzy, optiky a řadě dalších odvětvích. Jednou z mnoha výhod je široká škála možných modifikací vedoucí k dalšímu zlepšování jejich unikátních vlastností. První část této práce spočívala v syntéze CaGe_2 a jeho následné chemické exfoliaci za vzniku germananu (GeH). V dalším kroku byla modifikována Ge-H vazba bromoalkoholy $\text{Br}-(\text{CH}_2)_n\text{-OH}$ ($n = 2-7$) za vzniku hydroxypropylgermananů, které byly analyticky charakterizovány. Stěžejní část práce spočívala v přípravě anodických materiálů z modifikovaných germananů a jejich následné testování v Li-ion akumulátorech.

Environmentální aplikace oxidu grafenu

Tomáš Vrba (B3)

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

Na základě svých unikátních optických, tepelných a adsorpčních vlastností nachází oxidy grafenu (GO) využití v mnoha odvětvích, mezi které patří například stavebnictví, lékařství nebo ochrana přírody. Tato práce se zabývá schopností GO vázat kationty těžkých kovů, které jsou, pro své toxické účinky, ve vodě nežádoucí. Suspenze GO byla připravena Tourou metodou. Část GO byla vysušena, a následně charakterizována pomocí rentgenové difrakční analýzy, rentgenové fluorescence, simultánní termické analýzy a Ramanovy spektroskopie. Zbývající suspenze GO byla následně využita pro povlakování keramických filtrů z Al_2O_3 nebo z ytrem stabilizované zirkonie (YSZ). Pro povlakování filtrů byly využity dvě různé metody. Prvním postupem byl dip-coating, při němž byl filtr ponořen do suspenze GO, a následně vysušen. Druhou metodou je jeho upravená verze, při níž jsou keramické matrice nejprve ponořeny do roztoku ethanolu s (3-Glycidyloxypropyl)trimethoxysilanem (GLYMO) za zvýšené teploty, a následně povlakovány suspenzí GO. Podle dosavadních publikovaných studií se předpokládá, že GLYMO bude mít pozitivní účinek na vazbu GO na matrici. Pokračováním tohoto experimentu bude zkoumání adsorpčních schopností GO ve vodných roztocích obsahujících ionty těžkých kovů.

S3 Ústav anorganické chemie

MÍSTO: MÍSTNOST A211

KOMISE

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

Ing. Martin Pižl, Ph.D.

Ing. Jan Luxa, Ph.D.

Ing. Jan Holub, Ph.D.

Ing. Šárka Lipnická, Ph.D.

Ing. Tomáš Štícha

PROGRAM

09:30 **zahájení**

09:30 [Bc. Oldřich Cicvárek](#) (M1, Ing. Vlastimil Mazánek, Ph.D.)

Exfoliace a aplikace ternárních chalkogenidů thalia

09:45 [Bc. Karin Paurová](#) (M1, Mgr. Maksym Buryi, Ph.D.)

Zvláštnosti zachytu nábojů v krystalických a amorfních komplexních oxidech kovů

10:00 [Bc. Jan Sklenka](#) (M1, doc. Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.)

Optimalizace a scale-up procesu recyklace REBCO materiálů

10:15 [Bc. Vojtěch Svoboda](#) (M1, Ing. Tomáš Hartman, Ph.D.)

Příprava a charakterizace komplexů germananů s ionty přechodných kovů

11:15 [Bc. Dominik Chmelař](#) (M2, Ing. Vlastimil Mazánek, Ph.D.)

Elektrochemická exfoliace vrstevnatých materiálů

11:30 [Bc. Fedor Lipilin](#) (M2, Ing. Jan Luxa, Ph.D.)

Novel dielectrics for field effect transistors based on 2d materials

11:45 [B.Sc Rahul Singh](#) (M2, doc. Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.)

Selection and synthesis of pinning phases for the growth of high-temperature EuBCO superconductors.

12:00 [Bc. Jakub Volf](#) (M2, doc. Ing. Pavla Nekvindová, Ph.D.)

Vliv optické bazicity borito-křemičitanových skel na luminiscenční vlastnosti iontů Ce a Mn

12:15 [Bc. Petra Šnobllová](#) (M2, Ing. Vilém Bartůněk, Ph.D.)

Sorpční vlastnosti hydrolyzátů a precipitátů ceru a titanu

Exfoliace a aplikace ternárních chalkogenidů thalia

Bc. Oldřich Cicvárek (M1)

Školitel: Ing. Vlastimil Mazánek, Ph.D.

Po objevení grafenu v roce 2004 přišel rozmach ve výzkumu vrstevnatých materiálů. Strukturně se jedná o jednotlivé vrstvy propojené van der Waalsovými interakcemi. V rámci jedné vrstvy jsou atomy spojeny mnohem silnější kovalentní vazbou. Toto může vést k velké anizotropii vlastností, jako je například šíře zakázaného pásu či elektrochemické vlastnosti. Materiály mohou najít uplatnění v elektrochemickém průmyslu, jde například o elektrokatalyzátory pro vývoj vodíku, kyslíku nebo redukci dusíku. Mohou nabízet alternativu k drahým kovům. Jedná se však o málo probádané materiály, což je ale hnací silou dalších výzkumů. Tato práce se zabývá exfoliací a aplikací ternárních chalkogenidů thalia se sumárním vzorcem $TMCh_2$ ($M = Ga/In$, $Ch = S/Se/Te$). Materiály byly exfoliovány ultrazvukem a pomocí střižných sil. Velikost exfoliovaných částic byla zjištěna pomocí metod dynamického rozptylu světla (DLS) a mikroskopie atomárních sil (AFM). Dále byly strukturní vlastnosti zkoumány mimo jiné Ramanovou spektroskopií a rentgenovou práškovou difrakcí (XRD). Zkoumání elektrochemických vlastností těchto materiálů bylo zaměřeno na jejich inherentní elektrochemickou stabilitu a heterogenní přenos elektronů, pak na katalýzu pro redukci vodíku a kyslíku, a fotokatalýzu.

Zvláštnosti záchytu nábojů v krystalických a amorfních komplexních oxidech kovů

Bc. Karin Paurová (M1)

Školitel: Mgr. Maksym Buryi, Ph.D.

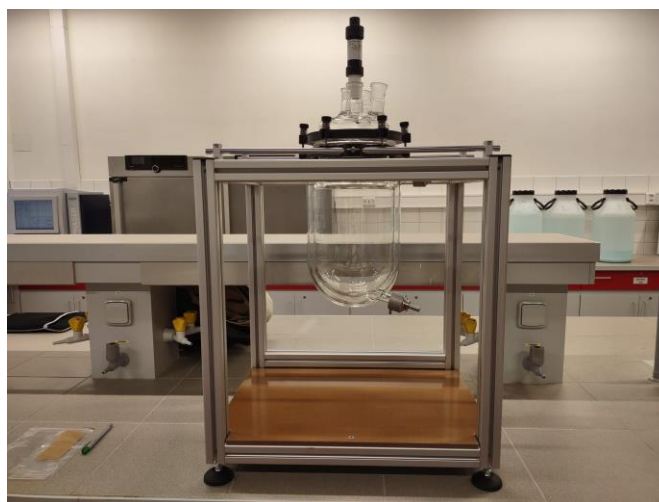
Vlastnosti optických materiálů ovlivňují vedle složení matrice materiálu a opticky aktivních dopantů také defekty struktury, které mohou snižovat optický výkon. Mezi aplikace, kde je důležité nesnižovat výkon optických členů ztrátami na defektech, patří laserová technika a fotonika. V těchto oblastech se využívají např. europiem dopovaný yttrito-hlinitý granát (YAG) a telluritová skla. Dopovaný YAG je atraktivním materiálem v oblastech, kde se využívá luminiscence. YAG:Eu³⁺ je znám emisí červeného světla, ale nedávno byla pozorována i účinná a stabilní fotoluminiscence Eu²⁺. Telluritová skla se vyznačují dobrou tepelnou a mechanickou stabilitou a vysokou chemickou odolností. Velkou výhodou přináší možnost optimalizace jejich vlastností díky širokému rozsahu sklotvorby mezi binárními a ternárními skly. Kombinací těchto materiálů lze potenciálně dosáhnout produkce levné sklokeramiky s vysokým světelným výtěžkem. Cílem práce bylo porozumět faktorům ovlivňujícím optický výkon zmíněných materiálů. Bylo použito elektronové paramagnetické rezonance v korelaci s termálně stimulovanou luminiscencí a radioluminiscencí. Studována byla tvorba defektů v YAG:Eu a ve skle o složení TeO₂-BaO-ZnO. Byly odhaleny nabitě kyslíkové vakance a defekty typu O⁻, které byly charakterizovány.

Optimalizace a scale-up procesu recyklace REBCO materiálů

Bc. Jan Sklenka (M1)

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

Supravodivé materiály můžeme ve dnešním světě aplikovat v řadě oblastí. Jejich unikátních vlastností lze využít například ve vysokorychlostní dopravě, či při konstrukci vysokootáčkových ložisek nebo silných zdrojů magnetického pole. Keramické systémy REBCO (směsné oxidy vzácného kovu, barya a mědi; kde RE = Y, Eu, Gd...) patří do skupiny vysokoteplotních supravodičů. Kvůli náročnosti procesu výroby těchto materiálů vzniká při jejich produkci množství defektních kusů. Z důvodu významného rozšiřování jejich výroby a vysoké ceny těchto materiálů je třeba najít řešení, které umožní recyklaci REBCO materiálů v průmyslovém měřítku. V této práci byla vyvinuta univerzální metoda, která umožňuje REBCO materiály recyklovat. Cílem této práce bylo optimalizovat proces recyklace REBCO materiálů, zvýšit kapacitu tohoto procesu, využít produkty recyklace pro výrobu druhé generace REBCO disků a prozkoumat možnosti recyklace stříbra, které se přidává do GdBCO a EuBCO. Scale-up byl otestován v novém 5 l reaktoru, optimalizací byla snížena spotřeba chemikálií o 20 % oproti předchozím pokusům. Stříbro bylo selektivně vysráženo ve formě AgCl. Tato práce potvrzuje univerzalitu vyvinutého procesu recyklace REBCO materiálů a její závěry jsou stěžejní pro budoucí průmyslové aplikace této metody recyklace.



Příprava a charakterizace komplexů germananů s ionty přechodných kovů

Bc. Vojtěch Svoboda (M1)

Školitel: Ing. Tomáš Hartman, Ph.D.

Monoelementární vrstevnaté materiály za grafenem se dostávají do popředí zájmu díky snadnější modifikaci, která může výrazně ovlivnit jejich vlastnosti, např. katalytické vlastnosti nebo šířku zakázaného pásu. Tato práce je zaměřena na přípravu germananů s alkylovou skupinou zakončenou OH, COOR a CN skupinou. U těchto materiálů byla dále testována jejich schopnost tvorby komplexů s ionty přechodných kovů, které by v budoucnu mohly sloužit jako katalyzátory reakcí nebo součásti baterií. Nedílnou součástí této práce je charakterizace připravených látek pomocí infračervené a Ramanovy spektroskopie a dalších metod.

Elektrochemická exfoliace vrstevnatých materiálů

Bc. Dominik Chmelař (M2)

Školitel: Ing. Vlastimil Mazánek, Ph.D.

Vrstevnaté materiály se mohou vykazovat unikátními fyzikálními, tepelnými a chemickými vlastnostmi, díky nimž mohou najít uplatnění v různých aplikacích jako jsou senzory, baterie, solární články či tranzistory. Exfoliace těchto vrstevnatých materiálů vede ke změně jejich vlastností, např. zvýšení měrného povrchu, změna zakázaného pásu, vodivosti nebo magnetických vlastností. Exfoliace se nejčastěji dělá pomocí chemických a mechanických metod. Chemické metody většinou využívají interkalace alkalických kovů, které vyžadují inertní atmosféru. U mechanickým metod často dochází ke strukturním defektům. Z těchto důvodů je vhodné hledat metody, které jsou efektivnější, šetrnější a také bezpečnější. Elektrochemická exfoliace představuje jednoduchou a levnou metodou, která nevyžaduje použití nebezpečných látek pro přípravu exfoliovaného materiálu. Předmětem této práce je studium mechanismu elektrochemické interkalace a vliv různých parametrů, jako je např. typ rozpouštědla, interkalovaného ionty, aplikovaného napětí na vlastnosti exfoliovaného materiálu.

Novel dielectrics for field effect transistors based on 2d materials

Bc. Fedor Lipilin (M2)

Školitel: Ing. Jan Luxa, Ph.D.

Nowadays transistors are present in almost in all electronic devices. This provides stable processes, high working speed and lower power consumption. For its future improvements, various enhancements are required, including shift in basic materials. In this work, novel dielectric materials based on Lanthanum oxide-bromide was synthesized for use in field effect transistors (FET) based on 2D materials. This material was predicted by density functional theory to possess high- κ values and layered structure, which allows it to be stacked with 2D channel materials. Using a mechanical exfoliation we prepared thin layers of hBN and LaOBr and placed them on top of gold electrodes and used them as top gates to control the channel based on multilayered graphene. Final contacting was achieved by electron beam lithography. The stack was characterized by atomic force microscopy, optical microscopy and the device was characterized in terms of its electronic properties. Our results show that the LaOBr exhibits better properties compared to the hBN, which could potentially play a crucial role in new generation of dielectric materials in FETs.

Selection and synthesis of pinning phases for the growth of high-temperature EuBCO superconductors.

B.Sc Rahul Singh (M2)

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

High temperature superconductors caught wide attention among researchers, not only as the materials having transition temperatures as high as 135 K but also for its unique transport properties and ability to trap magnetic field. Although EuBCO is a well known high temperature superconductor whose critical current density and trapped magnetic field can be significantly influenced by adding a pinning (non-superconducting) phase to the primary (superconducting) phase. In this work, we synthesized pinning phase, EuBCMO-2411 ($\text{Eu}_2\text{Ba}_4\text{CuMO}_x$ where, $M = \text{W, Ce, Zr and Mn}$) via conventional solid-state reaction. There-after, these obtained phases will be characterized and used to prepare the superconducting EuBCO crystals. Finally, the important superconducting properties of the synthesized materials will be determined and compared to a reference EuBCO crystal.

Vliv optické bazicity borito-křemičitanových skel na luminiscenční vlastnosti iontů Ce a Mn

Bc. Jakub Volf (M2)

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

Cílem práce je návrh a příprava skla s luminiscenčními vlastnostmi umožňujícími spektrální posun UV-VIS slunečního záření do červené oblasti za účelem podpory růstu jednobuněčných řas. V předchozím výzkumu byla zkoumána boritá nebo borito-křemičitanová skla kodopovaná ionty Ce^{3+} a Mn^{2+} za účelem nalezení kompromisu mezi luminiscenčními vlastnostmi a chemickou odolností skel. Jedním z klíčových parametrů, který ovlivňuje redoxní rovnováhu dopovaných iontů a výslednou luminiscenci, je optická bazicita (Λ). V systému skel $\text{Na}_2\text{O}-\text{MO}-\text{B}_2\text{O}_3-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{SiO}_2$ dopovaných Ce a Mn byl studován vliv koncentrace Mn a obsahu různých modifikátorů skelné sítě MgO, CaO a BaO na optickou bazicitu skel a luminiscenční vlastnosti. Optická bazicita (Λ) použitých matric byla počítána z příspěvků jednotlivých oxidů ve skle, následně byla porovnána s Λ získanou experimentálně přes Lorentz-Lorenzův vztah a Duffyho korelaci, s použitím indexu lomu a hustoty skla. Index lomu byl zjištěn m-line spektroskopií, hustota pyknometricky. Dále byla měřena absorpční spektra v UV-VIS oblasti; fluorescenční spektra byla změřena pro široké rozsahy excitačních a emisních vlnových délek, a následně přesněji pro vybrané vlnové délky. Byla diskutována závislost mezi složením, Λ a luminiscencí skel.

Sorpční vlastnosti hydrolyzátů a precipitátů ceru a titanu

Bc. Petra Šnoblová (M2)

Školitel: Ing. Vilém Bartůněk, Ph.D.

V této práci je věnována pozornost využití hydrolyzátů a precipitátů ceru a titanu pro účely odstranění vybraných enviromentálních polutantů z životního prostředí. Připravené nanočástice byly charakterizovány pomocí rentgenové difrakce. Jako polutanty byly vybrány zástupci ze třídy steroidních hormonů, antibiotik a pesticidů. Roztoky jednotlivých látek byly přidány k hydratovaným nanočásticím a následně bylo porovnáno UV spektrum kontrolního roztoku a suspenze s nanočásticemi. Dále bude zkoumána možná adsorpce nebo katalytický rozklad polutantů vlivem hydrolyzátů pomocí dalších metod.

Ústav anorganické technologie (105)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

doc. Ing. Miloslav Lhotka, Ph.D.

SEZNAM SEKČÍ

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

Ústav anorganické technologie I

MÍSTO: MÍSTNOST A032

KOMISE

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

Doc. Ing. Jaromír Hnát, Ph.D.

Ing. Šárka Paušová, Ph.D.

Ing. Martin Prokop, Ph.D.

Doc. Ing. Miloslav Lhotka, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Bc. Nela Adamová](#) (M2, doc. Ing. Martin Paidar, Ph.D.)

Optimalizace nosné elektrody na bázi Ni pro články s pevnými oxidy

09:15 [Bc. Olívia Čobejová](#) (M2, Ing. Martin Prokop, Ph.D.)

Vplyv anódového katalyzátoru na výkon PEM palivového článku

09:30 [Bc. Vojtěch Domín](#) (M2, Ing. Martin Prokop, Ph.D.)

Vliv H_3PO_3 na výkon vysokoteplotního PEM palivového článku

09:45 [Bc. Vojtěch Drobný](#) (M2, Ing. Martin Prokop, Ph.D.)

Stabilita mikroporézní vrstvy na anodě pro PEM elektrolýzu vody

10:00 [Bc. Tomáš Jedlička](#) (M1, Ing. Martin Prokop, Ph.D.)

Stabilita slitinových katalyzátorů na bázi Pt pro PEM palivové články

10:15 [Daniel Vojvoda](#) (B3, Ing. Jaromír Hnát, Ph.D.)

Návrh a charakterizace nové laboratorní cely pro alkalickou elektrolýzu vody

Optimalizace nosné elektrody na bázi Ni pro články s pevnými oxidy

Bc. Nela Adamová (M2)

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

Vodíkové technologie představují jeden z perspektivních směrů v energetické sféře. Jednu z vodíkových technologií reprezentují vysokoteplotní články s pevnými oxidy (SOC). SOC jsou schopné vratné přeměny energie. V případě elektrolytických článků dochází k přeměně elektrické energie na energii chemickou, naopak v režimu palivového článku dochází k opačné přeměně. Provozní teplota SOC se zpravidla pohybuje kolem 800 °C, což umožňuje rychlou kinetiku reakcí, na druhou stranu způsobuje vyšší nároky na použité materiály. Článek SOC se skládá z elektrolytu, vodíkové a kyslíkové elektrody. Elektrolyt nebo jedna z elektrod musí plnit funkci nosiče, aby byla zajištěna mechanická pevnost. Rozlišují se dva typy uspořádání článků, elektrodou nebo elektrolytem nesené články. Tato práce byla zaměřena na vyvinutí vodíkové elektrody pro elektrodou nesené články. Připravovaná elektroda musí splňovat vlastnosti mechanické pevnosti, elektronové vodivosti a dostatečné porozity. Elektrody byly připravovány z NiO-YSZ komerčního prášku s poměrem 50:50. Prášek byl smíchán s různými pojivy nebo byly elektrody připravovány z prášku smíchaného z NiO a YSZ prášku v různém poměru. Získané výsledky umožňují hlubší pochopení vlivu pojiva a zastoupení YSZ prášku na vlastnosti výsledné elektrody.

Vplyv anódového katalyzátoru na výkon PEM palivového článku

Bc. Olívia Čobejová (M2)

Školiteľ: Ing. Martin Prokop, Ph.D.

PEM palivové články tvoria základný pilier budúcnosti mobility. Ich dynamický vývoj sprevádza rada technologických i ekonomických otáznikov. Jednou z oblastí problematik je katalýza. Ako jediný vhodný kov sa javí čistá Pt. Surovinové rezervy a vysoká cena Pt nevyhovujú rozmerom trhu. Z toho dôvodu vzniká potreba znižovania množstva Pt nutného pre uspokojivý výkon. Katalyzátor sprostredkúva elektródové reakcie, čo vedie ku generácii energie. Mechanizmus oxidácie vodíka je naproti redukcii kyslíka jednoduchší a vykazuje rýchlejšiu kinetiku. Na základe toho vzniká v prípade anódy priestor pre znižovaniu navážky Pt a použitie zliatinových katalyzátorov. Experimentálny palivový článok bol testovaný pri pevnej navážke katalyzátora s obsahom 40% čistej Pt na katóde a tromi typmi anódového katalyzátora: z Pt s obsahom 40% čistej Pt, zo zliatiny Pt-Co 1:1 a zo zliatiny Pt-Ni 3:1. Navážka Pt v každom z anódových katalyzátorov predstavovala 50% množstva na katóde. Všetky katalytické vrstvy boli nanosené na membránu, zapojené do laboratórneho palivového článku a následne charakterizované z hľadiska chovania pri dlhodobej prevádzke a dosiahnutých výkonových maxím. Behom prevádzky článku bol pozorovaný pokles výkonu v čase. Najsľubnejšie výsledky boli dosiahnuté v prípade Pt-Ni katalyzátora.

Vliv H_3PO_3 na výkon vysokoteplotního PEM palivového článku

Bc. Vojtěch Domín (M2)

Školitel: Ing. Martin Prokop, Ph.D.

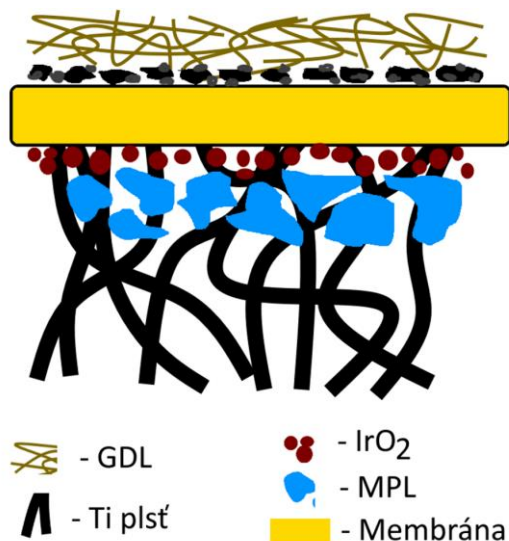
Vysokoteplotní vodíkové palivové články, využívající Pt katalyzátor na elektrodách a membránu na bázi polymeru dopovaného H_3PO_4 , jsou perspektivní zdroje energie pro stacionární aplikace. Mezi jejich výhody patří větší odolnost vůči nečistotám ve vodíku či možnost rekuperace tepla, jejich rozšíření ale brání degradace komponent. To se týká i membrány, kde je dopant, H_3PO_4 , redukován na H_3PO_3 , jejíž dopad na výkon palivových článků je jedním ze zkoumaných degradačních procesů. Cílem této práce bylo stanovit vliv této kyseliny na článek s elektrodami s komerčním platinovým katalyzátorem. V jejím rámci byly naměřeny zátěžové křivky, elektrochemická impedanční spektra a elektrochemicky aktivní povrchy určené pomocí U-I křivek, a to pro palivový článek bez přídavku H_3PO_3 , s přídavkem na anodu, na katodu a na obě elektrody. Bylo prokázáno, že H_3PO_3 má významný vliv na funkci palivového článku. Přídavek H_3PO_3 vedl ke zvýšení vodivosti membrány, a tím snížení ohmického odporu článku, zároveň ovlivnil elektrochemicky aktivní povrch. Po přídavku na anodu pak došlo ke zhoršení přístupnosti plynu k reakční oblasti a docházelo dříve k dosažení limitace reakce transportem hmoty.

Stabilita mikroporézní vrstvy na anodě pro PEM elektrolýzu vody

Bc. Vojtěch Drobný (M2)

Školitel: Ing. Martin Prokop, Ph.D.

Mezi hlavní komponenty elektrolytické cely pro kyselou elektrolýzu vody patří dvě plynově difuzní elektrody oddělené polymerní, protonově vodivou membránou. Plynově difuzní elektroda sestává ze tří hlavních komponent: katalyzátoru, mikroporézní vrstvy a makroporézní transportní vrstvy. Mikroporézní vrstva pak reprezentuje důležitou součást celé plynově difuzní elektrody, kdy napomáhá správnému kontaktu mezi nanočásticovým katalyzátorem a makrostrukturou porézní transportní vrstvy. Standardně se využívá na katodě ve formě porézních uhlíkových materiálů, nicméně v případě anody se v současné době nepoužívá a katalyzátor je nanášen přímo na Ti porézní transportní vrstvu. Využití vhodné mikroporézní vrstvy na anodě má vysoký potenciál zlepšit výkon procesu a snížit degradaci anodových komponent. Tato práce se zabývá přípravou mikroporézní vrstvy na Ti plsti pro anodu v PEM elektrolýzě vody. Mikroporézní vrstva byla připravena z práškových materiálů zahrnujících hydridy, nitridy a boridy Ti a Ta, u kterých byla změřena vodivost a stabilita při polarizaci v elektrochemické cele. Zatímco v elektrochemické cele vykazovaly skoro všechny materiály stabilitu podobnou samotnému Ti, v elektrolýzě byly pozorovány zlepšené vlastnosti u TiN, TaB₂ a mořeného Ti.



Stabilita slitinových katalyzátorů na bázi Pt pro PEM palivové články

Bc Tomáš Jedlička (M1)

Školitel: Ing. Martin Prokop, Ph.D.

V rámci elektromobility se mimo baterie jeví jako vhodné zdroje elektrické energie nízkoteplotní PEM palivové články využívající jako palivo vodík. Tato technologie je v současnosti omezena ekonomickými aspekty jednotlivých komponent. Standardně jsou na anodě i katodě užívané katalyzátory na bázi Pt. Nevýhodou těchto katalyzátorů je relativně vysoká cena a degradace, což je činí nerentabilní ve srovnání s konvenčním automobilem. Jako řešení se nabízí slitinové katalyzátory, u nichž je část Pt nahrazena neušlechtilými kovy. V rámci mé práce byly zkoumány dva typy katalyzátorů v tenkém filmu na membráně. Prvním byl magnetronově naprášený Pt-CeO₂ katalyzátor. Druhý byl Pt₃Ni katalyzátor nanesený ultrazvukovou depozicí ze suspenze. Oba katalyzátory byly testovány v celé laboratorního palivového článku. V rámci testování proběhla charakterizace změřením zátěžových křivek a elektrochemické impedanční spektroskopie v daných časových intervalech. Katalyzátor Pt-CeO₂ vykazuje aktivitu srovnatelnou s konvenčními katalyzátory i přes velmi malý obsah Pt, ale pouze po krátkou dobu. Po 25 h dochází ke značnému poklesu aktivity. Katalyzátor Pt₃Ni vykazuje dostatečnou aktivitu, ale zároveň i významný pokles aktivity v čase. V absolutních hodnotách však poskytuje lepší výsledky, než Pt-CeO₂.

Návrh a charakterizace nové laboratorní cely pro alkalickou elektrolýzu vody

Daniel Vojvoda (B3)

Školitel: Ing. Jaromír Hnát, Ph.D.

Ve vodíkové ekonomice, považované za možnou budoucnost energetiky, existuje několik přístupů k získávání vodíku. Průmyslově zavedený způsob je alkalická elektrolýza vody. Velká část zavedených konstrukčních postupů a typů materiálů u alkalických elektrolyzérů vody však pochází ze 70. let minulého století a neodpovídá současným požadavkům, zejména s ohledem na propojení alkalické elektrolýzy vody s obnovitelnými zdroji energie. Novým trendem je využití anion-selektivní polymerní membrány. To umožňuje sestavení elektrolytické cely v tzv. zero-gap uspořádání, kdy jsou elektrody přitisknuté k povrchu membrány. Zero-gap konstrukce cely pak klade vysoké nároky na použité těsnění, které musí při stlačení umožnit dosažení zero-gap a těsnosti elektrolytické cely. Další nezbytné modifikace zero-gap uspořádání jsou potom spojeny s distributorem toku kapalného elektrolytu. Cílem práce je návrh nového uspořádání laboratorní elektrolytické cely, umožňující využití flexibilního EPDM těsnění, které umožňuje opakované použití, na rozdíl od nejčastěji používaného materiálu těsnění – expandovaného teflonu. Dalším cílem je určení vlivu distributoru toku na výkonové charakteristiky. Charakterizace bude provedena pomocí stanovení zátěžových křivek a metody elektrochemické impedanční spektroskopie.

Ústav anorganické technologie II

MÍSTO: MÍSTNOST A 25A

KOMISE

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

Doc. Ing. Tomáš Bystroň

Ing. Ivona Sedlářová, Ph.D.

Ing. Milan Bernauer, Ph.D.

Ing. Michal Baudys, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Bc. Daniela Mauci](#) (M1, doc. Ing. Miloslav Lhotka, Ph.D.)

Výroba chloristanu amonného

09:15 [Bc. Johana Melzerová](#) (M2, doc. Dr. Ing. Vlastimil Fíla)

Syntéza a charakteristika membrán na bázi polymeru 6FDA:bisAPAF

09:30 [Iryna Nikitochkina](#) (B3, Ing. Ivona Sedlářová, Ph.D.)

Neutralizace štěpné kyseliny sírové z výroby titanové běloby

09:45 [Bc. Daniela Štefanková](#) (M2, doc. Ing. Miloslav Lhotka, Ph.D.)

Stanovenie systému medzioperačnej kontroly v technológií alginátovej granulácie

10:00 [Bc. Jakub Štěpán](#) (M2, doc. Dr. Ing. Vlastimil Fíla)

Příprava a charakterizace termicky zpracovaných polymerů pro separaci plynů

10:15 [Bc. Patrik Švejda](#) (M1, doc. Ing. Tomáš Bystroň, Ph.D.)

Netradiční elektrody pro katodickou redukci acetofenonu

Výroba chloristanu amonného

Bc. Daniela Mauci (M1)

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

Chloristan amonný je silné oxidační činidlo a je využíván převážně jako složka pevných raketových paliv. Výchozí surovinou pro jeho výrobu je chloristan sodný, který reaguje např. s chloridem amonným za vzniku NH_4ClO_4 a NaCl . Jelikož výroba NH_4ClO_4 je cyklickým procesem, je zásadní čistota vstupní suroviny. V opačném případě by docházelo k hromadění nečistot v systému, které mohou ohrozit bezpečnost výroby a skladování NH_4ClO_4 . Dalším výrobním krokem, po přečištění NaClO_4 s využitím srážecích reakcí, je samotná chemická reakce, jejímž produktem je roztok obsahující NH_4ClO_4 a NaCl . Následně je nutné tyto soli od sebe odseparovat. V tomto kroku se využívá rozdílné závislosti rozpustnosti obou solí na teplotě. Zatímco rozpustnost NaCl s teplotou mírně roste a dala by se považovat za téměř konstantní, rozpustnost NH_4ClO_4 s teplotou silně vzrůstá. Právě této krystalizační části výroby byla věnována pozornost v prezentované práci. Bylo sledováno, zda dochází k vzájemnému ovlivnění rozpustnosti obou solí a hlavním cílem bylo ověření publikovaného diagramu rozpustnosti, který znázorňuje závislost rozpustností obou solí ve vodě. Porozumění systému $\text{NH}_4\text{ClO}_4\text{--NaCl--H}_2\text{O}$ je klíčové pro nalezení optimálních pracovních podmínek krystalizátoru, a tedy zefektivnění celého výrobního procesu.

Syntéza a charakteristika membrán na bázi polymeru 6FDA:bisAPAF

Bc. Johana Melzerová (M2)

Školitel: doc. Dr. Ing. Vlastimil Fíla

Membránové separační procesy jsou dnes již poměrně rozšířené v celé řadě chemických procesů a uplatňují se v oblastech petrochemického průmyslu, čištění odpadních vod, odsolování mořské a brakické vody nebo separace plynů. Právě membránová separace plynů je v současné době jednou z nejvíce rozvíjejících se oblastí. Tato práce je zaměřena na separaci oxidu uhličitého a methanu na polyimidových membránách na bázi 6FDA:bisAPAF. V rámci této práce byly připraveny jak membrány z čistého polymeru 6FDA:bisAPAF s modifikovanými hydroxylovými skupinami, tak i membrány se smíšenou matricí, kde bylo jako plnivo použito UiO-66. Připravené materiály byly charakterizovány pomocí XRD, FTIR, TGA a SEM. Separační účinnost připravených membrán byla testována pomocí permeačních měření v binární směsi CO₂/CH₄ při různém tlaku a složení vstupní směsi.

Neutralizace štěpné kyseliny sírové z výroby titanové běloby

Iryna Nikitochkina (B3)

Školitel: Ing. Ivona Sedlářová, Ph.D.

Titanová běloba je jedním z nejvýznamnějších vyráběných anorganických pigmentů. Své uplatnění úspěšně našla v průmyslu nátěrových a plastických hmot, papírenství, farmacii, potravinářství, kosmetice a dalších odvětvích. Jedním ze způsobů její výroby je síranový způsob, založený na rozkladu ilmenitu koncentrovanou kyselinou sírovou. Jako vedlejší produkt vzniká štěpná kyselina sírová, která je zředěná a silně znečištěná příměsmi pocházejícími z ilmenitu. Tato práce se zabývá studiem její neutralizace roztokem hydroxidu sodného. Neutralizace je prováděna pomocí automatického titrátoru ve vsádkovém míchaném reaktoru za konstantní teploty. Cílem studie je sledovat průběh neutralizace do různých hodnot pH a určit složení vznikající pevné a kapalné fáze pomocí rentgenové difrakční (XRD) a fluorescenční (XRF) analýzy.

Stanovenie systému medzioperačnej kontroly v technológii alginátovej granulácie

Bc. Daniela Štefanková (M2)

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

Alginátová granulácia je vo farmaceutickom priemysle významnou operáciou, kedy je liečivá látka zapuzdrená do alginátových matric. Túto metódu tvarovania častíc však možno použiť i v iných oblastiach chemického priemyslu. Pre hladký priebeh tvorby sférických častíc je nutná kontrola kvality procesu. Na základe požiadavky som pristúpila k riešeniu kontroly kvality roztokov surovín esenciálnych pre danú technológiu. Cieľom práce bol návrh systému efektívneho hodnotenia a stanovovania zloženia roztokov v niekoľkých úsekoch technológie. V technologickej schéme boli vytipované kontrolné body a upresnené analytické metódy. Nasledujúci systém kontroly zníži požiadavky na inštrumentálne vybavenie technológie, výrazne obmedzí jej časovú náročnosť a zmierni potrebnú kvalifikáciu operátorov. V prvom prípade kontroly som analytickým vyšetrením vstupných roztokov za rôznych teplôt získala závislosť medzi hustotou, koncentráciou a teplotou. Z experimentálnych dát som určila koncentračné závislosti vstupných roztokov na hustote pri danej teplote. V druhej časti som sledovala úbytok koncentrácie Ca^{2+} iónov v reaktore pre alginátovú granuláciu a určila medzné hodnoty koncentrácie Ca^{2+} iónov nutné pro tvorbu častíc. Stanovenie systému medzioperačnej kontroly je nutné pre celkovú bezpečnosť výroby.

Příprava a charakterizace termicky zpracovaných polymerů pro separaci plynů

Bc. Jakub Štěpán (M2)

Školitel: doc. Dr. Ing. Vlastimil Fíla

V posledních letech dochází k výraznému rozvoji membránových procesů a jejich aplikací v průmyslovém měřítku. Membrány nachází uplatnění jak v elektrochemických (membránová elektrolýza solanky, palivové články atd.), tak i v separačních procesech (odsolení vod, separace bílkovin, separace plynů apod.). Separační vlastnosti membrán jsou velmi diskutované téma a v podstatě denně jsou vyvíjeny nové membrány, které svou separační účinností přesahují předchozí. Tato práce je zaměřena na separaci CO_2 a CH_4 pomocí polyimidových membrán na bázi 6FDA-DAM. Cílem této studie je vyšetření vlivu tepelného zpracování (thermal rearrangement) membrán na jejich separační účinnost a stabilitu. Připravené membrány byly termicky zpracovány při různých teplotách a následně charakterizovány pomocí permeačního měření se směsí obsahující CO_2/CH_4 . Byl sledován vliv složení směsi a tlaku na separační účinnost.

Netradiční elektrody pro katodickou redukci acetofenonu

Bc. Patrik Švejda (M1)

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

Elektrolýza acetofenonu na bórem dopované diamantové elektrodě (BDD) jako jeden z hlavních produktů generuje dimerní produkt (2,3-difenylbutan-2,3-diol), který následnou reakcí může přesmykovat na 2,2-dimethyl-1,2-difenylpropan-1-on. To je však nežádoucí pokud je cílem syntetizovat alkoholový produkt acetofenonu 1-fenylethan-1-ol, který se využívá v nátěrových hmotách a je důležitou vstupní látkou do dalších syntéz, například při výrobě styrenu, jeho esterifikací lze získat aditiva do parfémů. Cílem této práce je kvalitativní elektrochemická redukce acetofenonu se zacílením na výrobu 1-fenylethan-1-olu. Za tímto účelem bylo testováno několik přístupů: využití alkalického činidla v methanolickém roztoku elektrolytu, využití katody na bázi Ti či Ti s hydridovou vrstvou a úpravy povrchu BDD elektrody pomocí polymeru s vnitřní mikroporozitou.

Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství (106)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Jan Šerák, Ph.D.

SEZNAM SEKČÍ

1. [Kovové materiály](#)

Kovové materiály

MÍSTO: POSLUCHÁRNA ÚSTAVU 106 (A50)

KOMISE

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

doc. Ing. Milan Kouřil, Ph.D.

Ing. Petr Dvořák, Ph.D.

Ing. Filip Průša, Ph.D.

Ing. Jiří Kubásek, Ph.D.

Ing. Eva Kristianová

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Bc. Anna Boukalová](#) (M2, Ing. Jiří Kubásek, Ph.D.)

Příprava slitin zinku s harmonickou strukturou postupy práškové metalurgie

09:05 [Bc. Ester Duchková](#) (M1, prof. Ing. Pavel Novák, Ph.D.)

Tepelné zatížení ventilů spalovacího motoru

09:10 [Bc. Evdokim Kolesnichenko](#) (M2, doc. Ing. Jan Stoulil, Ph.D.)

Korozní chování stabilizované oceli v neutralizačním reaktoru dusičnanu amonného

09:15 [Bc. Klára Korbelová](#) (M2, doc. Ing. Alena Michalcová, Ph.D.)

Příprava povrchových oxidických vrstev na slitinách Ti obohacených o IrOx.

09:20 [Bc. Daniel Kvapil](#) (M1, prof. Dr. Ing. Dalibor Vojtěch)

Vliv tepelného zpracování na vlastnosti 3D tištěné vysocepevné oceli maraging

09:25 [Stanislav Mestek](#) (M2, prof. Ing. Pavel Novák, Ph.D.)

Využití hlubokomořských konkrecí pro práškovou metalurgii

09:30 [Victor Nicolas](#) (M2, doc. Ing. Milan Kouřil, Ph.D.)

Obětované anody pro katodickou ochranu výztuže betonu z recyklovaného zinku

09:35 [Bc. Jan Pokorný](#) (M1, doc. Ing. Jaroslav Fojt, Ph.D.)

Korozní chování slitiny NiTi

09:40 [Bc. František Růžička](#) (M2, Ing. Filip Průša, Ph.D.)

Slitiny s vysokou entropií vyztužené přírodními materiály.

09:45 [Bc. Denisa Svobodová](#) (M2, prof. Ing. Pavel Novák, Ph.D.)

Technologie plazmových nástřiků hydroxyapatitu

09:50 [Jan Šťovíček](#) (B3, doc. Ing. Jaroslav Fojt, Ph.D.)

Systém včasné detekce zánětu

Příprava slitin zinku s harmonickou strukturou postupy práškové metalurgie

Bc. Anna Boukalová (M2)

Školitel: Ing. Jiří Kubásek, Ph.D.

Zinek je vzhledem ke své biokompatibilitě a vhodné korozní rychlosti uvažován pro výrobu biodegradovatelných implantátů (šrouby, dlahy k fixaci zlomenin, kostní náhrady). Mechanické vlastnosti zinku však nejsou pro tyto aplikace dostatečné. Jedním ze zajímavých a slibných postupů přípravy materiálů na bázi zinku se zlepšenými vlastnostmi v důsledku homogenní a jemnozrnné mikrostruktury je prášková metalurgie. Jemnozrnná mikrostruktura zajišťuje zvýšenou pevnost materiálu, avšak velmi často na úkor tažnosti. U materiálů s harmonickou strukturou jsou cíleně vytvořeny „tvrdé a měkké“ oblasti, jejichž synergickým působením lze získat unikátní materiály s vysokou pevností i tažností. Cílem této práce je nalezení vhodných podmínek přípravy materiálu s harmonickou strukturou na bázi zinku. Materiály jsou připraveny z prášků hrubozrnných částic zinku a jemnozrnných částic slitiny Zn-1Mg kompaktizací metodou sintrace v plazmatu.

Tepelné zatížení ventilů spalovacího motoru

Bc. Ester Duchková (M1)

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

Tato práce se zabývá studiem použitých a nových výfukových i sacích ventilů spalovacího motoru Fordu Fiesta. Jejím hlavním cílem bylo prozkoumat možnost experimentálního stanovení tepelného zatížení ventilů při provozu motoru. Ventily byly nařezány na referenční části. Z nových ventilů byly žíháním připraveny srovnávací vzorky. Pomocí elektronové mikroskopie bylo zjištěno chemické složení všech připravených vzorků a optickou mikroskopií popsána jejich mikrostruktura. Tepelné zatížení v jednotlivých částech použitých ventilů bylo stanoveno ze série vzorků nových ventilů vyžíhaných při různých teplotách, u nichž při expozici došlo ke změnám struktury a tvrdosti. Díky tomu byl odvozen vztah exponenciální závislosti velikosti zrna na teplotě. Touto metodou bylo zjištěno, že ventily sací byly vyrobeny z martenzitické oceli a ventily výfukové z austenitické oceli. Bylo vyhodnoceno, že nejvyšší teplota působící na sací ventily se pohybuje okolo 575 °C v oblasti krčku a ve výfukovém ventilu byla v tomto místě stanovena teplota 761 °C. Touto metodou je možné studovat teplotní zatěžování ventilů, avšak je nezbytné zohlednit odlišný stupeň protváření v různých částech ventilu.

Korozní chování stabilizované oceli v neutralizačním reaktoru dusičnanu amonného

Bc. Evdokim Kolesnichenko (M2)

Školitel: doc. Ing. Jan Stoulil, Ph.D.

Při výrobě kyseliny dusičné se běžně používají titanem stabilizované korozivzdorné oceli ve vysokoteplotních částech technologie, kde uplatní svou vyšší žárupevnost, ale nepřijdou do styku s kapalnou kyselinou dusičnou. Ve velmi oxidačním prostředí koncentrované kyseliny dusičné s teplotou blíží se bodu varu dochází k rozpouštění TiC vyprecipitovaného po hranicích zrn a materiál ztrácí svou soudržnost, tzv. „žiletková koroze“. Nejasnosti panují ohledně možného použití v neutralizačním reaktoru pro výrobu dusičnanu amonného. V rámci práce byl ověřován materiál FeCr18Ni10Ti po stabilizačním a rozpouštěcím žíhání v prostředí typickém pro reaktor, s maximálními podmínkami taveniny s obsahem 0,2 hm.% vody a teplotě 190 °C. Materiál je bez problému použitelný i ve stabilizované formě za jakýchkoli koncentrací dusičnanu amonného až do teploty 174 °C. Při teplotě 190 °C již dochází k intenzivní „žiletkové korozi“.

Příprava povrchových oxidických vrstev na slitinách Ti obohacených o IrOx.

Bc. Klára Korbelová (M2)

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

Elektrochemické pH senzory mají široké průmyslové využití, ale jsou také využívány např. v medicíně, a to z důvodu jejich biokompatibility, snadné integraci na nositelné substráty, rychlé odezvy a vysoké citlivosti na změnu pH. Tato práce je zaměřena na přípravu vzorků na bázi nanostruktury TiO₂ s deponovaným kovem iridia a jeho oxidy (IrOx), přičemž jako základní materiál byla použita slitina Ti–6Al–4V. Nanostruktura byla vytvořena anodickou oxidací v režimu s potenciodynamickou a potenciostatickou fází v elektrolytu vodného roztoku síranu a fluoridu amonného. Takto vytvořené vzorky byly z důvodu stabilizace následně vystaveny umělému stárnutí ve fyziologickém roztoku (9 g/l NaCl) a dále byla sledována jejich mikrostruktura pomocí skenovacího elektronového mikroskopu (SEM) a transmisního elektronového mikroskopu (TEM).

Vliv tepelného zpracování na vlastnosti 3D tištěné vysocepevné oceli maraging

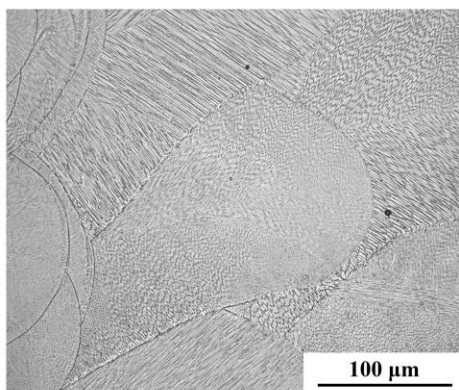
Bc. Daniel Kvapil (M1)

Školitel: prof. Dr. Ing. Dalibor Vojtěch

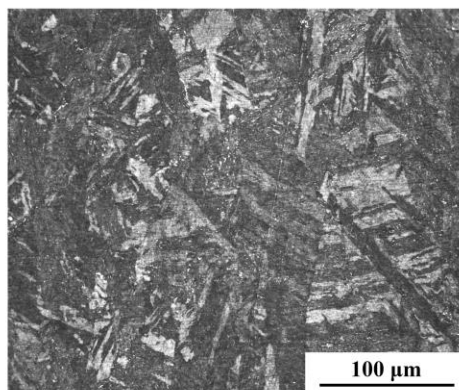
Maraging oceli jsou vysokolegované, nízkouhlíkaté oceli vyznačující se výbornou kombinací mechanických vlastností a tažnosti. Uvedených vlastností dosahují díky precipitačnímu vytvrzení martenzitické matrice po vhodném tepelném zpracování. Průmyslově atraktivní výhodou maraging ocelí je možnost zpracování aditivní výrobou (3D tiskem) nabízející vysokou přesnost a komplexnost tvarů. Pro tuto práci byla použita maraging ocel třídy 18Ni-300 vyrobená aditivní metodou selektivního tavení laserem (SLM). Její vhodnost pro 3D tisk byla experimentálně potvrzena na základě nízké porozity. Hlavním cílem práce bylo stanovit vhodné tepelné zpracování pro dosažení nejlepšího vytvrzení. Experimenty byly zaměřeny na dva režimy tepelného zpracování: I) rozpouštěcí žíhání při 820 °C po dobu 1 h., II) stárnutí při 440 °C, 490 °C a 540 °C po dobu 2, 4, 6, 8 a 10 h. Vliv tepelného zpracování byl hodnocen na základě provedených měření mikrotvrdomosti, rentgenové difrakční analýzy a studia mikrostruktury. Experimenty prokázaly podpurný vliv rozpouštěcího žíhání na vytvrzení. Optimálního vytvrzení a mikrostruktury bylo dosaženo při kombinaci žíhání 820 °C/1 h. a stárnutí 490 °C/6 h. Dále byla zjištěna souvislost mezi přestárnutím, austenitickou reverzí a poklesem mikrotvrdomosti materiálu.

Maraging ocel 18Ni-300

a) po 3D tisku
metodou SLM



b) po žíhání (820 °C/1 hod.)
a stárnutí (490 °C/10 hod.)



Využití hlubokomořských konkrecí pro práškovou metalurgii

Stanislav Mestek (M2)

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

Hlubokomořské manganové konkrece (HMK) jsou potenciálním zdrojem řady kovů, Mn, Ni, Cu, Co a také kovů vzácných zemin. Metody zpracování HMK často vedou k separaci jednotlivých kovů. Je však také možné tyto kovy v podobě přírodní slitiny využít bez separace. Aluminotermickou redukcí HMK byla získána přírodní slitina (PS), která byla využita jako legovací přísada pro hliníkové slitiny vyrobené práškovou metalurgií. Mechanickým legováním byly připraveny prášky hliníku s přídavky 2-20 hm. % PS. Analýzy SEM ukázaly, že v prášcích zůstalo velké množství částic nezreagované PS. XRD prokázala přítomnost fází Al a beta-Mn. Prášky byly slinovány v plazmatu teplotě 550 °C. Při slinování došlo k difuzi manganu z PS do okolní hliníkové matrice, a naopak hliníku do zrn PS. Přesto v Al matrici byly viditelné nezreagované částice PS obklopené vnější vrstvou obsahující Al, Mn a další prvky PS. XRD našla přítomné fáze Al, Al_6Mn a $\text{Al}_{19}\text{Mn}_4$. Teprve žíhání slitin při 600 °C po dobu 3 h vedlo k úplnému zreagování PS. Ve snímcích SEM byly homogenní částice obsahující Al, Mn a další prvky PS v Al matrici. U všech slitin byla změřena tvrdost HV5. Jejich tvrdost byla několikanásobně vyšší, než tvrdost čistého Al a zvyšovala se obsahem PS. Žíháním došlo k poklesu tvrdosti o 30-50 %.

Obětované anody pro katodickou ochranu výztuže betonu z recyklovaného zinku

Victor Nicolas (M2)

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

Koroze ocelové výztuže v betonu je pro dlouhou životnost betonových konstrukcí nežádoucí. Jednou z metod, jak životnost betonové konstrukce prodloužit je použití obětovaných anod. Tato práce se zabývá studiem obětovaných anod z recyklovaného zinku v kombinaci s různými typy prostředí simulující možné podmínky přítomné v betonu. Cílem práce bylo ověření účinnosti ochrany obětovaných anod z lisovaných prášků Zn v porovnání s anodami z litého Zn. Experimentální část spočívala v měření polarizačního odporu, měření proudu v makročlásku Zn – uhlíková ocel, záznamu hmotnostních úbytků a následné dokumentace na optickém mikroskopu.

Korozní chování slitiny NiTi

Bc. Jan Pokorný (M1)

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

Nitinol je ekvatomární slitina niklu a titanu. Korozní odolnost této slitiny využívané v biomedicínských aplikacích především ve formě stentů je velmi důležitým faktorem biokompatibility. Povaha prostředí a stav povrchu nitinolu mají významný vliv na korozní odezvu. V lidském těle se můžeme setkat s prostředím tělních tekutin, které se liší chemickým složením, a tím i vlivem na korozní chování nitinolu. Například krevní plazma s hodnotou pH 7,4 vykazuje nižší agresivitu prostředí než žaludeční šťávy, kde se hodnoty pH pohybují v intervalu 1-4. V této práci byly zkoumány faktory procesní historie NiTi drátů na korozní chování v prostředí simulovaných žaludečních šťav, a to zejména z hlediska odolnosti materiálu vůči lokalizovaným formám korozního napadení.

Slitiny s vysokou entropií vyztužené přírodními materiály.

Bc. František Růžička (M2)

Školitel: Ing. Filip Průša, Ph.D.

Slitiny s vysokou entropií jsou novým typem materiálů, které díky své neobyčejné struktuře dosahují výjimečných vlastností, jakými jsou vysoká tvrdost a pevnost. Tyto vlastnosti lze dále upravovat tvorbou kompozitu. Cílem této práce je vytvořit kompozit s využitím slitin s vysokou entropií a přírodních zdrojů. Pro tyto účely byla vybrána ekvatomární slitina CoCrFeNiMn připravená atomizací plyným médiem. K tvorbě kompozitních slitin byly použity rýžové slupky, obsahující 15-20 hm. % SiO_2 , jehož množství lze vhodným tepelným zpracováním zvýšit až na hodnoty přesahující 90 hm. %. SiO_2 se ve slupkách vyskytuje v podobě jemných řetězců nebo nanokrystalických částic, které by mohly mít výrazný vyztužující účinek. Pyrolýzou slupek lze vytvořit vysoce pevné, nanokrystalické SiC whiskery. Rýžové slupky byly také vybrány díky dobré dostupnosti a nízké ceně. S využitím práškové metalurgie byly navrženy postupy pro tvorbu kompozitů, mezi které patří přidání rýžových slupek přímo do kulového mlýnu, nebo se jednalo o různé přístupy k pyrolýze rýžových slupek. Výsledné kompozitní prášky byly zkompaktizovány metodou slinování v plazmatu. U vzniklých kompakťů byla studována mikrostruktura a provedena analýza mechanických vlastností. Vlastnosti kompozitů byly pak porovnány s výchozí slitinou.

Technologie plazmových nástřiků hydroxyapatitu

Bc. Denisa Svobodová (M2)

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

Depozice ochranných či funkčních vrstev pomocí inovativní technologie plazmového nanášení z kapalně fáze je novinkou ve sféře povrchového zpracování pokročilých materiálů. Jedněmi z výhod této technologie jsou absence náročné přípravy práškových materiálů, možnost použití nanočástic, a tedy připravit nástřiky s řádově menšími mikrostrukturními jednotkami (splaty), či dokonce vznik multi-materiálových vrstev reakcí přímo při procesu nanášení. Vzhledem k těmto výhodám je plazmová depozice z kapalin (roztoků či suspenzí) v současné době intenzivně studována pro velké množství rozličných aplikací, např. letectví, energetika, strojírenství či petrochemický průmysl. Jednou z dosud málo prozkoumaných oblastí jsou i biomedicínské aplikace. Doposud vznikly práce na toto téma jen na třech pracovištích světa, přičemž dosažené výsledky jsou velice slibné. Cílem práce studenta bude prozkoumat možnost zlepšení procesu plazmové depozice optimalizací vlastností připravených suspenzí hydroxylapatitu. Tyto vrstvy byly již na Ústav fyziky plazmatu AV ČR připraveny, ale např. depoziční efektivita byla příliš malá pro ekonomickou depozici v praxi. Pro hlubší pochopení bude studie doplněna analýzami vytvořených nástřiků.

System včasné detekce zánětu

Jan Šťovíček (B3)

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

Každý zásah do lidského těla s sebou nese riziko vzniku zánětu. Ten se projevuje řadou fyziologických změn v okolí postiženého místa. Jednou z nich je i změna hodnoty pH. To je ve zdravém těle přibližně 7.4, ale v momentě infekce dochází ke změně rovnováhy a k poklesu pH až o jednotky. S dostatečně citlivou pH elektrodou je možnost tyto změny zachytit již v počátcích, ne každá elektroda je však vhodná z hlediska mechanické odolnosti a biokompatibility. Titan a jeho slitiny v lidském těle vykazují stabilitu v prostředí, vynikající biokompatibilitu, ale i dostatečnou citlivost změny potenciálu v reakci na změnu pH. Cílem práce bylo najít úpravu povrchu β titanu, slitiny TiNbTa, která by při změnách pH vykazovala stabilní výsledky, nejlépe odpovídající zjednodušené Nernstově rovnici (59.16 mV na jednotku pH), a která by odpovídala požadavkům pro výrobu metaloxidické pH elektrody, použitelné v lidském těle. Testovány byly elektrochemické a hydrotermální úpravy povrchu, změna pH byla vyhodnocována na základě změny potenciálu. Na základě výsledků byla zvolena vhodná kombinace postupů, která poskytovala uspokojivou odezvu na změny pH.

Ústav skla a keramiky (107)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Tereza Unger Uhlířová, Ph.D.

SEZNAM SEKČÍ

1. [Anorganické nekovové materiály I](#)
2. [Anorganické nekovové materiály II](#)
3. [Restaurování a konzervování skla a keramiky](#)

Anorganické nekovové materiály I

MÍSTO: CHODBA ÚSK

KOMISE

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

Ing. Mária Kolářová, Ph.D.

doc. Dr. Ing. Martin Havlík Míka

PROGRAM

09:00 zahájení

[Bc. Silvie Fabianová](#) (M2, Ing. Tereza Unger Uhlířová, Ph.D.)

Pevnost paracetamolových výlisků v závislosti na lisovacím tlaku

[Bc. Jan Kunc](#) (M1, Ing. Richard Pokorný, Ph.D.)

Estimation of gaseous emissions during waste vitrification using regression analysis and feed stoichiometry

[Bc. Nikola Lehovcová](#) (M2, Ing. Diana Horkavcová, Ph.D.)

Testování a charakterizace bioaktivity a antibakteriálních účinků titaničitých sol-gel povlaků

[Bc. Jiří Lietavec](#) (M2, prof. Dr. Dipl.-Min. Willi Pabst)

Studium pevnosti kaolinových výlisků v závislosti na lisovacím tlaku

[Bc. Dominik Navara](#) (M2, Ing. Jan Macháček, Ph.D.)

Optimalizace procesu přípravy skafoldů z bioaktivního skla 45S5 pomocí stereolitografického 3D tisku

[Bc. Tereza Přivrácká](#) (M2, doc. Dr. Ing. Dana Rohanová)

Tvorba apatitu z roztoku SBF: jsou výsledky in vitro testu pravdivé?

[Nadiia Silina](#) (B2, Ing. Richard Pokorný, Ph.D.)

Effect of feed composition on the retention of rhenium during vitrification of nuclear waste

[Daria Viazun](#) (B3, prof. Dr. Dipl.-Min. Willi Pabst)

Příprava a charakterizace keramiky na bázi kaolinu a mullitu

[Jan Šrédl](#) (B3, Ing. Martina Šídlová, Ph.D.)

Využití odpadního skla ve stavebnictví

Pevnost paracetamolových výlisků v závislosti na lisovacím tlaku

Bc. Silvie Fabianová (M2)

Školitel: Ing. Tereza Unger Uhlířová, Ph.D.

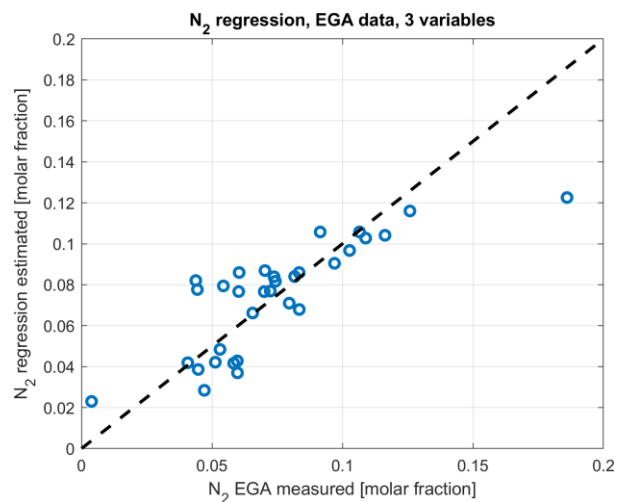
Lisování je jedním ze základních a v praxi nejvíce využívaných procesů při výrobě tablet. Mezi výhody uniaxiálního (jednoosého) lisování patří mimo jiné technická nenáročnost a nízká cena. Mechanické vlastnosti tablet, mezi které patří např. pevnost a otěruvzdornost, jsou společně s rozpustností závislé na složení tabletoviny a na použitém lisovacím tlaku. Paracetamol je běžným léčivým přípravkem (působí především proti bolesti a snižuje tělesnou teplotu, nicméně nepůsobí protizánětlivě) a vyrábí se v několika lékových formách, mj. i jako nepotahované tablety. Proto byl paracetamol v této práci použit jako modelový systém pro detailní studium pevnosti výlisků na lisovacím tlaku. V této práci byly na ručním lisu nalisovány paracetamolové trámečky za tlaku 50, 60 a 70 MPa. Z důvodu špatné lisovatelnosti čistého paracetamolu byla připravena tabletovina s 1 hm.% sorbitanu monostearátu jako kluzné látky. Pro všechny nalisované vzorky byla stanovena objemová hmotnost a pórovitost. Pomocí přístroje MTS Exceed byla stanovena pevnost v ohybu připravených trámeček. Měřené pevnosti byly následně vyhodnoceny Weibullovou statistikou, byly stanoveny parametry Weibullova rozdělení a byly studovány souvislosti mezi lisovacím tlakem, objemovou hmotností, resp. pórovitostí a výslednou pevností.

Estimation of gaseous emissions during waste vitrification using regression analysis and feed stoichiometry

Bc. Jan Kunc (M1)

Školitel: Ing. Richard Pokorný, Ph.D.

Many emissions are generated during the vitrification of nuclear waste. Apart from the major gaseous emissions - O_2 , CO_2 , H_2O and N_2 , various minor off-gases (NO , N_2O , NO_2 , SO_2 , or CO) are released as well. Moreover, the melter off-gas can also include other trace emissions with potentially hazardous impact (such as acetonitrile), which are mostly formed as by-products of reactions between nitrates and organics in the feed. Our aim is to find a predictive tool to estimate the off-gas composition for the hundreds of waste feed compositions that will be vitrified at Hanford. In our previous work, we measured the gas evolution for a wide range of low-activity waste melter feeds using laboratory evolved gas analysis (EGA), and developed initial off-gas composition models. These models were based on the reaction stoichiometry and on the overall feed redox state, and provided reasonable agreement with EGA measurements. In this work, multiple regression analysis was attempted to improve the off-gas modelling by correlating the evolved gas composition with the feed composition, i.e., $g = Gx$, where g is the gas composition vector (an array of mass or mole fractions of gas components), G is the coefficient matrix, and x is the composition vector of major influential feed components.



Testování a charakterizace bioaktivity a antibakteriálních účinků titaničitých sol-gel povlaků

Bc. Nikola Lehovcová (M2)

Školitel: Ing. Diana Horkavcová, Ph.D.

Biomateriály jsou definovány jako materiály určené pro implantaci do živého organismu za účelem podpory nebo náhrady tkániva nebo orgánu. Titan je kovový biomateriál hojně využívaný v chirurgii a stomatologii. Vlastnosti kovů lze optimalizovat jejich povrchovými modifikacemi a spojit tak benefity kovů a vytvořeného povlaku. Paralelně s dynamickým výzkumem a vývojem biomateriálů se zvyšují i nároky na jejich kvalitativní hodnocení. U povrchově upravených kovů se hodnotí adheze, bioaktivita, antibakteriální účinky a v současnosti jsou nezbytné také testy cytotoxicity. Cílem práce bylo syntetizovat, testovat a charakterizovat titaničité sol-gel povlaky. Jejich nanesení na titanový substrát bylo provedeno metodou *dip-coating*. Bylo připraveno 6 různých vzorků lišících se přítomností dopantů (AgNO_3 , bioaktivní sklo 45S5) a jejich kombinacemi. Předmětem charakterizace vlastností vypálených povlaků byla zvolena bioaktivita a antibakteriální účinky. Testování bioaktivity proběhlo *in vitro* statickým testem v simulované tělní tekutině po dobu 21 dní. Antibakteriální působení bylo pozorováno vůči gramnegativní bakterii *Escherichia coli* a grampozitivní bakterii *Staphylococcus epidermidis* po 4 a 24 hodinách interakce. Podařilo se připravit vysoce adhezní, antibakteriální a bioaktivní povlaky.

Studium pevnosti kaolinových výlisků v závislosti na lisovacím tlaku

Bc. Jiří Lietavec (M2)

Školitel: prof. Dr. Dipl.-Min. Willi Pabst

Kaolin patří mezi nejdůležitější suroviny pro výrobu široké škály materiálů z tradiční silikátové keramiky, jako např. obkladačky, dlaždice nebo porcelán. Lisování je jedna z hlavních tvarovacích metod pro tento druh výrobků. Proto je znalost závislosti mechanických vlastností na lisovacím tlaku důležitá. Zejména pevnost je významná z hlediska transportu výlisku automatickými linkami před výpalem. V této práci byla proto zkoumána pevnost nevypálených kaolinových výlisků připravených lisovacími tlaky 30, 40, 50 a 60 MPa. Pro zjištění pevnosti v ohybu trámečků (s rozměry 65 x 6 mm, resp. 100 x 20 mm) byla použita zkouška tříbodovým ohybem, pro pevnost v příčném tahu Brazilská zkouška na tabletách s průměrem 35 mm (tloušťka cca 6 mm). Výsledky jednotlivých sad vzorků byly vyhodnoceny pomocí Gaussovy a Weibullovy statistiky a korelace obou typů pevnosti byly srovnány. Z průběhu zátěžových křivek ohybových zkoušek byly navíc vyhodnoceny Youngovy moduly výlisků (které vykazují úzkou korelaci s pevností) a byla prozkoumána korelace mezi směrnici zátěžových křivek a hodnotami Youngových modulů jak pro ohybové zkoušky, tak pro Brazilské zkoušky. Korelace tohoto druhu mohou pak sloužit v praxi k empirickému odhadu Youngových modulů i v případech, že teoretický vztah není k dispozici.

Optimalizace procesu přípravy skafoldů z bioaktivního skla 45S5 pomocí stereolitografického 3D tisku

Bc. Dominik Navara (M2)

Školitel: Ing. Jan Macháček, Ph.D.

Práce se zabývá optimalizací procesu přípravy skafoldů z fotocitlivé suspenze s obsahem částic bioaktivního skla 45S5 stereolitografickým 3D tiskem. První část práce se zabývá problematikou přípravy fotocitlivé suspenze s vyšším objemovým plněním částicemi bioaktivního skla 45S5 ke stereolitografickému 3D tisku skafoldů. V druhé části práce je rozebrána problematika přípravy skafoldů z těchto fotocitlivých suspenzí a možné vylepšení procesů přípravy suspenze i skafoldů z hlediska optimalizace těchto procesů. Pro optimalizaci byly připraveny suspenze s 40 obj. % bioaktivního skla 45S5. U připravených suspenzí byla zkoumána reologie a distribuce velikosti částic. Ze suspenzí byly vytištěny vzorky, které byly podrobeny výpalu v žárovém mikroskopu pro optimalizaci teplotní křivky výpalu a pro zjištění objemového smrštění.

Tvorba apatitu z roztoku SBF: jsou výsledky in vitro testu pravdivé?

Bc. Tereza Přivrácká (M2)

Školitel: doc. Dr. Ing. Dana Rohanová

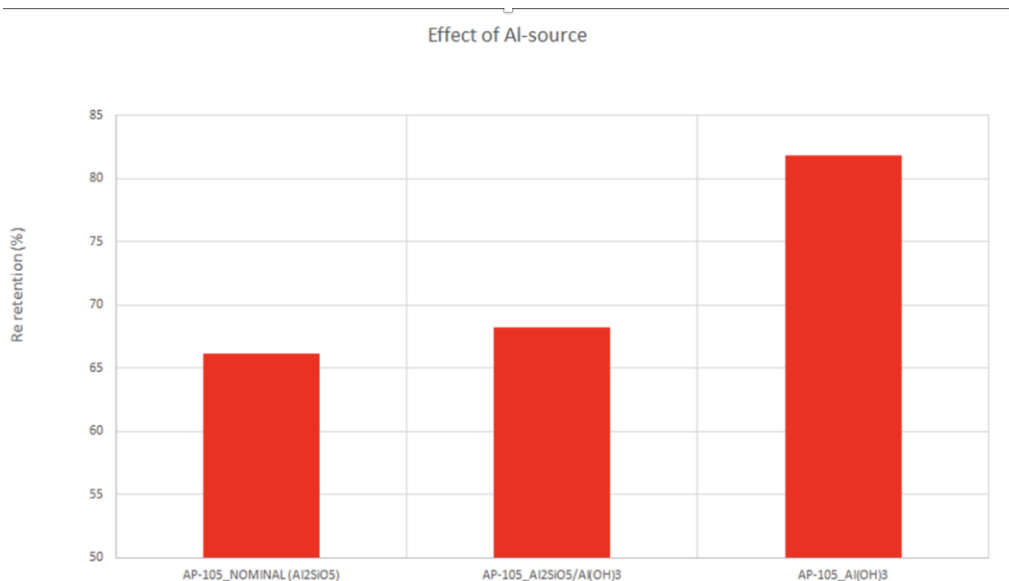
In vitro testy jsou nezbytnou součástí testování biomateriálů, jelikož poskytují prvotní informaci o reaktivitě biomateriálu v organismu. Standardizovaný roztok simulované tělní tekutiny (SBF) připravovaný dle ISO normy 23317:2014 je široce využívaný při testování bioaktivity skelných, sklokeramických a keramických materiálů. ISO norma posuzuje bioaktivitu pouze na základě tvorby apatitu (HAp) na povrchu, což poskytuje pouze částečné informace o skutečném chování daného materiálu v roztoku. V předchozích studiích bylo prokázáno, že pufr TRIS aktivně vstupuje do interakce materiál – SBF. Cílem práce bylo studium interakce celistvých vzorků Bioglass® v roztocích SBF s pufrem TRIS (dle ISO normy), v nepufrovaném SBF, v systému TRIS+HCl a DEMI vodě. Testování probíhalo za statických a staticko-dynamických podmínek. Během testu byly celistvé vzorky exponovány po dobu jeden až 14 dní. Následně byly stanoveny koncentrace Na^+ , Ca^{2+} , $(\text{PO}_4)^{3-}$ a Si ve výluzích pomocí ICP-OES a průběžně bylo měřeno pH. Byly sledovány změny hmotností, a nově vzniklá vrstva byla analyzována pomocí XRD a SEM/EDS. Výsledky *in vitro* testu na skle Bioglass® potvrdily, že pufr TRIS i zde ovlivňuje výsledky falešně pozitivně. Revize ISO normy je naprostou nezbytností.

Effect of feed composition on the retention of rhenium during vitrification of nuclear waste

Nadiia Silina (B2)

Školitel: Ing. Richard Pokorný, Ph.D.

Technetium (Tc) retention during the vitrification of nuclear waste is strongly affected by the presence of salt phase, i.e., nitrate, borate, and sulfate. To decrease the amount of salt phase in the melting feed and increase the fraction of borate phase, sucrose can be used, which reacts with nitrates and nitrites in the feed, and can even reduce sulfates. However, the effect of other feed components is still not clear. For example, both laboratory and pilot-scale tests showed that low-activity waste feed AN-105 has higher Tc retention than AP-107, although their composition was similar, apart from different source of alumina. Using Re as a surrogate for Tc, we investigated the impact of Al-sources and the content of molten salts (carbonates, nitrates, nitrites) on the retention of Re. As an example, Fig. 1 shows the comparison of Re retention in three modifications of AP-105 feed with different sources of alumina (kyanite, gibbsite, and their 50/50 mixture). We found that fully replacing Al_2SiO_5 by $\text{Al}(\text{OH})_3$ has significantly increased the Re retention (from 66% to 82%). However, when only half of the original kyanite was replaced by gibbsite, we didn't observe significant change. Additional tests are currently being performed to understand this Al-source effect.



Příprava a charakterizace keramiky na bázi kaolinu a mullitu

Daria Viazun (B3)

Školitel: prof. Dr. Dipl.-Min. Willi Pabst

Cílem této práce bylo připravit keramiku na bázi kaolinu a mullitu. Pro přípravu vzorků byl použit kaolin Sedlec Ia a mullit Nabaltec M72. Pro lisování byly z těchto prášků připraveny dvě směsi v hmotnostním poměru 8:2 a 7:3 (kaolin:mullit) a zároveň byl pro přípravu vzorků použit i čistý kaolin. Několik vzorků ve tvaru trámečků (100x20 mm) a tablet (35 mm) bylo připraveno pomocí uniaxiálního lisování za tlaku 50 MPa. Vylisované vzorky byly vypáleny při 5 různých teplotách od 1100-1500 °C. Nárůst teploty činil 2 °C/min a doba výdrže byla nastavena na 120 min. Vypálené vzorky byly charakterizovány pomocí Archimedovy metody, byla stanovena otevřená pórovitost (27-31%, resp. 0,4-3,9% po výpalu na 1100, resp. 1500°C) a objemová hmotnost (1,89-2,03 g/cm³, resp. 2,59-2,72 g/cm³ po výpalu na 1100, resp. 1500°C). Pomocí rentgenové difrakce byl stanoven obsah krystalických fází v jednotlivých vzorcích, kde se ukázala ve všech případech převaha mullitu a pouze nízký obsah jiných fází (korund, křemen, cristobalit). Dále bylo vypočítáno smrštění po výpalu (2,8-4,7%, resp. 11,5-12,9% po výpalu na 1100, resp. 1500°C). Nakonec byly naměřeny elastické vlastnosti (Youngovy moduly) za pokojové teploty pomocí metody impulsní excitace (21-26 GPa, resp. 105-116 GPa po výpalu na 1100, resp. 1500°C).

Využití odpadního skla ve stavebnictví

Jan ŠrédI (B3)

Školitel: Ing. Martina Šídlová, Ph.D.

Odpadní sklo patří mezi druhotné suroviny, které jsou dnes velmi dobře recyklovatelné. Převážná většina skleněného odpadu se tak vrací zpět do výrobního procesu skla při tavení sklářského kmene. Přesto existuje relativně velké množství skleněného odpadu, které nelze tímto způsobem využít a jeho následné uplatnění je problematické. Běžný skleněný odpad lze považovat za relativně inertní materiál a svým složením s vysokým obsahem SiO_2 se nabízí jeho potenciální využití ve formě kameniva nebo minerální příměsi do betonu. Cílem práce bylo posoudit potenciální rizikovost přídavku dodaného odpadního skla v betonu. Jeho využití je totiž problematické vlivem vzniku alkalicko-křemičité reakce mezi zrnem skla a cementem. Tuto reakci způsobují nukleofilní OH^- ionty. Při reakci pak vzniká hygroskopický gel, který narušuje strukturu materiálu. Bylo připraveno několik sad zkušebních maltových těles dle normy ASTM 1260, s přídavkem různé velikostní frakce odpadního skla. Větší frakce skla byly použity jako náhrada za kamenivo, zatímco menší frakce skla jako náhrada za cement. Na všech vyrobených tělesech byla sledována změna relativního prodloužení těles v čase. U vybraných sad těles byly navíc sledovány mechanické vlastnosti po vystavení těles zvýšené teplotě v 1M roztoku NaOH po dobu 28 dní.

Anorganické nekovové materiály II

MÍSTO: CHODBA ÚSK

KOMISE

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

Ing. Diana Horkavcová, Ph.D.

Ing. Jan Macháček, Ph.D.

PROGRAM

09:00 zahájení

[Bc. Richard Bursa](#) (B1, doc. Dr. Ing. Martin Havlík Míka)

Polymerová nanovlákná s částicemi luminiscenčního skla

[Bc. Tomáš Doležal](#) (M2, Ing. Martina Šídlová, Ph.D.)

Pucolánová aktivita jílu pro stavebnictví

[Bc. Nona Karapetjan](#) (M2, Ing. Tereza Unger Uhlířová, Ph.D.)

Reometrie fázových přechodů želírujících látek

[Bc. Lukáš Mauermann](#) (M2, Ing. Martina Šídlová, Ph.D.)

Studium alkalicko-křemičité reakce pojiv s obsahem fluidního popílku

[Bc. Aleš Rozvoral](#) (M1, prof. Ing. Aleš Helebrant, CSc.)

Zpětná precipitace složek vyloužených z obalových skel

[Bc. Tereza Schreiberová](#) (M1, prof. Ing. Aleš Helebrant, CSc.)

Koroze skel vodnými roztoky citrátů

[Bc. Eliška Sedláčková](#) (M2, Ing. Diana Horkavcová, Ph.D.)

Testování interakce drti bioskla s modifikovanou simulovanou tělní tekutinou

[Bc. Martina Vitvarová](#) (M2, doc. Ing. Alexandra Kloužková, CSc.)

Tvrdost dentálních materiálů

Polymerová nanovlákna s částicemi luminiscenčního skla

Bc. Richard Bursa (B1)

Školitel: doc. Dr. Ing. Martin Havlík Míka

Skla s luminiscenčními vlastnostmi jsou v dnešní době podrobně zkoumána. V kombinaci s electro-spinningem lze připravit polymerová nanovlákna s průměrem několika stovek nanometrů se skelnými částicemi. Tato vlákna by mohla mít uplatnění v medicíně jak při fotodynamické terapii léčící zhoubné nádory, tak pro léčbu kožních chorob, jako jsou akné, ekzémy a další. Výhodou nanovláken je jejich velká plocha, kde by se tento potenciál mohl využívat v kombinaci s fotosenzitivní látkou a blízkou polohou luminiscenčních částic skla. Cílem této práce bylo připravit křemičité sklo dopované oxidem europia, které se po rozemletí na částice v řádech několika mikrometrů použije s nosným polymerem pro electro-spinning za účelem vytvoření nanovláken se skelnými částicemi.

Pucolánová aktivita jílu pro stavebnictví

Bc. Tomáš Doležal (M2)

Školitel: Ing. Martina Šídlová, Ph.D.

Pro snižování emisí CO_2 ve stavebnictví je nutné hledat nové materiály využitelné jako příměsi do cementu. U těchto látek je důležitá jejich pucolánová aktivita, tedy schopnost reagovat s hydroxidem vápenatým za vzniku pojivové C-S-H fáze. Cílem práce bylo zjistit pucolánovou aktivitu kalcinovaných skrývkových jílu z lomu Bílina (L1 – L9), kaolinitického písku (KP), glaukonitického jílu (GL) a odprašků z výroby lupku (RON). Pucolánová aktivita byla zjišťována pomocí Frattiniho testu ve smyslu normy ČSN EN 196-5. Dále byl měřen index pevnostní aktivity (SAI) na trámcích o velikosti 40 x 40 x 160 mm. Bylo zjištěno, že kalcinované jíly z lomu Bílina spolehlivě vykazují pucolánové vlastnosti pomocí Frattiniho testu při výpalu na teplotu 850 °C. Snížením teploty na 650 °C došlo u části vzorků ke snížení pucolánové aktivity a vzorky se tak jeví jako neaktivní. Pevnostní index aktivity byl u vybraných vzorků z časových důvodů studován již po 7 dnech hydratace. Na rozdíl od Frattiniho testu zkoušky SAI potvrdily pucolánovou aktivitu všech jílu pálených jak na 650 °C, tak na 850 °C.

Reometrie fázových přechodů želírujících látek

Bc. Nona Karapetjan (M2)

Školitel: Ing. Tereza Unger Uhlířová, Ph.D.

Roztoky želírujících látek, jako jsou želatina, karagenan či agar, jsou za vyšší teploty čistě viskózní, s klesající teplotou dochází k jejich zesíťování a vzniká viskoelastická soustava, resp. elastická pevná látka (gel), čehož se využívá v potravinářském, kosmetickém i farmaceutickém průmyslu pro dosažení vhodné textury produktů. Želatina je bílkovina přírodního původu, která se získává hydrolýzou kolagenu z vepřové nebo hovězí kůže. Ve farmaceutickém průmyslu se využívá zejména pro výrobu měkkých a tvrdých kapslí, jako pomocná látka (pojivo), k řízenému uvolňování aktivní látky, ve tkáňovém inženýrství atd. Oscilační reometrie je metoda pro kvantitativní charakterizaci viskoelastického chování materiálů a je vhodná mimo jiné pro sledování změn v charakteru materiálů v závislosti na teplotě nebo čase. V této práci byly měřeny viskoelastické vlastnosti (fázový úhel, reálná a imaginární části smykového modulu) vodných roztoků želatiny (1–5 hm. %) v závislosti na teplotě pomocí přístroje Haake MARS III v uspořádání válec-válec. Měření probíhalo v rozmezí teplot 30 až 5 °C s rychlostí chlazení 0,2 °C/min. Zároveň bylo vyzkoušeno několik teplotních režimů za účelem najít režim vhodný pro přípravu částicových kompozitů s želatinovou maticí metodou lití do kovových forem.

Studium alkalicko-křemičité reakce pojiv s obsahem fluidního popílku

Bc. Lukáš Mauermann (M2)

Školitel: Ing. Martina Šídlová, Ph.D.

Práce se zabývá alkalicko-křemičitou reakcí (ASR) v betonech a maltách, která je jednou z možných příčin poruch betonových konstrukcí. Hlavním cílem bylo zkoumat vliv produktů po fluidním spalování uhlí s různým množstvím CaO na ASR. Část experimentální práce se navíc zabývala vlivem přídavku pěnoskla do maltových trámečků. Ke studiu ASR byla použita urychlená dilatační zkouška dle normy ASTM 1260, část experimentální práce byla navíc doplněna o dilatační zkoušky dle normy ČSN 72 1179 spolu se studiem mechanických vlastností. Na počátku práce bylo nutné vyřešit otázku málo reaktivního kameniva, které neumožňovalo jednoznačně vyhodnotit, do jaké míry mají přidané látky vliv na ASR. Tento problém byl vyřešen přidáním skleněných střepek za část kameniva, čímž se podařilo reaktivitu zvýšit. Hlavní experiment podle normy ASTM 1260 s produkty po fluidním spalování uhlí o různých obsazích CaO prokázal, že tendence eliminovat ASR roste se snižujícím se obsahem CaO ve vzorcích. Malty se 100% náhradou pěnoskla za kamenivo měly kladný vliv na eliminaci ASR dle prováděných zkoušek, nicméně vzhledem k pórovitému charakteru pěnoskla se tato zkouška sledování ASR nejeví jako průkazná.

Zpětná precipitace složek vyloužených z obalových skel

Bc. Aleš Rozvoral (M1)

Školitel: prof. Ing. Aleš Helebrant, CSc.

Zpětná precipitace je jedním ze tří dějů probíhajících při korozi skla. V dnešní době existuje nejméně informací pro popis tohoto děje, a proto je stále ve fázi výzkumu. Tento děj je v mnoha případech nežádoucí (potravinové a farmaceutické obaly), v jiných však může být žádoucí (bioaktivní skla). Cílem práce bylo pomocí řady analytických metod potvrdit děj zpětné precipitace a charakterizovat vysrážené produkty. V experimentální části byly prováděny statické modelové testy loužení na vybraných typech obalových skel – bezbarvé, hnědé a zelené. Skla byla použita ve formě skelných drtí, které byly louženy v demineralizované vodě při teplotě 60 °C po dobu 1-3 h a 1-60 dní. Z výsledků je patrné, že u všech testovaných skel byl potvrzen děj zpětné precipitace. Precipitáty se objevily jak na povrchu skel, tak i v loužicích roztocích. Rentgenová difrakce ukázala, že se vysrážely 2 typy zeolitů – zeolit X a zeolit SSZ-24. Dále byl určen způsob rozpouštění testovaných skel pomocí kinetického modelu vytvořeného na ÚSK VŠCHT Praha. Všechna testovaná skla se rozpouštěla inkongruentně. Možné precipitáty byly také určeny pomocí databáze FactSage®. Tyto teoreticky předpovězené precipitáty zhruba odpovídaly experimentálním výsledkům.

Koroze skel vodnými roztoky citrátů

Bc. Tereza Schreiberová (M1)

Školitel: prof. Ing. Aleš Helebrant, CSc.

Skla pro farmacii se převážně využívají k uchovávání roztoků. Při styku skel s roztokem může docházet k uvolňování složek ze skla, což může způsobit znehodnocení roztoku. Chemická odolnost proto hraje důležitou roli při výrobě skla používaného ve farmaceutickém průmyslu. Avšak normy dané platnou legislativou určené k hodnocení chemické odolnosti jsou převážně zkoušky proti destilované vodě. Tato práce se proto zabývala modelovým testováním drtí vybraných druhů skel proti běžně užívaným roztokům citrátu sodného a draselného při zvýšené teplotě (98, 80, 60 °C) po dobu 1-72 h a 2 měsíců. Ve výluzích bylo stanoveno množství vyloužené složky Si pomocí AAS, indikující rozpouštění skelné sítě. Změny na povrchu skel byly sledovány optickým mikroskopem. Z naměřených hodnot je zřejmé, že drtě loužené v roztocích citrátů korodovaly více než drtě loužené v destilované vodě. Všechny typy skel se významně rozpouštěly již ve slabém roztoku citrátu (1% vodný roztok). Korozivní účinky citrátů narůstaly s jejich vyšší koncentrací. Dlouhodobým působením citrátů na sklo za zvýšené teploty (60 °C) docházelo ve výluzích k tvorbě precipitátů ve formě hydratovaného SiO_2 nebo zeolitů (flörkeite a faujasite), jejichž složení bylo zjištěno RTG difrakcí.

Testování interakce drti bioskla s modifikovanou simulovanou tělní tekutinou

Bc. Eliška Sedláčková (M2)

Školitel: Ing. Diana Horkavcová, Ph.D.

Biomateriály jsou látky, které je možné využít k nahrazování poškozených či nevyvinutých tkání a orgánů. Nejdůležitějším předpokladem pro všechny materiály, které přijdou do kontaktu s tělním prostředím je biokompatibilita. Tímto pojmem rozumíme schopnost být přijat organismem a nevyvolat zánětlivé reakce. Biosklo řadíme do bioaktivních materiálů, pro které je typická schopnost indukce vzniku hydroxyapatitu (HAp) a vazba s okolní tkání. K testování bioaktivity se využívá *in vitro* test ISO 23317:2014, při kterém je materiál vystaven simulované tělní tekutině (SBF), do které je kvůli udržení pH přidán pufr TRIS. Z mé předchozí práce plyne, že pufr ovlivňuje tvorbu HAp a tím i výsledky *in vitro* testů. Byla pozorována detailní interakce bioskla a SBF s a bez TRISu v krátkých časových intervalech. Během sedmidenního statického *in vitro* testu byla v daných časech analyzována hmotnost a změna materiálu pomocí BET, OM, SEM/EDS, XRD a XRF. Byly odebírány výluhy roztoků pro sledování koncentrace iontů Ca^{2+} , $(\text{PO}_4)^{3-}$, Si^{4+} a bylo měřeno pH. Krystalická HAp vrstva se vytvořila pouze po interakci s pufrovaným roztokem, zatímco v nepufrovaném roztoku se vytvořila amorfni vrstva z Si, Ca a P. Tyto závěry potvrzuje i změna hmotnosti a nárůst specifického povrchu materiálu z pufrovaného roztoku.

Tvrlost dentálních materiálů

Bc. Martina Vitvarová (M2)

Školitel: doc. Ing. Alexandra Kloužková, CSc.

Anorganické nekovové materiály mají nezastupitelnou úlohu při výrobě zubních náhrad. Zvolit nejvhodnější materiál není vždy jednoduché, protože příliš tvrdá dentální náhrada může poškodit protilehlé přírodní zuby. Kromě keramiky se z anorganických materiálů ve stomatologii používají sádky ke zhotovení modelů náhrad. Pro jejich kvalitní opracování v zubních laboratořích je nutné, aby splňovaly vyšší nároky na pevnost oproti běžným sádkám. Cílem práce bylo hodnocení tvrdosti komerčně dostupných a laboratorně připravených biokeramických kompozitů (lithium disilikátových, leucitových a zirkoničitých), které jsou běžně používány pro korunkové náhrady. Zirkoničitá keramika vykazuje vysokou tvrdost a je zde riziko abraze antagonních zubů. Tento problém lze vyřešit navrstvením leucitového kompozitu na plně krystalické keramické jádro. Proto bylo provedeno měření tvrdosti laboratorně připravených leucitových kompozitů v závislosti na obsahu krystalické fáze. Tvrlost kompozitů IPS e.max CAD (6,57 GPa) a IPS Empress CAD (7,35 GPa) byla porovnána s tvrdostí přírodních zubů odlišného typu, stáří a stavu. V dílčím kroku byly také charakterizovány a hodnoceny dentální sádky typu II. Jejich tvrdost byla diskutována s ohledem na složení, velikost částic a předepsaný hydraulický koeficient.

Restaurování a konzervování skla a keramiky

MÍSTO: CHODBA ÚSK

KOMISE

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

Ing. Zuzana Zlámalová Cílová, Ph.D.

Ing. Karolína Pánová

Mgr. Romana Kirchnerová

MgA. Zita Brožková

Ljuba Svobodová

PROGRAM

09:00 **zahájení**

[Lucie Eberlová](#) (B2, doc. Ing. Alexandra Kloužková, CSc.)

Rekonzervace torza květníku

[Simona Francová](#) (B3, Ing. Zuzana Zlámalová Cílová, Ph.D.)

Konzervování korálek z archeologického výzkumu v Plaňanech

[Maria-Luisa Fronková](#) (B3, doc. Dr. Ing. Dana Rohanová)

Restaurování vitráže s motivem cheruba a ornamenty

[Emma Osifová](#) (B3, doc. Dr. Ing. Dana Rohanová)

Restaurování vitrážového medailonu z katedrály sv. Bartoloměje

[Eliška Pačesová](#) (B2, doc. Ing. Alexandra Kloužková, CSc.)

Rekonzervace nádoby na boční ohřev

[Ludmila Řeháková](#) (B1, doc. Ing. Alexandra Kloužková, CSc.)

Rekonzervace džbánu č.117/881

[Nikola Škodová](#) (B2, doc. Ing. Alexandra Kloužková, CSc.)

Rekonzervace džbánu č.198/88

Rekonzervace torza květníku

Lucie Eberlová (B2)

Školitel: doc. Ing. Alexandra Kloužková, CSc.

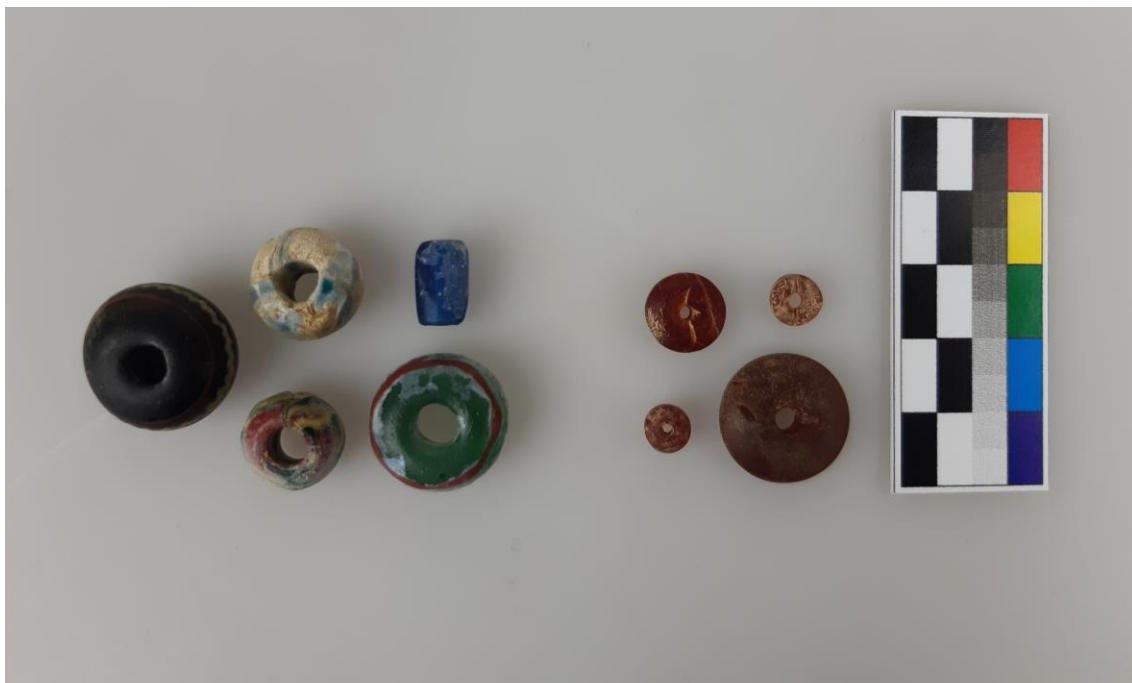
Převzatý historický objekt představuje torzo květníku se zateklou zelenomodrou glazurou, zhruba z 15. století. Objekt byl nalezen ve Schwarzenberském paláci v Praze kolem roku 2003. V témže roce pravděpodobně došlo i k jeho neodbornému zrestaurování, o kterém se nedochovaly žádné záznamy. Cílem práce byla rekonzervace květníku, která spočívala v restaurátorském průzkumu, v němž byly provedeny chemické (XRF) a mineralogické (XRD) analýzy složení střeptové hmoty a glazury spolu se stanovením parametrů hmoty. Na základě těchto analýz byl zhotoven restaurátorský záměr, který po schválení zadavatele zahrnoval tyto kroky: dekonzervaci lepených spojů za pomoci vlažné demineralizované vody, vyčištění jednotlivých střeptů pomocí demineralizované vody s vhodným detergentním prostředkem (Spolapon AOS 146), slepení nádoby reverzibilním adhezivem CLEOTOO, trvalou (Lascaux Hydrogrund 759) a dočasnou (separátor S značky Lukopren®) separaci střeptové hmoty a doplnění ztrát sádkou typu 2 zn. Alabaster Plaster z důvodu dosažení vyšší pevnosti a stability nádoby. Po celou dobu restaurování byla prováděna fotografická dokumentace stavu květníku. Po dokončení práce byla vytvořena restaurátorská zpráva, která je součástí ošetřovaného objektu.

Konzervování korálek z archeologického výzkumu v Plaňanech

Simona Francová (B3)

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

Náplní práce bylo konzervování korálek z mladší doby římské. V červnu letošního roku byl na archeologickém nalezišti v Plaňanech odkryt unikátní ženský hrob s bohatou výbavou v podobě milodarů. Mimo jiné zde byly objeveny skleněné a jantarové korále, které tvořily náhrdelník zemřelé. Liší se tvarem, velikostí i přítomností dekoru. Skleněné korále byly převážně vytvořeny navíjením, zatímco jantarové korále byly provrtány a obroušeny. Všechny předměty byly znečištěny od zeminy, proto bylo nutné je očistit a v případě rozbití na fragmenty slepit. U korálek z jantaru či ze skla s pokročilou korozí materiálu byla provedena konsolidace pomocí akrylátové pryskyřice Paraloid B-72 pro celkové zpevnění materiálu. V rámci restaurátorského průzkumu bylo sklo analyzováno Ramanovou spektroskopií, pomocí níž byla identifikována kaliva, a SEM/EDS analýzou, kterou bylo zjištěno chemické složení. Pro analýzu jantaru byla zvolena infračervená spektroskopie. Podle výsledků analýz lze skla charakterizovat jako sodno-vápenatá (natronová), v případě jantaru se jedná o baltský typ. Všechny předměty byly po převzetí, očištění i konsolidaci detailně zdokumentovány.



Restaurování vitráže s motivem cheruba a ornamenty

Maria-Luisa Fronková (B3)

Školitel: doc. Dr. Ing. Dana Rohanová

Předmětem restaurování byla vitráž z 19. století. Restaurování proběhlo v ateliéru Umělecké sklenářství Jiříčka-Coufal s.r.o., kde byla vitráž uložena v depozitáři. Původní umístění vitráže není známo. Při převzetí byla vitráž silně znečištěna prachem i dalšími nečistotami z místa původního umístění. Při volbě vhodných postupů restaurování byla určující analýza rentgenovou fluorescenční spektrometrií (XRF), kterou bylo zjištěno, že sklo je sodno-vápenaté. Pozorování pomocí optické mikroskopie potvrdily, že sklo není výrazně poškozené korozními procesy. Skleněné fragmenty byly vyrobené ručně, válcováním. Dekory byly malovány sklářskými krycími vypalovacími barvami. Během restaurování byly skleněné fragmenty vyjmuty z nestabilních olověných profilů a očištěny mokrou cestou pomocí detergentů s následným důkladným oplachem vodou. Chybějící fragmenty byly doplněny sklem odpovídající barevnosti a struktury. Fragmenty vitráže byly nakonec vsazeny do nové sítě olověných profilů a ty pak spojeny cínovou pájkou. Závěrečnou fází bylo čištění vitráže. Průběh restaurování byl fotograficky dokumentován.

Restaurování vitrážového medailonu z katedrály sv. Bartoloměje

Emma Osifová (B3)

Školitel: doc. Dr. Ing. Dana Rohanová

Náplní práce bylo restaurování medailonu vitráže z katedrály sv. Bartoloměje v Plzni. Původní vitráž byla zhotovena ve 20. století podle návrhů z dílen Maxmiliána Pirnera, Františka Urbana, Josefa Mandla, Jaroslava Honzíka a Jakuba Obrovského. Vitráž, jejíž skelněné části byly vyrobené technikou foukání a lehání, byla před převzetím uložena v ateliéru. Byla silně znečištěna prachem a dalšími nečistotami, kterým byla vystavena v exteriéru. Restaurátorské práce začaly její celkovou dekompozicí. Vyjmutá skla byla čištěna mokrou cestou, pomocí detergentu. Pro lepší rozhodování o následných postupech rozhodly analýzy skla. Byly provedeny metodou SEM/EDS na barevných fragmentech, které již nebylo možné ve vitráži použít. Materiálový průzkum odhalil, že na vitráži byla použita poměrně odolná sodno-vápenatá a také sodno-olovnatá skla. Příliš fragmentární části vitráže byly nahrazeny novými částmi z moderního skla stejné barevnosti. Posledním krokem restaurování bylo zasazení skel do nového olověného profilu. Restaurátorské práce byly provedeny v ateliéru Vitraj.



Rekonzervace nádoby na boční ohřev

Eliška Pačesová (B2)

Školitel: doc. Ing. Alexandra Kloužková, CSc.

Předmětem této práce byla rekonzervace keramické nádoby na boční ohřev ze Schwarzenberského paláce. Jednalo se o neglazovaný, na kruhu točený hrnec s uchem pocházející z 15. až počátku 16. století. Předmět byl již v minulosti restaurován a při převzetí se skládal z torza, které bylo sestaveno z patnácti střepů, a z dalších třinácti střepů volných. Fragmenty střepové hmoty byly nejprve podrobeny mokrému čištění vodou a poté, co byla vyhledána poloha jednotlivých střepů, byla nádoba slepena akrylátovou disperzí K 498. Následovalo doplnění ztrát dentální sádrou Alamo S, čemuž předcházela trvalá separace střepové hmoty 50 hm.% roztokem K 498 a dočasná separace vodním separátorem značky Lukopren. Sádrové doplňky byly retušovány tak, aby kopírovaly původní tvar nádoby. Použity byly výhradně reverzibilní materiály a celý proces byl fotodokumentován. Součástí zásahu byl také restaurátorský průzkum, při kterém byly provedeny analýzy složení (XRF a XRD), optická mikroskopie a stanovení vlhkosti, nasákavosti, objemové hmotnosti, zdánlivé hustoty a zdánlivé pórovitosti.

Rekonzervace džbánu č.117/881

Ludmila Řeháková (B1)

Školitel: doc. Ing. Alexandra Kloužková, CSc.

Prezentovaná práce mapuje postup rekonzervace historického džbánu ze začátku 16. století. Střepy džbánu byly nalezeny v odpadní jímce Schwarzenberského paláce a následně došlo k zrestaurování předmětu. Postupem času adheziva degradují a bylo nutné přistoupit k rekonzervaci předmětu. Střepy byly v poměrně dobrém stavu, ale bylo nutné plášť nádoby opětovně sestavit. V rámci práce byl restaurovaný předmět zasazen do historického kontextu vztahujícího se k objektu samotnému a místu jeho nalezení. Dále se práce zaměřuje na použití vhodných metod a analýz k identifikaci složení střepevé hmoty a glazury předmětu. Celá práce je doprovázena průběžnou fotodokumentací, která je nezbytná při provádění restaurátorského zásahu. Závěrem mé práce bylo stanovení podmínek pro uložení předmětu a jeho následnou manipulaci.

Rekonzervace džbánu č.198/88

Nikola Škodová (B2)

Školitel: doc. Ing. Alexandra Kloužková, CSc.

Předmětem rekonzervace byl džbán z období 2. poloviny 15. století až počátku 16. století. Nádobu byla nalezena v jímce ve Schwanzerberském paláci. Džbán byl dodán v částečně slepeném stavu s přiloženými volnými fragmenty. Pro analýzu střepové hmoty a určení vhodných pomocných materiálů k restaurátorskému zásahu byly odebrány vzorky střepů. Bylo provedeno stanovení kritérií hutnosti, chemického a mineralogického složení. Restaurátorským záměrem schváleným zadavatelem bylo očištění nádoby, dolepení volných fragmentů a doplnění ztrát sádkou pro zvýšení stability nádoby. Veškerá práce a zákroky byly provedeny v souladu s etikou restaurování za použití reverzibilních materiálů.

Ústav chemie pevných látek (108)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Eva Bedrnová

SEZNAM SEKČÍ

1. [Analýza a vlastnosti léčiv](#)

Analýza a vlastnosti léčiv

MÍSTO: A31

KOMISE

prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc. (předseda)

doc. Ing. Barbora Doušová, CSc.

doc. Dr. Ing. Michal Hušák

Ing. David Koloušek, CSc.

RNDr. Alexandr Jegorov CSc.

Ing. Michal Šimek, Ph.D

Ing. Eva Bedrnová

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Bc. Milan Angelis](#) (M1, doc. Ing. Barbora Doušová, CSc.)

Využití odpadních stavebních kalů jako potenciálních aditiv do zemědělských půd

09:15 [Bc. Adriana Dombrovská](#) (M2, Ing. Jan Čejka, Ph.D.)

Charakterizace solí tropia a exotropia pomocí rentgenové difrakce na monokrystalu

09:30 [Bc. František Fňukal](#) (M1, doc. Dr. Ing. Michal Hušák)

Využití softwaru checkCIF-DFT pro predikci krystalové struktury.

09:45 [Bc. Veronika Linstcer](#) (B1, Ing. Jan Čejka, Ph.D.)

Krystalizační screening 2-chloroadeninu

10:00 [Bc. Kateřina Maxová](#) (M2, doc. Ing. Barbora Doušová, CSc.)

Příprava zeolitového sorbentu modifikací manganem a jeho porovnání s komerčně dostupnými sorbenty

10:15 [Bc. Tomáš Morys](#) (M1, Ing. Jan Čejka, Ph.D.)

Krystalizační screening imatinibu mesylátu

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

Adsorpce toxického chromanu na původní a modifikované sorbenty

10:45 [Bc. Tereza Škardová](#) (M1, prof. Ing. František Kovanda, CSc.)

Interkalace ezetimibu do hydrofobizovaného podvojného vrstevnatého hydroxidu

11:00 [Bc. Jakub Žajdlík](#) (M2, Ing. Václav Eigner, Ph.D.)

Aniontové výměny elektronově bohatých isothiuroniových solí

Využití odpadních stavebních kalů jako potenciálních aditiv do zemědělských půd

Bc. Milan Angelis (M1)

Školitel: doc. Ing. Barbora Doušová, CSc.

Odpadní stavební kaly jsou látky vznikající při výrobě stavebních hmot. Všechny procesy, jež se využívají pro znovuzpracování nebo recyklaci odpadních stavebních kalů, jsou poměrně efektivní, ale nedostačující pro udržitelný rozvoj, proto se práce zabývá zkoumáním využití tohoto odpadu jako možného aditiva do zemědělských půd pro (i) zlepšení jejich vodního režimu a (ii) případné zvýšení obsahu látek významných pro růst rostlin. V první části práce byl sledován vliv přídavku odpadních kalů z výroby betonu a umělého kamene do půdy na její nasákavost a retenci vody. K tomuto experimentu byly využity dva odlišné typy standardních půd od německé firmy Lufa Speyer a směsi zmíněných standardních půd s 1% přídavkem odpadních kalů a komerčního klinoptilolitu od firmy Zeocem (referenční materiál ke kalům). V druhé části práce se ověřoval potenciálně příznivý účinek přídavku kalu do půdy na obsah prvků nutričně významných pro rostliny. K tomuto účelu byly provedeny výluhové testy pro samostatné standardní půdy a půdy s 1% přídavkem kalů a kalů obohacených vybranými ionty. Následně byl stanoven obsah vybraných iontů (Ca^{2+} , NH_4^+ , PO_4^{3-} , Al^{3+}) ve výluzích pomocí UV-VIS spektrofotometrie a atomové absorpční spektroskopie.

Charakterizace solí trospia a exotrospia pomocí rentgenové difrakce na monokrystalu

Bc. Adriana Dombrovská (M2)

Školitel: Ing. Jan Čejka, Ph.D.

Trospium chlorid je farmaceutická sůl, která je používána v léčivých přípravcích určených k léčbě syndromu hyperaktivního močového měchýře. Exotrospium chlorid je jejím epimerem, předpokládá se, že má podobný účinek, není ovšem dostatečně prostudován. V literatuře byla doposud popsána struktura pěti solí trospia a šesti solí exotrospia. Ve své práci jsem připravila prášky tří nových solí trospia a exotrospia a dvou nových forem známých solí trospia a exotrospia. Z těchto prášků jsem následně připravila krystaly rekrystalizací z vodných roztoků. Poté jsem se věnovala analýze těchto krystalů. Analýza byla provedena pomocí rentgenové difrakce na monokrystalu. Ta byla využita k řešení struktury nově získaných forem. Struktura solí byla upřesňována v programu Crystals. Vyřešené struktury nových forem již popsaných solí byly následně porovnány se známými formami.

Využití softwaru checkCIF-DFT pro predikci krystalové struktury.

Bc. František Fňukal (M1)

Školitel: doc. Dr. Ing. Michal Hušák

Ambiciózním cílem moderní krystalografie je schopnost spolehlivě predikovat krystalovou strukturu. Jediným vstupním parametrem této predikce je přitom pouze znalost strukturního vzorce studované látky. Cílem je předpovědět přirozeně se vyskytující krystalová uspořádání, a to i při uvažování fenoménu polymorfismu. V dnešní době je schopnost predikce krystalové struktury limitována vysokou výpočetní náročností a nedostatečnou spolehlivostí. Tato oblast však zaznamenala v posledních zhruba 20 letech značný pokrok. Tato práce navazuje na předchozí práci, ve které byl vyvíjen program umožňující provedení DFT výpočtu na krystalových strukturách. V této práci byl vyvíjený program využit na vyhodnocení návrhů krystalových struktur 3 látek ze 7. ročníku slepého testu predikce krystalové struktury. Výpočtem mřížkové energie návrhů struktur lze odvodit jejich stabilitu a vybrat nejlepší kandidáty. Pro tento postup byla využita metoda DFT, konkrétně program Quantum ESPRESSO, funkcionál PBE a disperzní korekce Grimme DFT-D3. Práce dále diskutuje obdržené výsledky a porovnává je se správnými výsledky a výsledky vedoucího této práce, doc. Dr. Ing. Michal Hušáka, který pro vyhodnocení použil DFT program CASTEP, funkcionál rSCAN a disperzní korekci MBD.

Krystalizační screening 2-chloroadeninů

Bc. Veronika Linstcer (B1)

Školitel: Ing. Jan Čejka, Ph.D.

Znalosti struktury aktivních farmaceutických substancí jsou nezbytné pro většinu současně vyráběných léčiv. Kromě struktury samotné API je důležité mít informace i o struktuře látek, které se podílí na její syntéze a meziproduktech výroby. 2-chloradenin je příkladem takových látek. Cílem této práce bylo stanovení zdánlivě rozpustnosti a screening 2-chloradeninu. 2-chloradenin je hlavním katabolitem Cladribinu a meziproduktem syntézy Clofaribinu, obě léčiva se úspěšně využívají v léčbě různých druhů leukemie. Zkoumání rozpustnosti 2-chloradeninu ukázalo, že je téměř nerozpustný v běžně dostupných rozpouštědlech, nicméně se podařilo připravit několik soli 2-chloradeninu, se kterými byly provedeny další zkoušky rozpustnosti. Soli kyselin mravenčí a octové vznikly ve formě prášku. Reakcí s kyselinou chlorovodíkovou vznikla sůl 2-chloradenin hydrochlorid vykryštovala ve formě monokrystalu. Ke stanovení struktury této látky byla využita metoda rentgenové difrakce na monokrystalu. Je důležité zmínit, že struktura 2-chloradeninu ani jeho derivátů ještě doposud nebyla popsána v literatuře, proto struktura získané soli byla porovnána s publikovanou strukturou adenin dihydrochloridu.

Příprava zeolitového sorbentu modifikací manganem a jeho porovnání s komerčně dostupnými sorbenty

Bc. Kateřina Maxová (M2)

Školitel: doc. Ing. Barbora Doušová, CSc.

Práce se zabývá přípravou přírodního zeolitu modifikovaného manganem pro získání selektivního sorbentu aplikovatelného v dekontaminačních technologiích. Cílem bylo získat stabilní materiál s maximálním množstvím povrchově vázaného manganu při co nejnižším surovinovém a energetickém zatížení. Pro experimenty byl použit slovenský přírodní zeolit draselného typu. Připravený zeolit s nejvyšším obsahem manganu byl testován na adsorpci kationtů Cd^{2+} , Zn^{2+} a Pb^{2+} z vodných roztoků. Sorpční zkoušky byly provedeny i s několika komerčně dostupnými sorbenty. Obsah zachyceného manganu byl stanoven pomocí RTG fluorescenční spektrometrie. Zbytkové koncentrace kationtů v roztocích byly analyzovány atomovou absorpční spektrometrií.

Krystalizační screening imatinibu mesylátu

Bc. Tomáš Morys (M1)

Školitel: Ing. Jan Čejka, Ph.D.

Práce je zaměřena na přípravu a charakterizaci nových forem léčivé látky imatinibu mesylátu, jenž je v medicíně indikován k léčbě leukémie. Výchozí formou imatinibu byl α -polymorf, jehož zdánlivá rozpustnost byla stanovena ve 12 polárních rozpouštědlech. Pro stejné navážky imatinibu byla experimentálně stanovena výtěžnost postupů vedoucí k přípravě β -formy. Další částí práce bylo studium reprodukovatelnosti patentových příprav nových forem při změně výchozího polymorfu, které bylo úspěšné ve 3 případech z 6. Součástí práce byl i kokrystalizační screening s využitím 11 kokrystalizačních partnerů metodou společného mletí s přídavkem rozpouštědla. U 7 příprav byl pozorován vznik pevné fáze, z nichž 5 mohlo být analyzováno pomocí práškové rentgenové difrakční analýzy, jejíž výsledky poukazují na pravděpodobný vznik nových forem imatinibu. Mřížkové parametry monokrystalů vzniklých v nasycených roztocích byly shodné s parametry β -polymorfu, z čehož lze usoudit, že tato forma je za normálních podmínek stabilnější, než výchozí polymorf α .

Adsorpce toxického chromanu na původní a modifikované sorbenty

Bc. Tereza Musilová (M2)

Školitel: doc. Ing. Barbora Doušová, CSc.

Má práce se zabývá možnostmi odstranění toxického chromanu pomocí původních anorganických i organických sorbentů, a jejich forem povrchově modifikovaných železem. Testovanými sorbenty byly zástupci aluminosilikátů (kaolin sedlec, bentonit kadaňský, klinoptilolit) a biochar. Sorpce probíhala z modelového roztoku chromanu o koncentraci chromu 0,5 mmol/l simulující silně kontaminované vodné systémy. Zbytková koncentrace chromu v roztoku byla stanovena metodou UV/Vis spektrofotometrie, na základě vlastního zabarvení roztoku. Pro výpočet parametrů sorpce (teoretické sorpční kapacity a konstanty adsorpčního děje) byl použit Langmuirův model. Z dosavadních výsledků vyplývá, že účinná sorpce chromanu probíhala výhradně na povrchově modifikované sorbenty.

Interkalace ezetimibu do hydrofobizovaného podvojného vrstevnatého hydroxidu

Bc. Tereza Škardová (M1)

Školitel: prof. Ing. František Kovanda, CSc.

Ezetimib je léčivo špatně rozpustné ve vodě, které se užívá ke snížení vysoké hladiny cholesterolu v krvi. Práce se zabývá interkalací ezetimibu do podvojného vrstevnatého hydroxidu, což může ovlivnit zpětné uvolnění léčiva ve vodných roztocích. Podvojný vrstevnatý hydroxid Mg-Al v dusičnanové formě byl připraven koprecipitační reakcí dusičnanů Mg a Al pod ochrannou dusíkovou atmosférou a následně delaminován ve formamidu za vzniku koloidní disperze. Přímá interkalace ezetimibu z roztoku v ethanolu metodou obnovení vrstevnaté struktury nebyla úspěšná. Proto byl připraven meziprodukt s hydrofobizovaným mezivrstvím, kdy obnovení vrstevnaté struktury bylo docíleno přidáním koloidní disperze ve formamidu do vodného roztoku cholátu sodného. Při přípravě meziproduktu byla použita různá množství cholátu vzhledem k aniontově-výměnné kapacitě podvojného vrstevnatého hydroxidu (25, 50, 75 a 100 %). Interkalace cholátu do mezivrství byla potvrzena práškovou rentgenovou difrakcí. Připravené meziprodukty byly přidány do roztoku ezetimibu v ethanolu a třepány 48 hodin při 40 °C. Obsah ezetimibu ve finálních produktech byl stanoven pomocí UV/vis spektrofotometrie.

Aniontové výměny elektronově bohatých isothiuroniových solí

Bc. Jakub Žajdlík (M2)

Školitel: Ing. Václav Eigner, Ph.D.

Farmaceutické soli farmaceutických substancí se využívají a formulují z důvodu jejich vhodnějších vlastností. Soli jsou voleny především díky jejich lepší rozpustnosti, nicméně je nutno brát v potaz i změnu některých jiných vlastností, jako je například stabilita, toxicita, či nevhodné vlastnosti pro výrobní operace. Nesteroidní analgetika Indomethacin a Diklofenak se podle BCS klasifikace řadí do skupiny II, která sice snadno proniká biologickými membránami, nicméně jejich limitujícím faktorem pro medicínské využití je disoluce ve vodných rozpouštědlech. Pomocí kationtové výměny lze, za využití stříbrných solí těchto látek a protiiontů ve formě halogenidů, připravit soli těchto látek pomocí srážecí reakce s mnohými organickými kationtovými protiionty. K charakterizaci takto připravených solí bude využita rentgenová difrakce na monokrystalu, kdy dojde i k řešení struktury z naměřených dat.

Ústav organické chemie (110)

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

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

Ing. Radek Jurok, Ph.D. - tajemník

doc. Ing. Igor Linhart, CSc.

Ing. Petra Cuřínová, Ph.D.

Ing. Robert Klvaňa , Ph.D. (Apigenex)

Ing. Martin Horčic, Ph.D. (Biomedica)

PROGRAM

09:15 [Jakub Schimmer](#) (B3, Ing. Petra Ménová, Ph.D.)

Synthesis of biphenyl mannosides and determination of their affinity for DC-SIGN receptor

09:30 [Tereza Kubátová](#) (B3, Mgr. et Mgr. Pavla Perlíková, Ph.D.)

Syntéza konjugátů callunenu

09:45 [Jakub Vokrouhlický](#) (B3, prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.)

Substráty pro allylovou nukleofilní fluoraci

10:00 [Marie Rozmušová](#) (B3, Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.)

Syntéza analogů flavinových kofaktorů

10:15 Coffee Break

10:30 [Jakub Žváček](#) (B3, Ing. Ondřej Kunderát, Ph.D.)

Syntéza multivalentních glykokonjugátů

10:45 [Tereza Šindelářová](#) (B3, Ing. Martin Krupička, Ph.D.)

Syntéza léčiva Enzalutamidu vycházející z karbonyldiimidazolu

11:00 [Miroslav Stroka](#) (B2, Dr. habil. Ullrich Jahn)

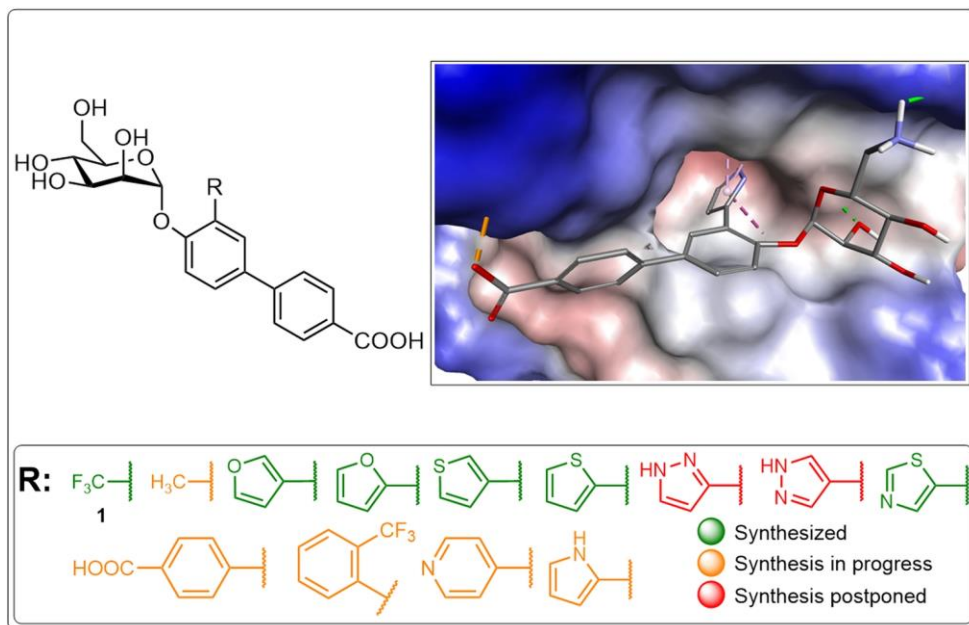
Towards the total synthesis of ampelopsin F

Synthesis of biphenyl mannosides and determination of their affinity for DC-SIGN receptor

Jakub Schimmer (B3)

Školitel: Ing. Petra Ménová, Ph.D.

DC-SIGN is a carbohydrate-binding receptor involved in a number of vital physiological processes. Since this receptor is one of the first entities interacting with pathogens, its inhibition could be beneficial for treating various diseases (HIV/AIDS, Hepatitis C, etc.). DC-SIGN's natural ligand, mannose, has only a weak affinity, which nature overcomes by multivalency. In order to improve its affinity and drug-like properties, it is necessary to extend the interactions beyond the shallow and hydrophilic binding site. A recent study identified biphenyl mannoside 1 as a promising DC-SIGN inhibitor. Computer modelling suggested that its affinity might be increased by introducing various substituents into position 2 of the proximal phenyl ring to fit into the neighbouring binding pocket. The aim of this project is to synthesize a library of biaryl mannosides and to screen them DC-SIGN affinity. In the first part of the project, a library of 13 compounds is being prepared. Next, several biophysical methods were used to determine their affinity. HSQC experiments helped with both quantitative estimation of affinity (K_D values) and with binding domain mapping. A GCI assay was carried out to validate the K_D values.

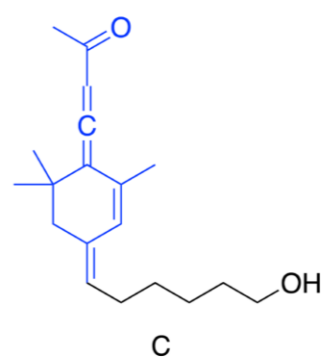
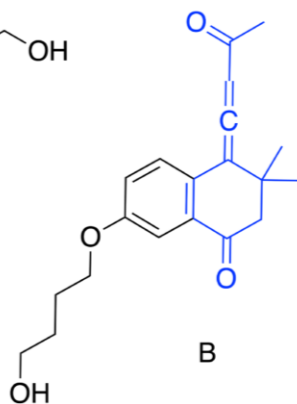
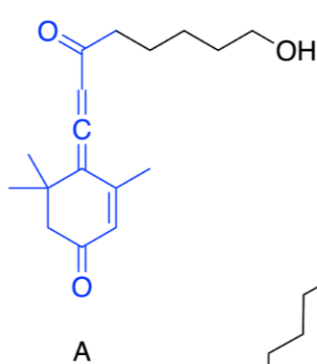
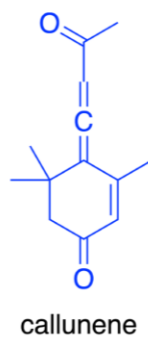


Syntéza konjugátů callunenu

Tereza Kubátová (B3)

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

Tato práce pojednává o organické syntéze konjugátů callunenu. Callunen inhibuje aktivitu parazita *Crithidia bombi* odtržením jeho bičíku. Mechanismus účinku zatím ale není znám. Na nasyntetizované a biologicky aktivní konjugáty bude následně připojena fluorescenční značka s cílem zjištění tohoto mechanismu.

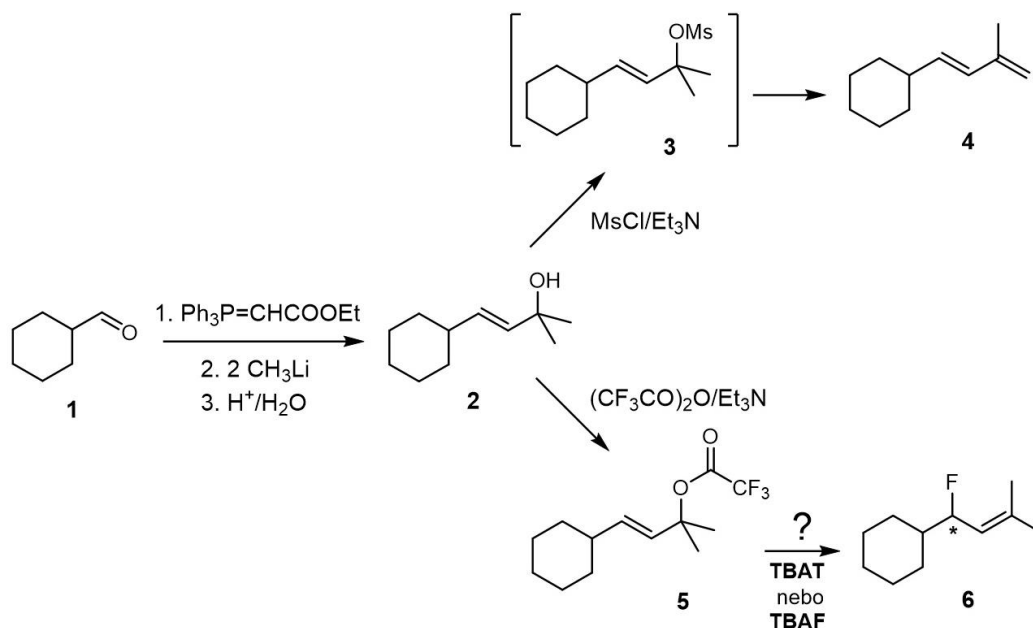


Substráty pro allylovou nukleofilní fluoraci

Jakub Vokrouhlický (B3)

Školitel: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Nukleofilní fluorace je významnou metodou pro přípravu fluorovaných farmak. Přes rostoucí roli chirálních sloučenin v medicíně je asymetrická nukleofilní fluorace dosud velmi málo prozkoumána, výjimkou jsou reakce využívající homogenní katalýzy nebo organokatalýzy. Naše laboratoř pracuje na vývoji chirálních nukleofilních fluoračních činidel na bázi difluorsilikátů nebo difluorimidazolidinů. Cílem mé práce bylo připravit substráty pro asymetrickou nukleofilní fluoraci s allylovým přesmykem, při níž vzniká nové stereogenní centrum. Nejprve jsem syntetizoval 4-cyklohexyl-2-methylbut-3-en-2-ol **2** z cyklohexylkarbaldehydu **1** pomocí Wittigovy reakce následované alkylací methyllithiem. Alkohol **2** jsem se pokusil převést na mesylát **3** reakcí s methansulfonylchloridem, ale vzniklý mesylát spontánně eliminoval na dien **4**. Za analogických reakčních podmínek jsem připravil odpovídající trifluoracetát **5** reakcí alkoholu **2** s trifluoracetanhydridem. S esterem **5** jsem provedl modelové fluorace činidly TBAF a TBAT (tetrabutylamonium-trifenyldifluorsilikátem), v případě druhého činidla byla získána zatím neznámá fluorovaná látka **6**.

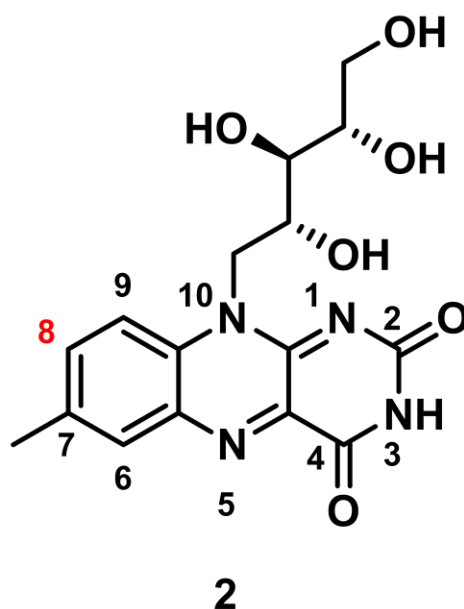
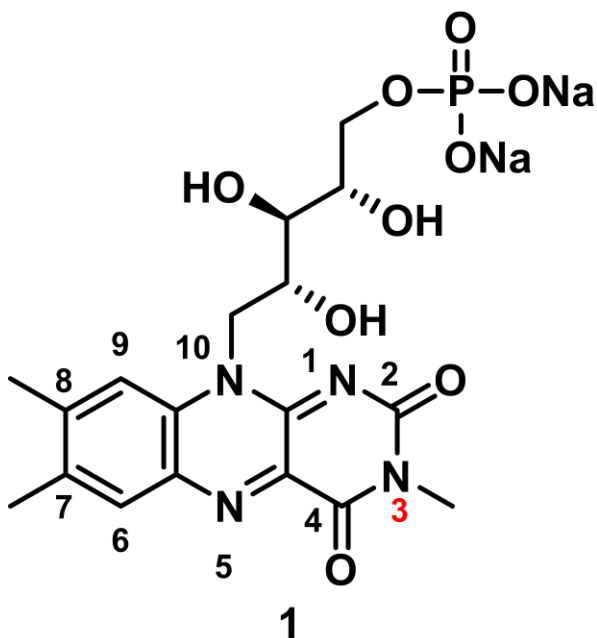


Syntéza analogů flavinových kofaktorů

Marie Rozmušová (B3)

Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.

Flaviny jsou rozsáhlou skupinou biologicky aktivních látek, které fungují zejména jako biokatalyzátory. Uplatňují se v mnoha redoxních dějích díky své schopnosti jedno- i dvouelektronových redukci/oxidaci, schopnosti fotoexcitace a existenci mnoha termodynamicky či kineticky stabilních stavů. Nejznámějšími příklady jsou riboflavin - vitamin B2 a FMN, jeho fosforylovaná forma. Cílem mé práce je syntetizovat deriváty riboflavinu, na kterých bude modelována funkce flavoenzymů v biologických systémech. V této chvíli mám připravený derivát FMN s methylovou skupinou v poloze 3 (1). Tento methyl brání četným nevazebným interakcím, které jsou klíčové jak pro ukotvení v enzymu, tak pro reakci se substrátem. Mým druhým produktem je derivát riboflavinu bez methylové skupiny v poloze 8 (2). Tato skupina je klíčová pro kovalentní ukotvení v enzymu pomocí nukleofilních aminokyselinových zbytků v bílkovinné části enzymu.

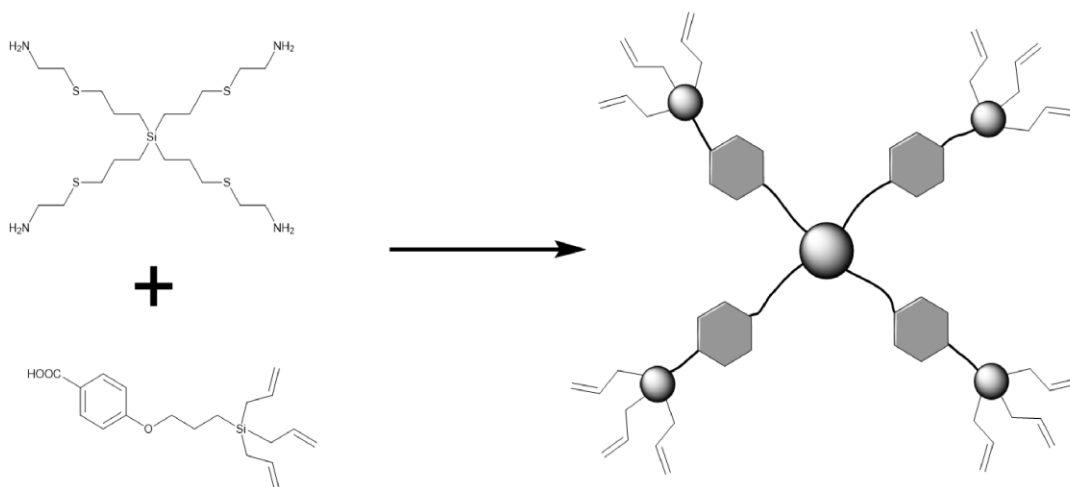


Syntéza multivalentních glykokonjugátů

Jakub Žváček (B3)

Školitel: Ing. Ondřej Kunderát, Ph.D.

S vývojem nových léčiv je důležitou otázkou také jejich cílená doprava. Moderním přístupem je transport pomocí nanočástic. Nejčastěji využívanými nanočásticemi jsou v tomto oboru lipozomy, které však mají dvě hlavní nevýhody: nízkou stabilitu a omezené možnosti modifikace. Proto se pozornost upíná na vývoj nových nanočásticových nosičů léčiv, kterými jsou mimo jiné dendrimery. Dendrimery jsou polymerní nanočástice s přesně definovanou chemickou strukturou a s možností její modifikace. Nesou velké množství periferních skupin, díky čemuž se může projevit tzv. „multivalentní efekt“ a dendrimery tak mohou být dobře cíleny v organismu. V rámci této bakalářské práce je vyvíjena metodika pro přípravu nového typu dendrimerů. Tato metodika vychází ze čtyřvalentního jádra, na něž budou pomocí amidického couplingu navázány dendritické klíny nesoucí allylové skupiny. Tyto allyly mohou být poté použity pro výstavbu nové generace dendrimeru, nebo mohou být využity pro přímé navázání periferních sacharidových jednotek. Výhodou předkládané syntézy je její modularita. Zvláště pak možnost volby dendritického klínu, který bude na jádro nebo periferní skupiny vázán, ale také možnost volby periferních skupin.

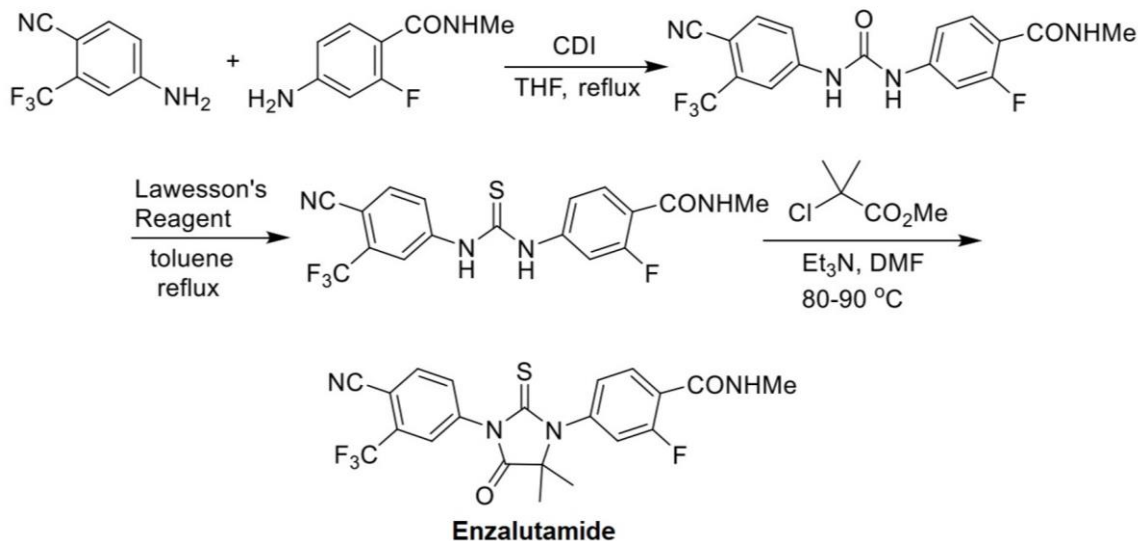


Syntéza léčiva Enzalutamidu vycházející z karbonyldiimidazolu

Tereza Šindelářová (B3)

Školitel: Ing. Martin Krupička, Ph.D.

Enzalutamid je nesteroidní antiandrogenní léčivo druhé generace, které se využívá při léčbě kastročně rezistentního karcinomu prostaty. Působí jako inhibitor androgenních receptorů, čímž zabráňuje nadměrné genové expresi a potlačuje tím tak proliferaci rakovinných buněk. V roce 2020 se umístil mezi prvních 20 celosvětově nejprodávanějších léčiv. Cílem této práce je vyvinout metodu přípravy tohoto léčiva vycházející z karbonyldiimidazolu s využitím syntézy v pevné fázi, tedy bez využití organických rozpouštědel, která jsou při reakcích významným zdrojem odpadu. Pro srovnání je souběžně prováděna také obvyklá syntéza v kapalně fázi. První reakční krok vedoucí k asymetricky substituované močovině byl úspěšně zrealizován v rozpouštědle. Zdárné převedení syntézy do pevné fáze umožní snížit náklady na výrobu léčiva a také realizovat ekologicky méně náročný proces.



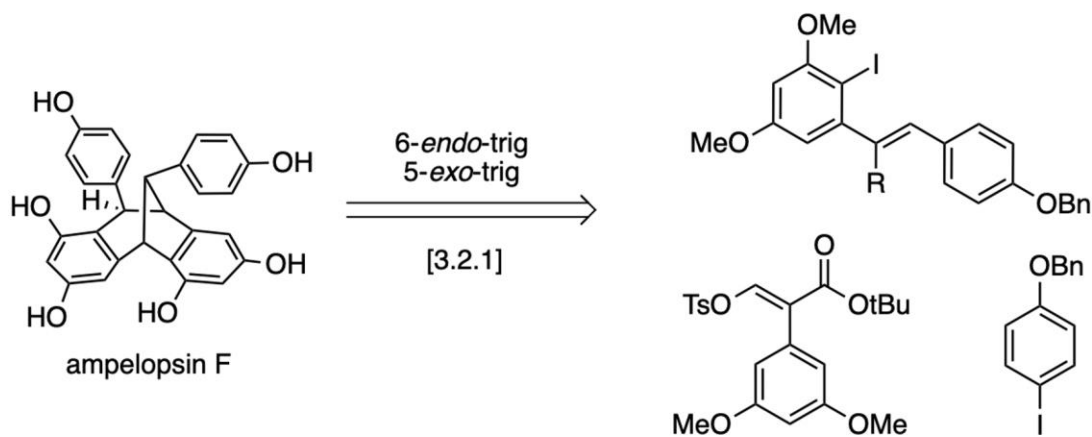
Towards the total synthesis of ampelopsin F

Miroslav Stroka (B2)

Školitel: Dr. habil. Ullrich Jahn

Ampelopsin F belongs to a growing class of polyketides distributed in *Vitaceous* plants.¹ This molecule has various biological properties such as antimalarial activity² and hepatoprotective function.³ Infrequent distribution of ampelopsin F leads to inefficient extractability from Nature. With respect to further biological evaluation, a short and efficient approach towards this challenging molecule is demanded. The total synthesis is envisaged by tandem reaction consisting of two consecutive 1,4-additions and subsequent oxidation reactions to construct 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.



Organická chemie bakalářská B2

MÍSTO: ZASEDACÍ SÍŇ DĚKANÁTU FCHT

KOMISE

prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc. (předseda)

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

Ing. Václav Kozmík, CSc.

Mgr. et Mgr. Pavla Perlíková, Ph.D.

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

Mgr. Tomáš Reitschmied (Avantor)

PROGRAM

09:15 [Matúš Tomčo](#) (B2, Ing. Petr Beier, Ph.D.)

α -Fluorinated azides as potential substrates for bioorthogonal chemistry

09:30 [Zuzana Abdelfattah](#) (B3, Ing. Eva Svobodová, Ph.D.)

7-Substituované isoalloxaziny s dusíkatou funkční skupinou

09:45 [Andrea Lavičková](#) (B3, doc. Ing. Michal Kohout, Ph.D.)

Nové deriváty helicenů pro syntézu materiálů vykazujících cirkulárně polarizovanou luminescenci

10:00 [Pavel Říkovský](#) (B1, None)

Příprava prekurzorů makrocyclických analogů pepstatinu A

10:15 Coffee Break

10:30 [Martin Brokeš](#) (B3, Ing. Petra Ménová, Ph.D.)

Quinoxalinone-based DC-SIGN inhibitors

10:45 [Lucie Hlaváčková](#) (B3, Ing. Martin Krupička, Ph.D.)

Syntéza derivátů thiohydntoinu vycházející z thiomočoviny

11:00 [Anna Velebová](#) (B2, prof. Andrea Brancale, Ph.D.)

Studium supramolekulárních interakcí methyl di-N,N'-diacetyllaktosaminidu s biomedicínsky významnými lidskými galektiny

11:15 [Kryštof Malý](#) (B3, Ing. Markéta Rybáčková, Ph.D.)

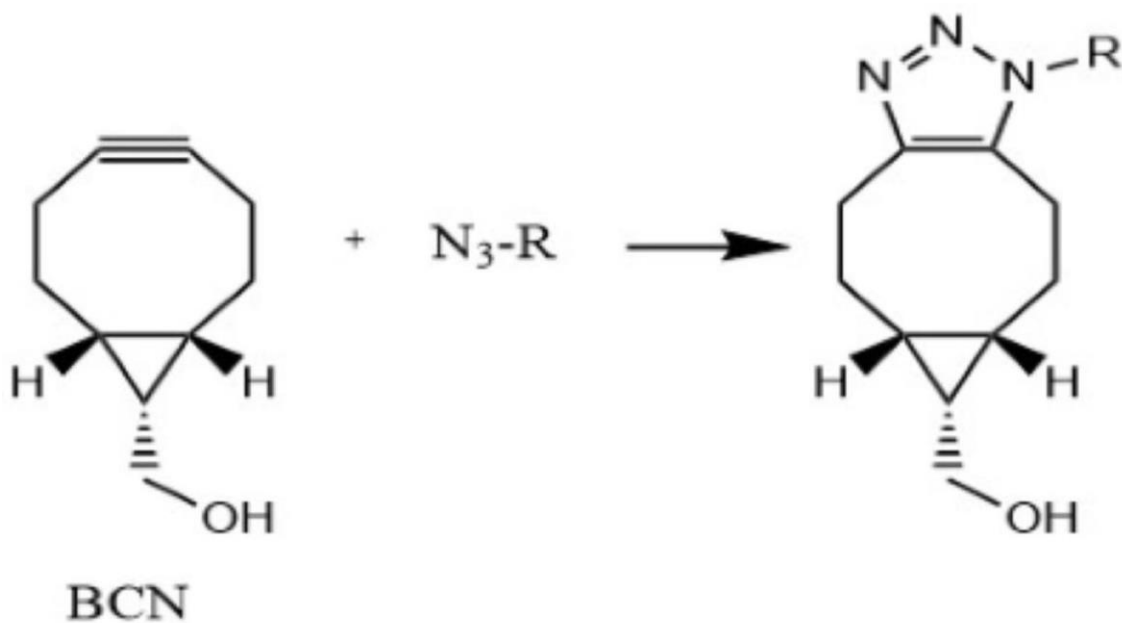
1,5-Disubstituované anthraceny jako prekurzory chirálních triptycenů

α -Fluorinated azides as potential substrates for bioorthogonal chemistry

Matúš Tomčo (B2)

Školitel: Ing. Petr Beier, Ph.D.

Strain promoted azide-alkyne cycloaddition (SPAAC) is an important tool for investigation of biomolecules behaviour *in vivo*. For this, the reaction must meet strongly restrictive criteria – it needs to be selective, biocompatible and have fast reaction kinetics. Over the past years a broad library of strained alkynes has been developed, while azides used remained mostly the same. The aim of this work is to show, that α -fluorinated azides, recently synthesized by our group, could be used as reagents in bioorthogonal reactions. Their reactivity with a strained alkyne (BCN) was investigated in the presence of water and potentially problematic biomolecules, such as glutathione and lysine. The reaction rate constant was determined by IR monitoring. Moreover, the corresponding nonfluorinated azide was also studied for a reactivity comparison.

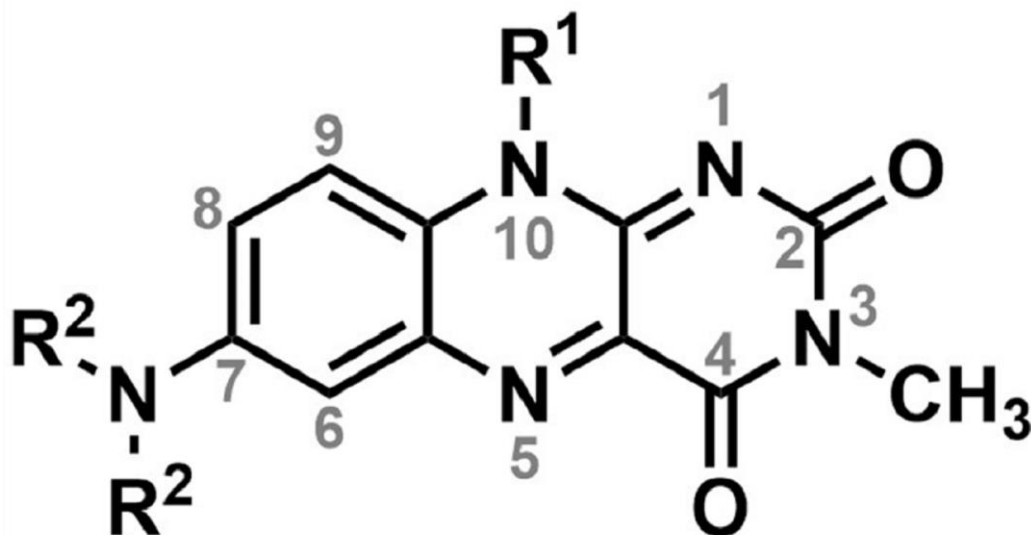


7-Substituované isoalloxaziny s dusíkatou funkční skupinou

Zuzana Abdelfattah (B3)

Školitel: Ing. Eva Svobodová, Ph.D.

Flavins are a huge family of derivatives of vitamin B₂ (riboflavin), which is an important biologically active compound. It is an essential part of FAD and FMN; the prosthetic groups of crucial redox enzymes – flavoproteins. Flavins have unique properties so they can be used in both photocatalytic and organocatalytic redox reactions. In our laboratory, we are interested in the synthesis and mechanistic studies of flavin derivatives, including isoalloxazines, alloxazines and deazaflavins. New generation of flavins has been achieved by the introduction of substituents in positions 5, 7, 8 and 10, and/or the preparation of flavinium salts. This work is focused on synthesis of a 7-dialkylamino derivative of isoalloxazine with an alkyl substituent in position 10. It has been previously attempted in our laboratory through nitration of the isoalloxazine skeleton in position 7 followed by reduction and substitution but several problems have arose. This work will therefore comprise a different mechanism through the synthesis of 10-alkyl-7-chloroisoalloxazine followed by an aromatic nucleophilic substitution of chlorine by dialkylamine. In the near future, I am planning to characterize the organocatalytic properties of such isoalloxazine derivative.

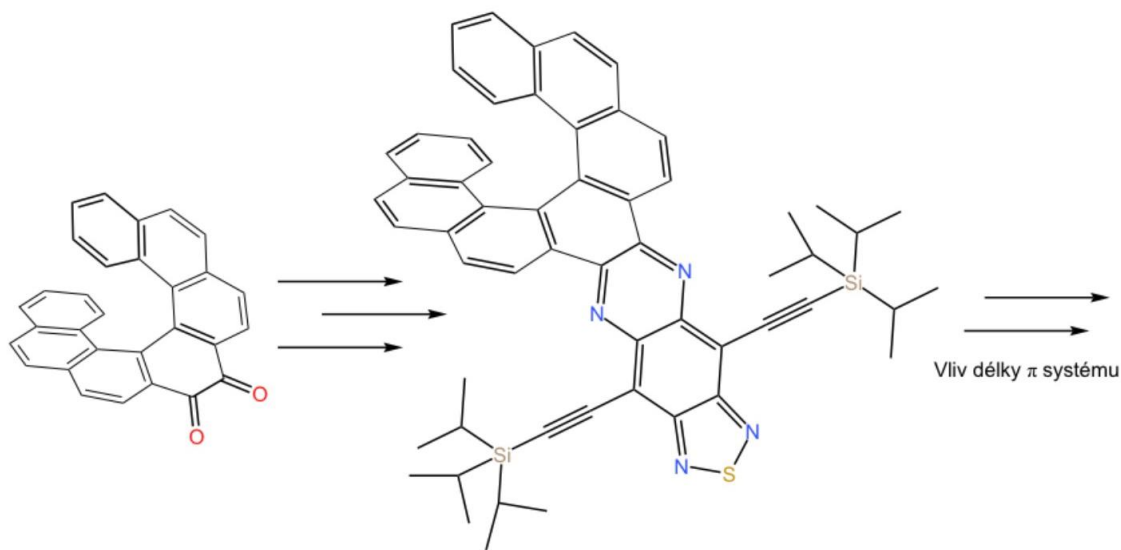


Nové deriváty helicenů pro syntézu materiálů vykazujících cirkulárně polarizovanou luminescenci

Andrea Lavičková (B3)

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

Heliceny jsou neplanární látky složené z několika *ortho*-kondenzovaných benzenových jader. Jejich neplanarita dává vzniknout molekulám s tvarem šroubovice, která se může vyskytovat v levotočivé i pravotočivé formě a díky tomu se heliceny řadí mezi chirální látky i přesto, že neobsahují centrum chiralidy. Díky spojení chiralidy a delokalizovaného systému π -elektronů mají řadu unikátních vlastností. Například vykazují abnormálně vysokou specifickou otáčivost, jsou polovodiči typu P, a proto nachází uplatnění při konstrukci optoelektrických prvků, dále je lze využít v asymetrické katalýze, supramolekulární chemii či jako emitory cirkulárně polarizovaného světla. Látky absorbující či emitující cirkulárně polarizované světlo mají vysoký potenciál pro výrobu pokročilých fotonických materiálů, materiálů pro OLED displeje, spintronických či chytrých chiroptických zařízení a senzorů. Pro konstrukci tohoto typu zařízení jsou nutné molekuly vykazující vysoké hodnoty g_{abs} a g_{lum} (desymetrizační faktor) jichž je možné dosáhnout vhodnou volbou substituce a symetrie molekuly. Proto je cílem této práce syntetizovat takové helikální molekuly, které inherentně maximalizují tyto parametry a systematicky zkoumat, jak jsou ovlivňovány změnami ve struktuře.

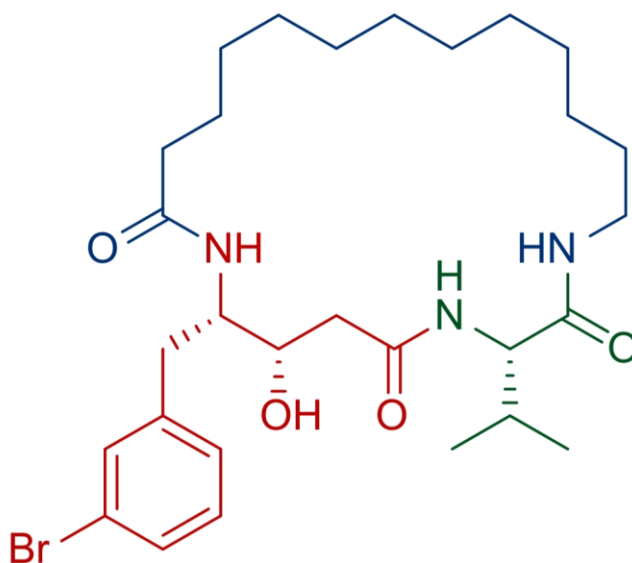


Příprava prekurzorů makrocyclických analogů pepstatinu A

Pavel Říkovský (B1)

Školitel: Mgr. Martin Hadzima

Práce se zabývá přípravou dvou prekurzorů makrocyclických inhibitorů proteolytického enzymu katepsinu D (CatD). Teoretická část rozebírá související látky (přesněji CatD a jeho nejpotentnější přirozený inhibitor pepstatin A), mechanismus funkce inhibitorů, výhody makrocyclických analogů, vysvětluje čtenáři potřebné pojmy, a tím ozřejmuje cíl i význam práce. První část experimentální práce zahrnuje přípravu analogu aminokyseliny statinu, která je součástí přírodního inhibitoru pepstatinu A. Druhá část se zaměřuje na přípravu vhodné spojky, v době přípravy komerčně nedostupné hydrofobní aminokyseliny 13-aminotridekanové, pro syntézu makrocyclických inhibitorů požadované velikosti. Práce podrobně popisuje přípravu obou zmíněných prekurzorů a probírá i následnou syntézu a výhody výsledné makrocyclické látky, která z nich byla připravena. Identita všech připravených sloučenin byla potvrzena několika přístrojovými analytickými metodami a spektra z vodíkové a uhlíkové nukleární magnetické resonance (^1H a ^{13}C -NMR) jsou uvedena na konci práce v přílohách.



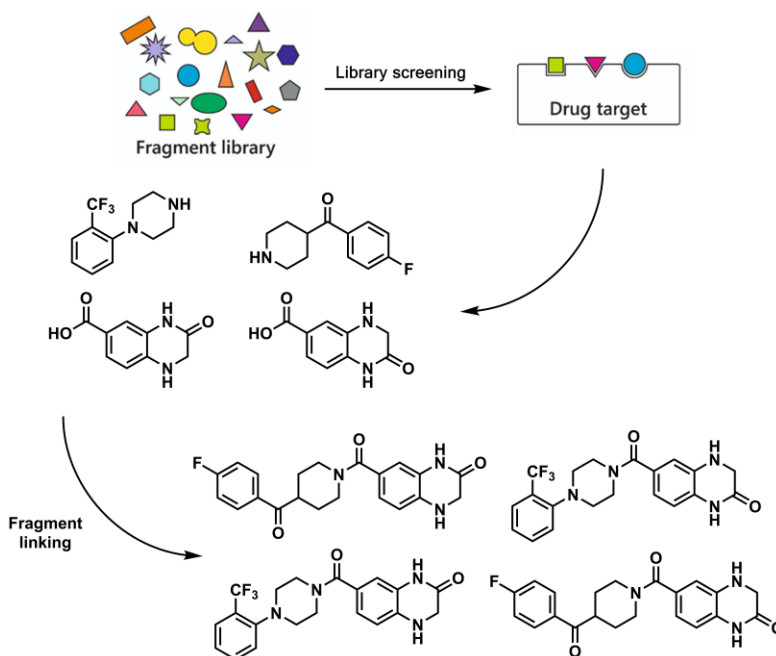
Struktura výsledného makrocyclického analogu pepstatinu A
– část původem z prekurzoru **A** červeně, z prekurzoru **B** modře

Quinoxalinone-based DC-SIGN inhibitors

Martin Brokeš (B3)

Školitel: Ing. Petra Ménová, Ph.D.

Synthesis of quinoxalinone-based DC-SIGN inhibitors
Martin Brokeš (B3) Školitel: Ing. Petra Ménová, Ph.D.
DC-SIGN receptor is a C-type (calcium-dependent) lectin located on the surface of macrophages and dendritic cells with an important role in human immune system. It bears two types of binding sites – one primary and a number of secondary sites. The primary binding site has affinity for high-mannose containing *N*-glycans which are a common feature of various viral surfaces. Secondary binding sites are more sensitive towards non-polar moieties, such as quinoxalinones. It is suggested that upon binding, these molecules could distort DC-SIGN's primary binding site and through allosteric inhibition prevent some viral infections such as HIV or hepatitis C. Several secondary-site ligands were proposed based on a fragment library screening. This project is focused on synthesizing and connecting these fragments, using quinoxalinone as scaffold and two different heterocyclic amines as substituents. The first series of the prepared compounds showed low stability over time. Hence, we suggested a second generation of compounds containing an oxidized quinoxalinone core that is expected to show enhanced stability.

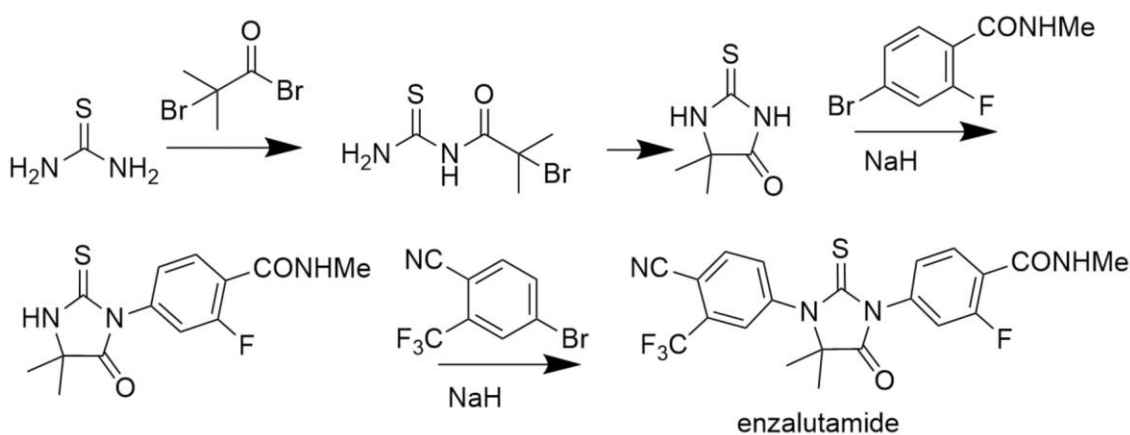


Syntéza derivátů thiohydntoinu vycházející z thiomochoviny

Lucie Hlaváčková (B3)

Školitel: Ing. Martin Krupička, Ph.D.

Enzalutamid je antiandrogenní léčivo, které se používá k léčbě rakoviny prostaty. Patří mezi léčiva druhé generace, u kterých se cílí na zlepšení působení v pokročilém stádiu rakoviny, kde generace první naopak začala být značně neefektivní. To mnohdy vedlo ke zhoršení stavu pacienta. Postupy syntéz jsou publikovány pouze v patentech. Je popsáno více syntetických cest, nicméně ty často vyžadují práci s toxickými látkami a obsahují reakční kroky s velice obtížnými mechanismy. Byla proto vybrána a vhodně upravena cesta, která se vyhýbá thiofosgenu a využívá vhodné reakční postupy. Z thiomochoviny se ve dvou reakčních krocích připraví thiohydantoin, na který se následně připojí dva aromatické kruhy pomocí S_NAr . V mé práci se zabývám optimalizací reakčních podmínek syntézy enzalutamidu. Meziproducty jsou pevné látky, a proto se nabízí možnost syntézy v pevné fázi. Cyklizace v druhém kroku reakce se provádí zahříváním v rozpouštědle, a i tyto podmínky by se měly dát nahradit použitím kulového mlýnu. Pro syntézu v pevné fázi je možné použít i malé množství solventu, případně se bez něj lze úplně obejít. Mechanochemie díky absenci rozpouštědla naplňuje cíle zelené chemie snižováním odpadu.

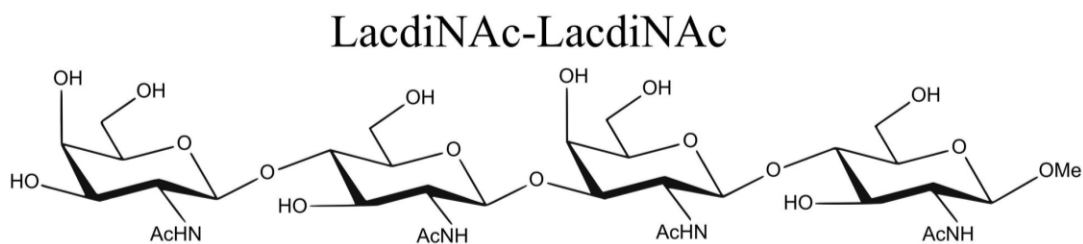


Studium supramolekulárních interakcí methyl di-N,N'-diacetyllaktosaminidu s biomedicínsky významnými lidskými galektiny

Anna Velebová (B2)

Školitel: prof. Andrea Brancale, Ph.D.

Studium supramolekulárních interakcí methyl di-N,N'-diacetyllaktosaminidu s biomedicínsky významnými lidskými galektiny. Lidské galektiny jsou proteiny, hrající důležitou roli při regulaci buněčné proliferace, apoptózy a maligní transformace. Jejich biologická aktivita je mimo jiné způsobena schopností specificky rozpoznávat galakto-konfigurované sacharidy. Doposud bylo identifikováno 12 lidských galektinů, které v organismu plní komplementární a často protichůdné funkce. Z důvodu jejich vysoké strukturální podobnosti je velmi obtížné jednotlivé galektiny selektivně inhibovat. Proto je syntéza specifických inhibitorů jednotlivých galektinů aktuálním tématem s velkým potenciálem v diagnostice a léčbě fibrotických a rakovinných onemocnění. Cílem mé práce je příprava nového galektinového ligandu, methyl di-N,N'-diacetyllaktosaminidu, pomocí metod chemické glykosylace. Afinita této látky k vybraným lidským galektinům bude následně stanovena pomocí imunochemických metod a výsledky racionalizovány pomocí metod výpočetní chemie, zejména pak molekulárního dokování.

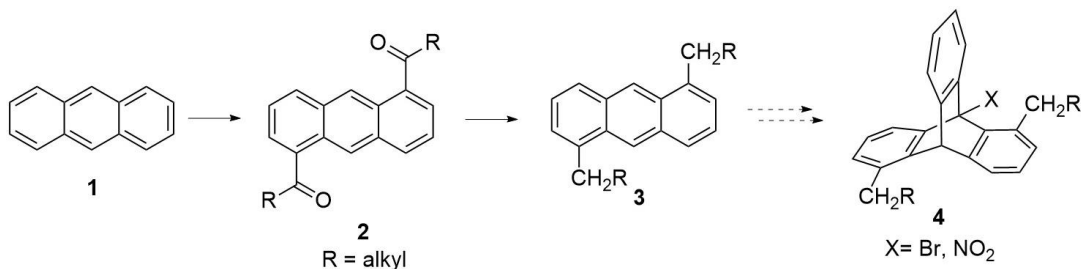


1,5-Disubstituované anthraceny jako prekurzory chirálních triptycenů

Kryštof Malý (B3)

Školitel: Ing. Markéta Rybáčková, Ph.D.

Triptycen je aromatický uhlovodík obsahující 3 benzenová jádra navzájem spojená dvěma můstkovými atomy uhlíku. Díky své unikátní struktuře našly triptyceny a jejich deriváty uplatnění například v chemii polymerů, medicíně nebo v oblasti katalýzy. Cílem této práce je připravit chirální 1,5-disubstituované triptyceny **4**, které by sloužily jako prekurzory NHC ligandů. Ty bude dále možné využít pro přípravu katalyzátorů na bázi přechodných kovů. Syntéza vychází z anthracenu (**1**), ze kterého byl pomocí Friedelovy-Craftsovy acylace připraven 1,5-diacylanthracen (**2**). Byl studován vliv acylačního činidla na regioselektivitu reakce. Wolffovou-Kižněrovou redukcí karbonylových skupin byl pak získán 1,5-dialkylanthracen (**3**). Pomocí bromace a nitrace anthracenu **3** do polohy 9 a následné reakce s *in situ* generovaným benzynem budou připraveny chirální triptyceny **4**.



Organická chemie magisterská M1

MÍSTO: B25

KOMISE

doc. Ing. Jan Budka, Ph.D. (předseda)

Mgr. Roman Holakovský, Ph.D. - tajemník

prof. RNDr. Jan Kotek, Ph.D. (PřF UK)

Ing. Markéta Rybáčková, Ph.D.

Ing. Petr Slavík, Ph.D. (Santiago)

Ing. Martin Chadim, Ph.D. (Cayman)

PROGRAM

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

Syntéza chirálních 9-substituovaných triptycenů

09:30 [Bc. Pavel Kraina](#) (M2, Ing. Zlatko Janeba, Ph.D.)

Replacement of Purine Nucleobase in Purine Nucleoside Phosphorylase inhibitors

09:45 [Bc. Jan Wohlgemuth](#) (M1, Ing. Petra Ménová, Ph.D.)

Synthesis of 2-Phenylsulfonylacrylates as Potential DC-SIGN Inhibitors

10:00 [Bc. Kateřina Svobodová](#) (M2, Ing. Michal Himl, Ph.D.)

Syntéza dibutoxyfenylen-močovinových makrocyclů

10:15 Coffee Break

10:30 [Bc. Eliška Vlasáková](#) (M1, doc. Dr. Ing. Jana Hodačová)

Syntéza derivátů trans-cyklohexan-1,2-diaminu pro přípravu organokřemičitých materiálů

10:45 [Bc. Vilém Blahout](#) (M2, Mgr. et Mgr. Pavla Perlíková, Ph.D.)

Syntéza a biologická aktivita analogů callunenu

11:00 [Bc. Karolína Vatrová](#) (M1, prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.)

Syntéza calix[7]arenů se smíšenými můstky

11:15 [Bc. Jakub Kňava](#) (M2, doc. Ing. Michal Kohout, Ph.D.)

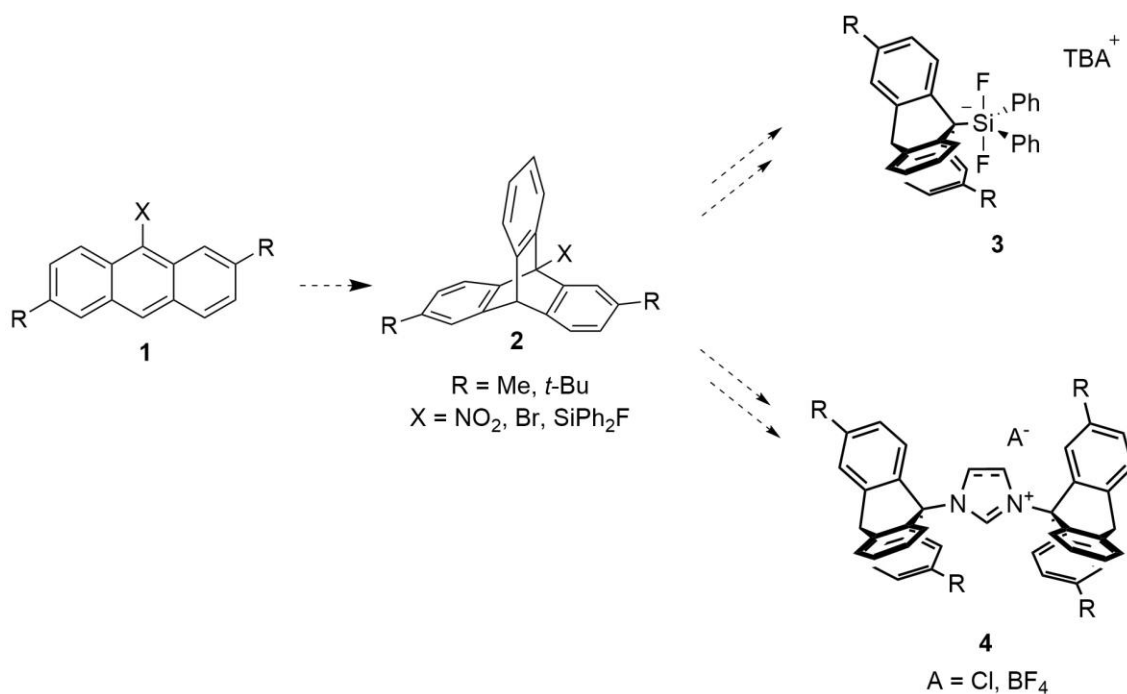
Příprava chirálních stacionárních fází: Vliv struktury chirálního selektoru na efektivitu imobilizace

Syntéza chirálních 9-substituovaných triptycenů

Bc. Šárka Polívková (M1)

Školitel: Ing. Markéta Rybáčková, Ph.D.

Triptyceny substituované v polohách 2 a 6 představují zajímavé chirální sloučeniny, které by mohly najít uplatnění při asymetrické syntéze jako součást enantioselektivních činidel či katalyzátorů. Umístění vhodné funkční skupiny do polohy 9 pak může vést k syntéze nukleofilních fluoračních činidel na bázi difluorsilikátů 3 a také imidazoliových a dihydroimidazoliových solí 4, které představují prekursorů NHC ligandů. Tato práce se zabývá přípravou chirálních 2,6,9-trisubstituovaných triptycenů 2 s využitím Dielskovy-Alderovy reakce *in-situ* generovaného benzynu s odpovídajícími 2,6,9-trisubstituovanými anthraceny 1.

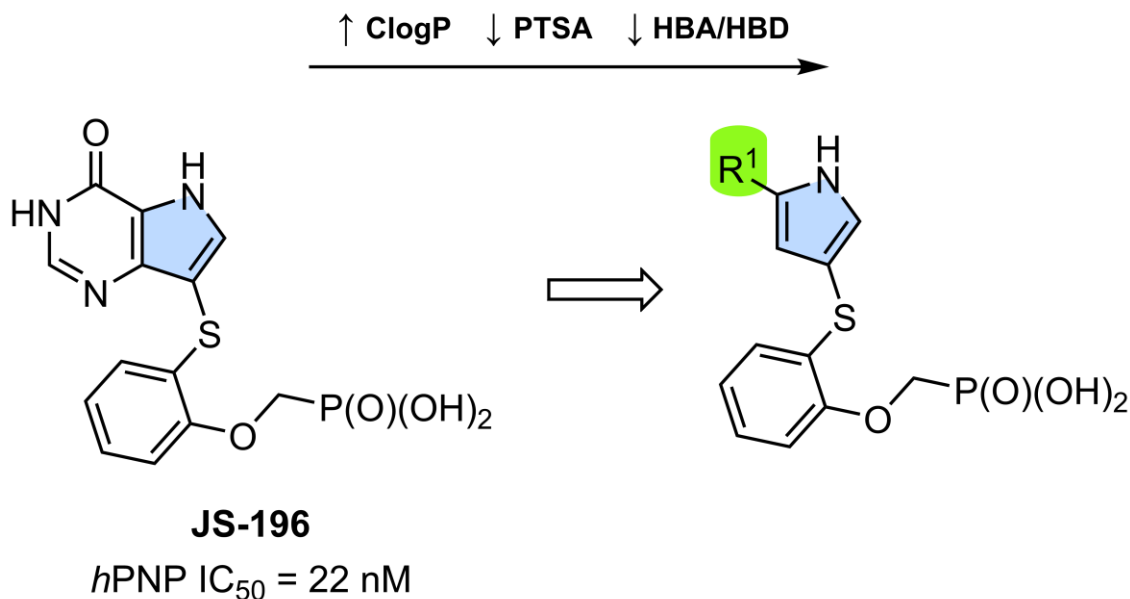


Replacement of Purine Nucleobase in Purine Nucleoside Phosphorylase inhibitors

Bc. Pavel Kraina (M2)

Školitel: Ing. Zlatko Janeba, Ph.D.

Purine nucleoside phosphorylase (PNP) is a transferase enzyme catalyzing the phosphorolysis of purine nucleosides. It is a key part of a purine catabolism – purine salvage pathway. PNP deficiency leads to the accumulation of purine nucleosides in thymocytes (cells that are transformed into T-cells), leading to their apoptosis. Therefore, inhibiting PNP and thus accumulating nucleosides specifically in T-cells, could be used for the treatment of T-cell-mediated leukemia and malignancies. The PNP inhibitor research has been ongoing for many years but has yet to yield widely available therapeutics. Most compounds have failed in clinical trials due to their low activity, solubility, or bioavailability. Recently, novel hypoxanthine-based nanomolar PNP inhibitors have been developed in our research group, however, they lack the necessary physicochemical properties as well. This work aims to develop novel PNP inhibitors by finding a suitable replacement for the 9-deazahypoxanthine moiety, in order to improve pharmacokinetic properties with preserved biological potency.

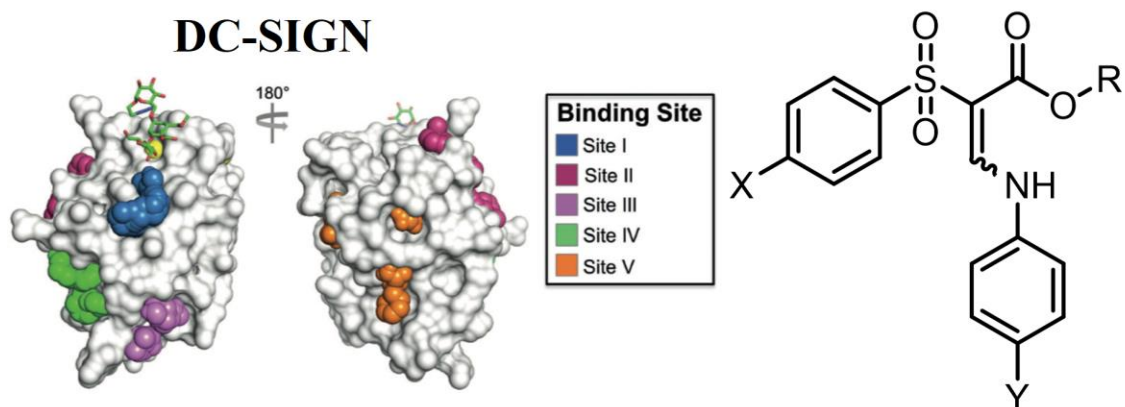


Synthesis of 2-Phenylsulfonylacrylates as Potential DC-SIGN Inhibitors

Bc. Jan Wohlgemuth (M1)

Školitel: Ing. Petra Ménová, Ph.D.

DC-SIGN is a receptor located on the surface of dendritic cells and macrophages, which takes part in the function of the immune system by pathogen recognition. Some pathogens like HIV-1 abuse this interaction and use it to propagate infection. This fact makes DC-SIGN an attractive target for the synthesis of new drugs. In recent years, both carbohydrate and non-carbohydrate inhibitors of DC-SIGN have been described, yet none has made it to the market. During a library screening, three 2-phenylsulfonylacrylates, unsubstituted on the arylsulfonyl moiety, were found to have decent affinity towards DC-SIGN. This points towards 2-phenylsulfonylacrylates being as potential DC-SIGN inhibitors and it makes them an interesting synthetic target. In this work, 19 new 2-phenylsulfonylacrylates that could act as potential DC-SIGN inhibitors were synthesized. Six of these acrylates contain an electron-donating group, twelve contain an electron-withdrawing group and the last one does not have a substituted aromatic core on the arylsulfonyl moiety. The prepared compounds are being tested not only for their DC-SIGN affinity, but also for cytotoxic and antimicrobial properties.

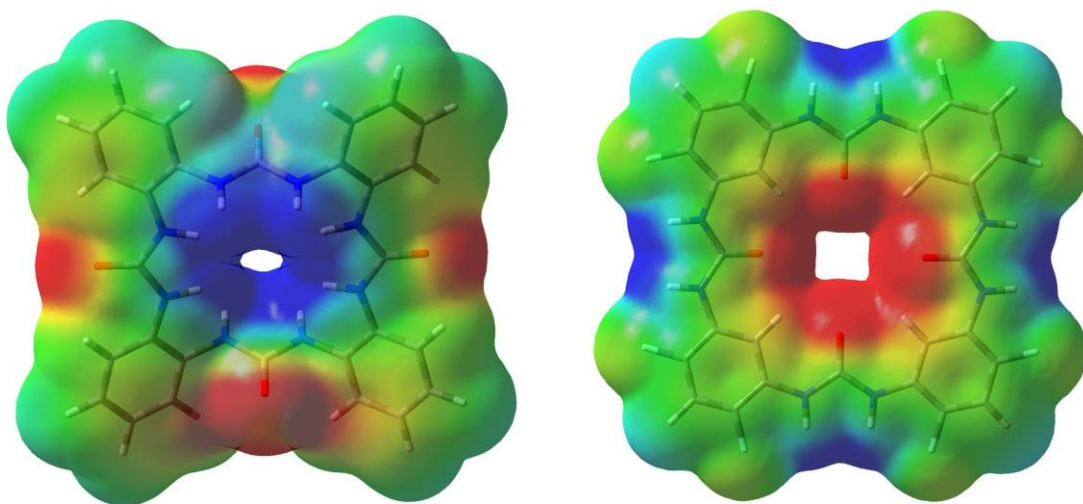


Syntéza dibutoxyfenylen-močovinových makrocyklů

Bc. Kateřina Svobodová (M2)

Školitel: Ing. Michal Himl, Ph.D.

Dibutoxyfenylen-močovinové makrocykly jsou vysoce symetrické neutrální látky, které díky své schopnosti komplexovat ionty nacházejí uplatnění v oblasti supramolekulární chemie. Základní skelet těchto makrocyklů je tvořen čtyřmi dibutoxy-substituovanými benzenovými jádry, která jsou vzájemně propojena čtyřmi močovinovými jednotkami. V rámci této práce byla provedena optimalizace syntézy 1,2-dibutoxyfenylen-močovinového makrocyklu, který byl úspěšně syntetizován. Následně byly studovány komplexační vlastnosti tohoto makrocyklu a získané výsledky byly porovnány s dalšími makrocykly připravenými v naší laboratoři. Výsledky měření budou diskutovány.



Syntéza derivátů *trans*-cyklohexan-1,2-diaminu pro přípravu organokřemičitých materiálů

Bc. Eliška Vlasáková (M1)

Školitel: doc. Dr. Ing. Jana Hodačová

Práce se zabývá přípravou enantiomerně čistých derivátů *trans*-cyklohexan-1,2-diaminu. Struktura *trans*-cyklohexan-1,2-diaminu se velmi často objevuje v katalyzátorech různých enantioselektivních reakcí¹. Zabudování tohoto strukturního bloku do křemičité sítě může poskytnout heterogenní, snadno recyklovatelný katalyzátor. Jednou z variant přípravy organokřemičitých materiálů je jejich syntéza z bis(trialkoxysilanů)². Cílem práce bylo získání bis(triethoxysilanu) **1**, pro jehož přípravu byly klíčovými intermediáty enantiomerně čistý diol **2** a diazido-diol **3**. Dalšími reakcemi byl připraven derivát diamino-diolu **4**, ze kterého byl pomocí alkyn-azid cykloadiční reakce v bezvodém prostředí získán bis(triethoxysilan) **1**. Ten byl následnou hydrolýzou a polykondenzací transformován na organokřemičitý materiál **5**, jehož katalytické vlastnosti budou testovány (Schéma 1).

Literatura: a) *Catalysts*, **2021**, 11, 41; b) *New J. Chem.*, **2018**, 42, 11896-11904; c) *Chem. Rev.*, **1997**, 97 (8), 3161-3196. *Chem. Soc. Rev.*, **2011**, 40 2, 608-20.

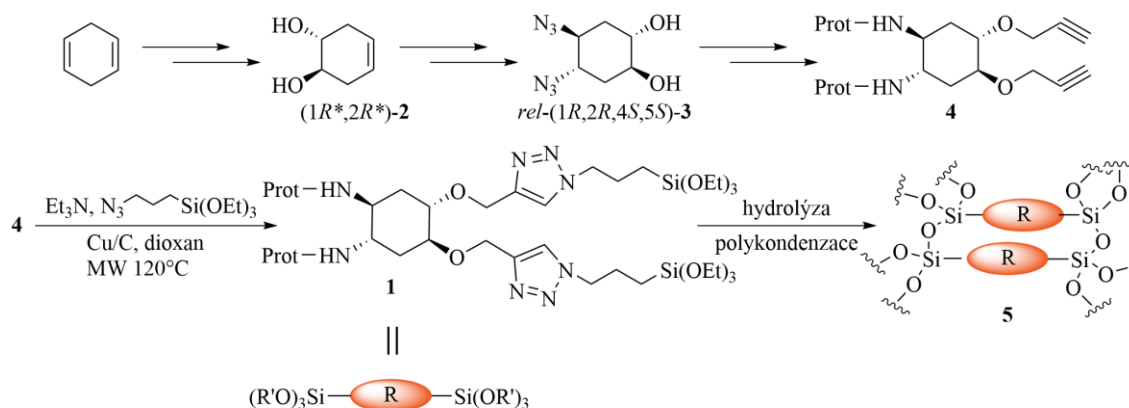


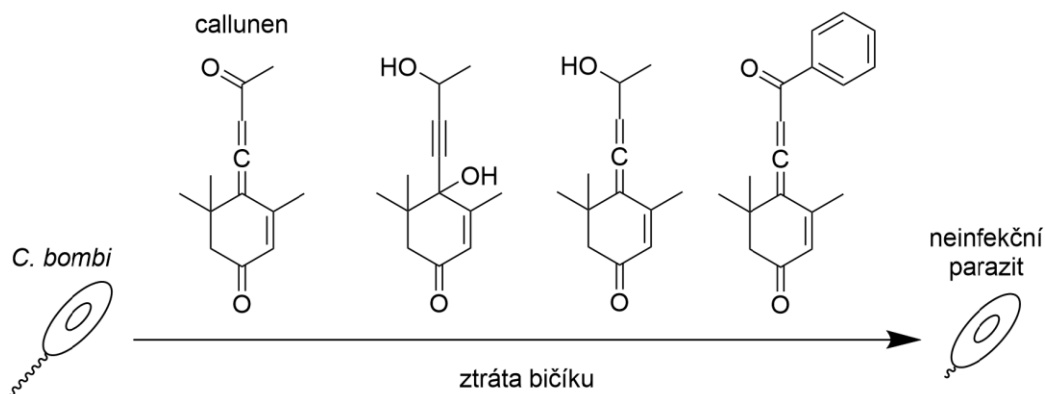
Schéma 1: Syntéza bis(triethoxysilanu) **1**

Syntéza a biologická aktivita analogů callunenu

Bc. Vilém Blahout (M2)

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

Callunen je rostlinný metabolit vyskytující se v nektaru vřesu obecného (*Calluna vulgaris*), vykazující vysokou antiparazitickou aktivitu proti trypanosomě *Crithidia bombi*, která je běžným parazitem čmeláků. Vystavení callunenu vyvolává u těchto parazitů ztrátu bičíku a ti se tak stávají neinfekčními. Tento netradiční mechanismus účinku by se potenciálně mohl stát cílem pro vývoj nových antiparazitik, přesný způsob působení ani cílové struktury callunenu však dosud nejsou známy. Cílem této práce je tak syntéza analogů callunenu a zkoumání vztahu mezi jejich strukturou a aktivitou. Syntéza těchto analogů vychází ze syntetického postupu pro syntézu analogů kyseliny abscisové, který byl úspěšně upraven a optimalizován pro přípravu našich cílových látek. Následně byla připravena série analogů, jejichž biologická aktivita vůči *C. bombi* byla testována ve spolupráci se skupinou prof. Yurchenka z Ostravské univerzity.

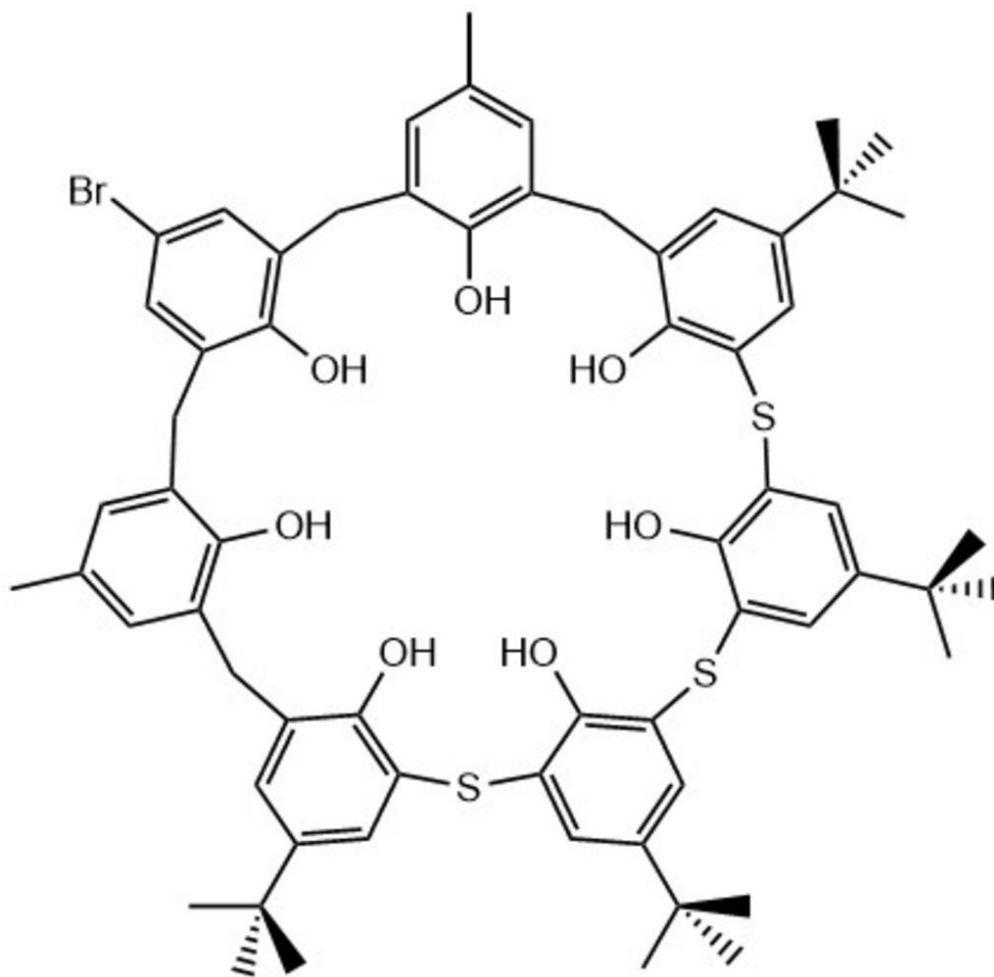


Syntéza calix[7]arenů se smíšenými můstky

Bc. Karolína Vatrová (M1)

Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Calix[7]areny se smíšenými můstky patří mezi tzv. vyšší calixareny, jejichž studium je zajímavé zejména z hlediska schopnosti komplexovat ve svých rozměrných kavitách některé větší molekuly, např. fullereny. Příprava calixarenů s lichým počtem jader spočívá v postupné konvergentní syntéze, jejíž finální krok představuje kondenzace předem připravených substituovaných fragmentů. Cílem této práce je připravit calix[7]areny nesoucí na svém horním okraji příslušné substituenty vhodné pro následnou derivatizaci.

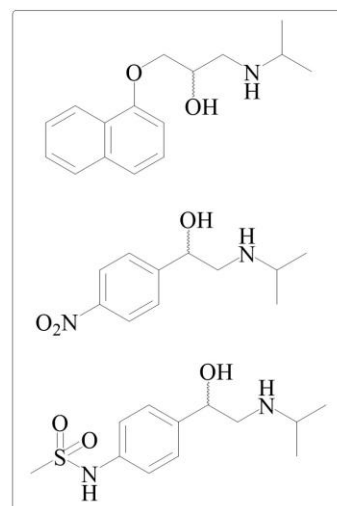
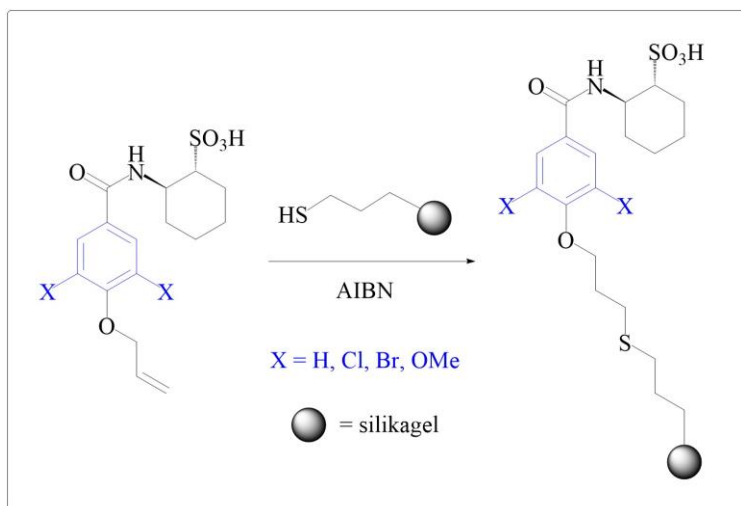


Příprava chirálních stacionárních fází: Vliv struktury chirálního selektoru na efektivitu imobilizace

Bc. Jakub Kňava (M2)

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

Vysokoučinná kapalinová chromatografie (HPLC) s užitím chirálních stacionárních fází představuje jednu z nejrozšířenějších metod štěpení racemátů. V současné době existuje již více než 100 typů chirálních stacionárních fází umožňujících separaci téměř jakéhokoli racemátu. Výjimku představují iontové a ionizovatelné analyty, u nichž stále nebyla nalezena účinná univerzální metoda pro jejich rozdělení. Jednou z cest, jak dosáhnout alespoň částečně efektivní separace enantiomerů těchto analytů je použití chirálních iontově výměnných stacionárních fází, které obsahují selektory na bázi katexu (CX), anexu (AX) nebo zwitterion-exchangeru (ZWIX). Cílem práce je příprava katexových chirálních stacionárních fází odvozených od *trans*-2-aminocyklohexansulfonové kyseliny. Tato jednotka byla modifikována různě substituovanými aromatickými spojkami zakončenými terminálním alkenylovým řetězcem, který slouží pro ukotvení selektoru na pevný nosič (modifikovaný silikagel). U připravených selektorů bude studován vliv substituce aromatické spojky na průběh imobilizace na 3-sulfanylpropyl-modifikovaný silikagel. Získané stacionární fáze budou následně testovány pro chirální separaci vybraných bazických analytů. Dosažené výsledky budou porovnány s dříve připravenými analogickými stacionárními fázemi.



Organická chemie magisterská M2

MÍSTO: A278C

KOMISE

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

Ing. Eva Svobodová, Ph.D. - tajemník

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

Ing. Jiří Tůma, Ph.D.

Ing. Karel Křenek (DonauLab)

Ing. Jiří Vokál, Ph.D. (LachNer)

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

PROGRAM

09:15 [Bc. Soňa Poláčková](#) (M1, doc. Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D.)

Chemoselektivita 4-hydroxypyridinu v cross-couplingových reakcích

09:30 [Bc. Jan Tatýrek](#) (M2, doc. Dr. Ing. Jana Hodačová)

Hybridní organokřemičité materiály obsahující alkaloidy z chinovníku

09:45 [Bc. Sámer Melhem](#) (M1, Ing. Markéta Rybáčková, Ph.D.)

Využití mikrovlnného ohřevu při syntéze rozšířených derivátů triptycenu

10:00 [Bc. Marie Kloubcová](#) (M2, Ing. Jiří Tůma, Ph.D.)

Syntéza organokatalyzátorů na bázi binaftalenu pro nukleofilní fluorace

10:15 Coffee Break

10:30 [Bc. Karolína Křížová](#) (M2, Ing. Petr Kovaříček, Ph.D.)

Photocatalysis with covalently dynamic deazaflavins

10:45 [Bc. Ondřej Daněk](#) (M1, Ing. Petra Ménová, Ph.D.)

Synthesis of quinolone-based DC-SIGN inhibitors

11:00 [Bc. Radek Staník](#) (M2, prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.)

Syntéza nových calix[4]arenů s chalkogenovými můstky

11:15 [Bc. Karolína Bangievská](#) (M1, RNDr. Tomáš Slanina, Ph.D.)

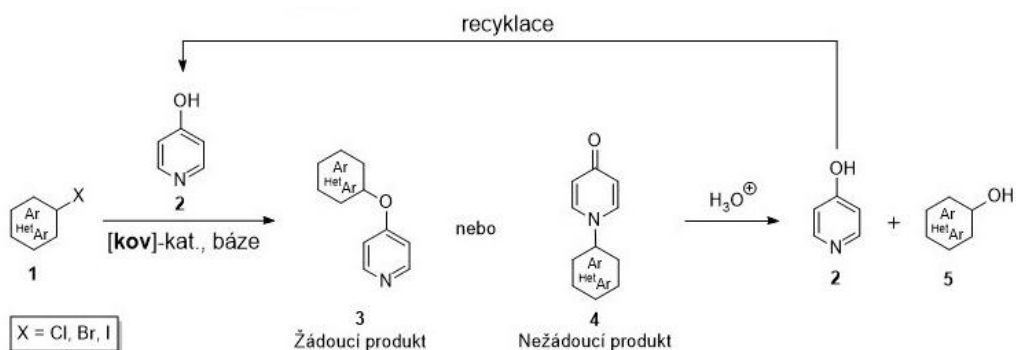
Synthesis of redox switches and triarylamine for bidirectional electron transfer

Chemoselektivita 4-hydroxypyridinu v cross-couplingových reakcích

Bc. Soňa Poláčková (M1)

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

Fenoly a polyfenoly jsou látky s potenciální biologickou aktivitou, a proto jsou předmětem studia ve farmacii. Mnohé studie popisují využití fenolů při léčbě kardiovaskulárních a onkologických onemocnění nebo jejich protizánětlivé účinky. Ve své práci se zabývám přípravou fenolů 5 cross-coupling reakcemi s využitím 4-hydroxypyridinu (2) jako nového hydroxylačního činidla. 4-Hydroxypyridin (2) v reakcích vystupuje jako ambidentní nukleofil, a proto by v závislosti na reakčních podmínkách mělo docházet ke vzniku produktů *N*-nebo *O*-arylace 3 a 4. Hlavním předmětem mé práce je studium vlivu reakčních podmínek na průběh cross-couplingových reakcí s cílem maximalizace tvorby *O*-arylovaných produktů 3 a jejich následná přeměna na fenoly 5.

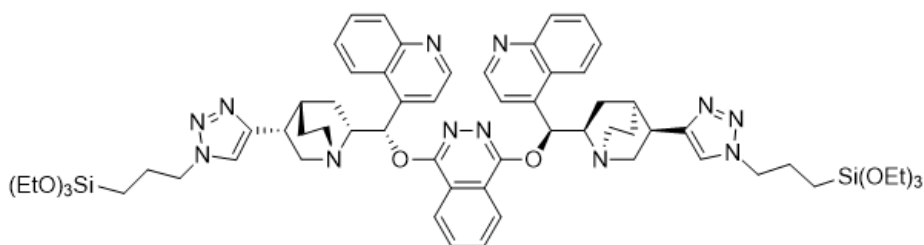


Hybridní organokřemičité materiály obsahující alkaloidy z chinovníku

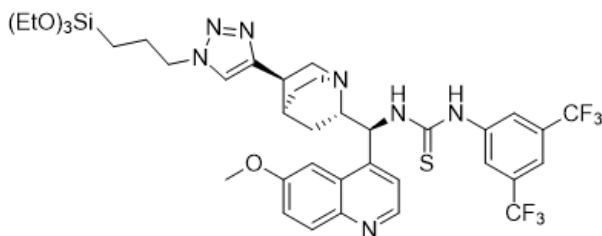
Bc. Jan Tatýrek (M2)

Školitel: doc. Dr. Ing. Jana Hodačová

Práce se zabývá přípravou hybridních organicko-anorganických křemičitých materiálů, konkrétně materiálů na bázi derivátů cinchoninu a chininu, jež by dále měly najít své využití jako heterogenní katalyzátory enantioselektivních reakcí. Výhodou těchto materiálů je jejich recyklovatelnost a snadné oddělení od reakční směsi, což následně umožňuje jejich opětovné použití. Praktická část mojí práce se zabývá přípravou prekurzorů I a II, přípravou substrátu pro následné enantioselektivní reakce a jejich samotné otestování. Při přípravě jednotlivých prekurzorů využívám trojné vazby, na kterou pomocí „click“ reakce navážu triethoxysilanové skupiny, které jsou klíčové pro přípravu hybridních materiálů. Z prekurzoru I byly úspěšně vytvořeny 2 hybridní materiály, které byly otestovány na řadě chlorlaktonizačních reakcí. Prekurzor II je novým typem prekurzoru, kde se snažím o tvorbu materiálu se zabudovaným derivátem chininu, který obsahuje thiomocovinovou skupinu.



Prekurzor I



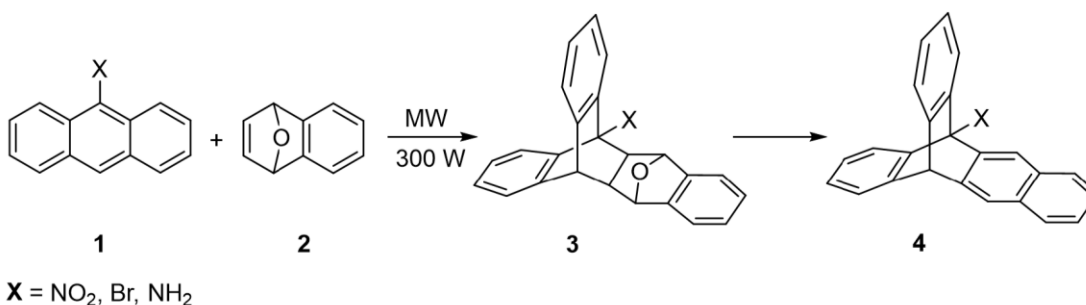
Prekurzor II

Využití mikrovlnného ohřevu při syntéze rozšířených derivátů triptycenu

Bc. Sámer Melhem (M1)

Školitel: Ing. Markéta Rybáčková, Ph.D.

Triptyceny jsou látky se zajímavými vlastnostmi, které mohou v budoucnu nalézt uplatnění nejen v elektrotechnice, supramolekulární chemii, či materiálové chemii, ale i v medicíně. Cílem této práce je připravit rozšířené deriváty triptycenu, které by ve své struktuře měly v jednom rameni benzenové jádro nahrazeno naftalenem a zároveň by nesly funkční skupinu na můstkovém atomu uhlíku. Takto připravené sloučeniny by mohly sloužit jako základní stavební bloky pro syntézu imidazolových solí, které lze použít pro přípravu katalyzátorů přechodných kovů na bázi NHC-ligandů. Pro syntézu rozšířených triptycenů byl v prvním kroku využit mikrovlnný ohřev, který umožnil provádět v poměrně krátkém čase a s uspokojivými výtěžky Dielsovu-Alderovu reakci mezi anthraceny **1** a 1,4-epoxy-1,4-dihydronaftalenem (**2**) za vzniku příslušných aduktů **3**. Druhým krokem byla aromatizace, která byla prováděna v kyselém prostředí za pomoci dehydratačních činidel, čímž se podařilo připravit tři rozšířené deriváty triptycenu **4** nesoucí různé funkční skupiny na můstkovém atomu uhlíku.

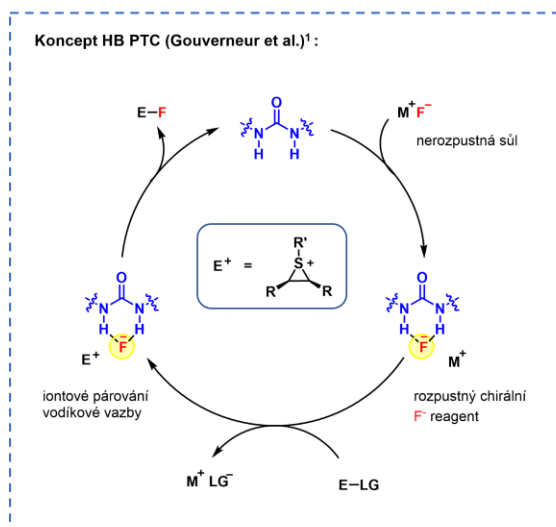


Syntéza organokatalyzátorů na bázi binaftalenu pro nukleofilní fluorace

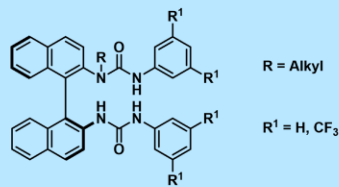
Bc. Marie Kloubcová (M2)

Školitel: Ing. Jiří Tůma, Ph.D.

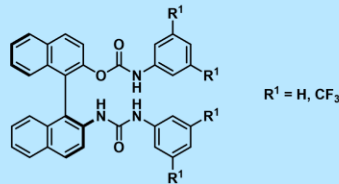
Fluoridy alkalických kovů jsou díky své cenové dostupnosti vhodnými reagenty pro využití ve stereoselektivních nukleofilních fluoracích. Avšak jejich použití pro tvorbu asymetrické C-F vazby představuje dlouhodobou výzvu nejen kvůli omezené dostupnosti vhodných chirálních katalyzátorů, ale především kvůli špatné rozpustnosti anorganických fluoridů v organických rozpouštědlech. Jednou z účinných metod je užití fázové katalýzy, při níž je nukleofil aktivován tvorbou komplexu s katalyzátorem pomocí vodíkových vazeb. Chiralita katalyzátoru zároveň řídí stereochemický průběh dané transformace. Tento koncept tzv. „*hydrogen bonding phase-transfer*“ katalýzy (HB PTC) byl demonstrován na sérii chirálních močovinových katalyzátorů, které tvoří s fluoridovým iontem tridentátní komplex, a umožňují tak velice efektivní enantioselektivní otevření episulfoniového iontu¹. Tato práce je zaměřena na syntézu a následnou aplikaci nového typu těchto katalyzátorů odvozených od 2'-amino-1,1'-binaftalen-2-olu (NOBIN). Literatura: 1. *Science* 2018, 360, 638.



Předchozí práce (Gouverneur et al.)¹:



Tato práce:

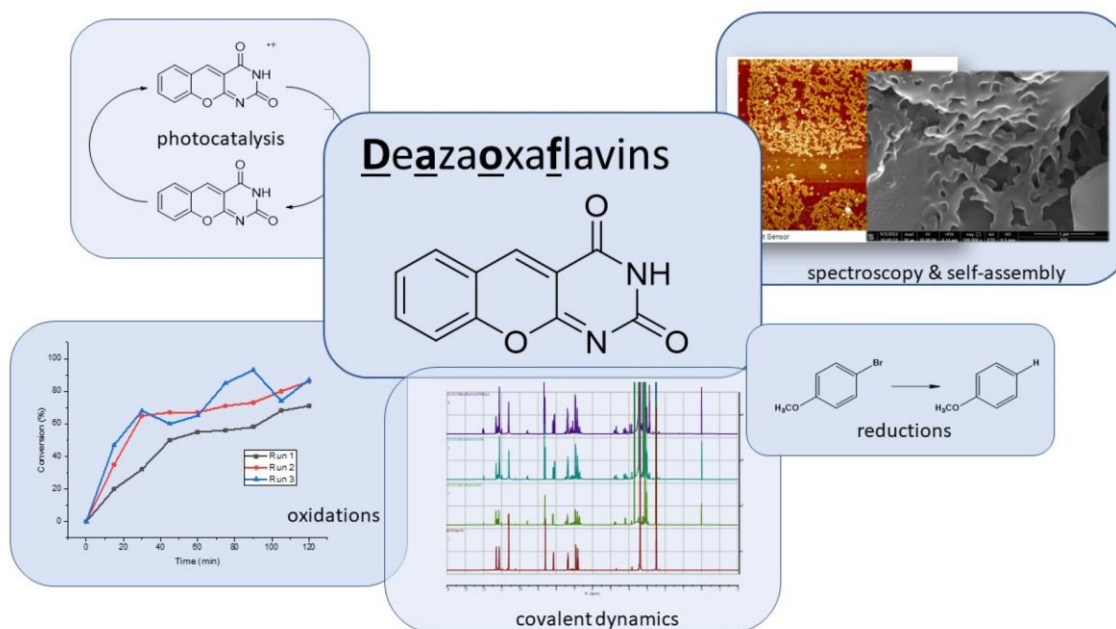


Photocatalysis with covalently dynamic deazaflavins

Bc. Karolína Křížová (M2)

Školitel: Ing. Petr Kovaříček, Ph.D.

Deazaflavins are a fascinating class of compounds entangling photocatalysis and covalent dynamicity. They are synthesized from barbituric acid and salicylaldehyde building blocks through a cascade of reversible condensation reactions. The microscopic reversibility enables exchange of one of its constituents for a different moiety. Deazaflavins share structural features with flavins - known organocatalysts. I will describe the synthetic approach to deazaflavins and show their structural dynamicity. I have explored the photocatalytic properties of these derivatives and I will present the results of oxidative and reductive model reactions. Finally, I will present an outlook for the future exploitation of my work.

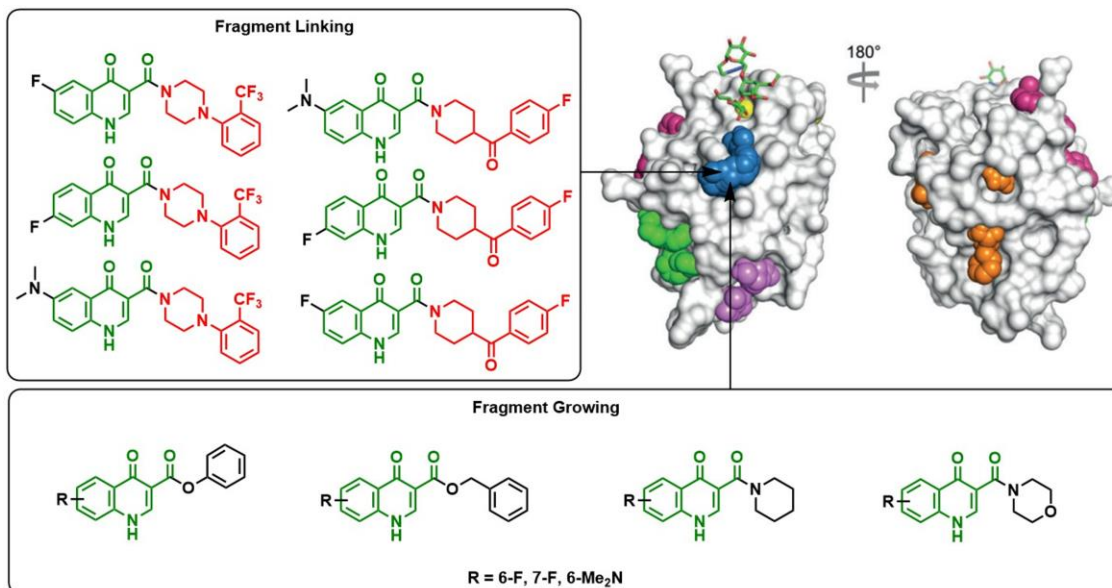


Synthesis of quinolone-based DC-SIGN inhibitors

Bc. Ondřej Daněk (M1)

Školitel: Ing. Petra Ménová, Ph.D.

DC-SIGN is a C-type lectin receptor found on the surface of dendritic cells. Binding of this receptor to carbohydrate chains on the surface of pathogens plays a crucial role in immune response against a range of pathogens (HIV, hepatitis C, Ebola virus, *Streptococcus pneumoniae*, etc). HIV can take advantage of the interaction with the receptor, resulting in infection of CD4⁺ T-cells. Developing inhibitors of DC-SIGN receptor is thus highly desirable. Recently, a fragment-based screening against DC-SIGN has been performed and several fragment hits have been identified. This presentation focuses on the synthesis and study of binding affinity of a small library of substituted 4-quinolone-3-carboxylates as DC-SIGN inhibitors. A series of amides and esters of 6-fluoro, 7-fluoro and 6-dimethylamino-4-quinolone-3-carboxylic acids were synthesized by the Gould–Jacobs reaction followed by coupling reactions with amines and alcohols that had been identified in the fragment screening. The prepared quinolones were tested for their affinity for DC-SIGN receptor by ¹H–¹⁵N HSQC and STD NMR by our collaborators at the University of Vienna. The results of the testing enabled us to determine structure–activity relationships and propose structures of potentially more potent DC-SIGN inhibitors.

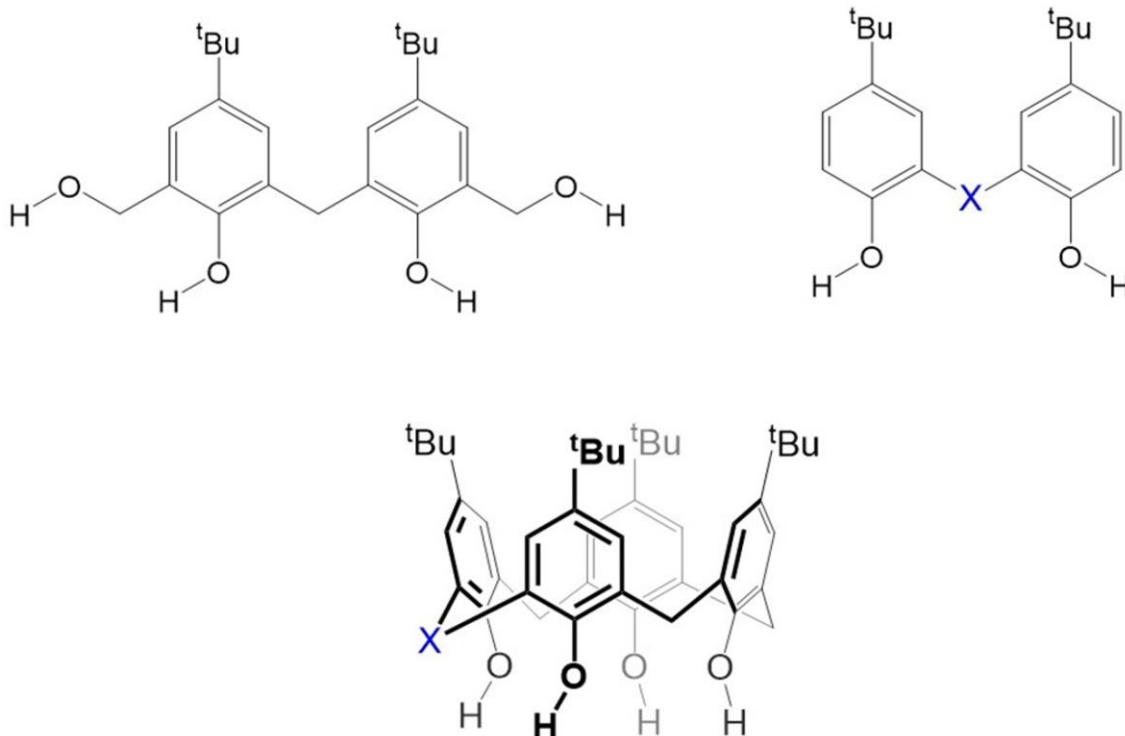


Syntéza nových calix[4]arenů s chalkogenovými můstky

Bc. Radek Staník (M2)

Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Calix[n]areny jsou látky široce využívané v supramolekulární chemii. Skládají se z fenolických jader, které jsou spojeny v polohách 2- a 6- můstky za vzniku makrocyklu. Můstek je nejčastěji tvořen methylenovou skupinou, popř. atomem síry. V poslední době se začaly objevovat tzv. smíšené calixareny, které ve své struktuře obsahují jak methylenový můstek, tak i síru, která patří v periodické tabulce mezy chalkogeny. Mým cílem je rozšířit metodiku přípravy podobných systémů a pokusit se zavést do molekuly další chalkogenové můstky, jako je kyslík, selen či tellur. Zvolený přístup je založen na syntéze vhodných stavebních kamenů obsahujících zmíněné chalkogeny, které budou následně podrobeny kondenzaci za vzniku cílových makrocyklů.



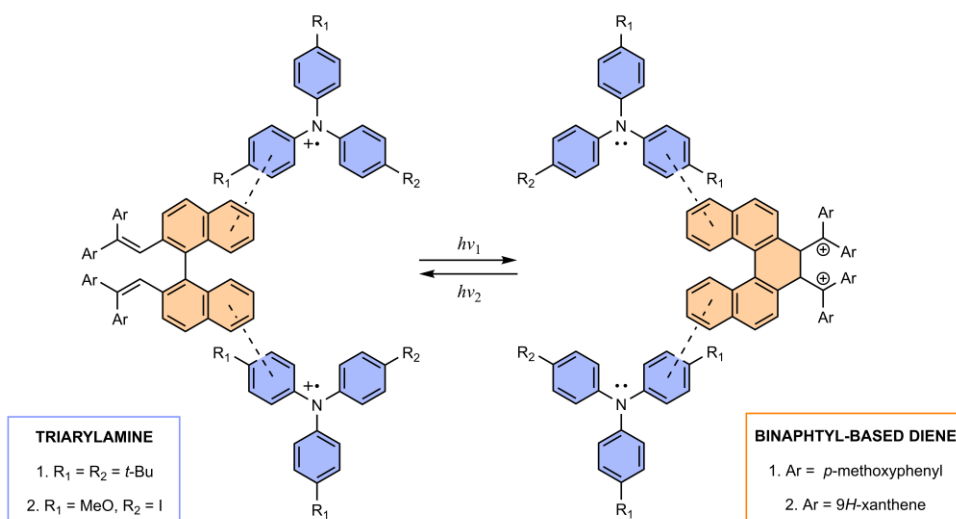
X : O, Se, Te

Synthesis of redox switches and triarylaminines for bidirectional electron transfer

Bc. Karolína Bangievská (M1)

Školitel: RNDr. Tomáš Slanina, Ph.D.

Our research deals with the design, synthesis and electrochemical, photophysical and photochemical studies of the first monomolecular *photo-redox switches* for controllable and reversible *intramolecular* photoinduced electron transfer (PET). Thanks to their specific structure, which consists of triarylamine (scheme below, blue structure) and a redox-switch moiety (orange structure), these systems utilize a unique way of preventing the undesired back electron transfer (BET). The new *photo-redox switches* may find applications in the field of optical memories, organic solar cells, redox sensors, functionalized surfaces or smart materials. To accomplish this aim, we designed a bimolecular redox system for *intermolecular* PET to prove the compatibility of the participating donors and acceptors. We screened known photo- and redox-driven systems to find possible candidates for the properties desired for our monomolecular *photo-redox switch*. We found *p*-substituted triphenylamines and binaphthyl-based dienes to be the best options for donor and acceptor moieties. This finding was followed by the successful synthesis of four target molecules and analysis of their photophysical and electrochemical properties, including the study of bidirectional PET. In cooperation with Ing. Anna Poryvai, Ph.D.



Organická chemie magisterská M3

MÍSTO: A278E

KOMISE

doc. Dr. Ing. Jana Hodačová (předseda)

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

Mgr. Jiří Kaleta, Ph.D. (ÚOCHB AV ČR)

Ing. Ondřej Kunderát, Ph.D.

Ing. Martin Káš (Symeres)

Ing. Jan Janoušek, Ph.D. (Arxada)

PROGRAM

09:15 [Bc. Rostislav Sponar](#) (M2, prof. Ing. Radek Cibulka, Ph.D.)

Fotoelektrochemicky generované excitované radikály deazaflavinu jako redukční činidla

09:30 [Bc. Petr Bečvář](#) (M2, doc. Ing. Michal Kohout, Ph.D.)

Synthesis and characterisation of azoindols as precursors of ultrafast LC-switches

09:45 [Bc. Vojtěch Suchopár](#) (M1, Ing. Radek Jurok, Ph.D.)

Syntéza deuterovaných standardů psychoaktivních látek

10:00 [Bc. Scarlet Stefanie Vraník](#) (M1, doc. Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D.)

Príprava chirálnych amínov z prírodných aminokyselín

10:15 Coffee Break

10:30 [Bc. Adam Hroch](#) (M1, prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.)

Syntéza intermediátů pro nukleofilní fluoraci a jejich aplikace

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

Liposomes for DC-SIGN targeting

11:00 [Bc. Vojtěch Urban](#) (M1, Ing. Michal Himl, Ph.D.)

Syntéza derivátů aminokyselin s využitím pro toxikologický výzkum

11:15 [Bc. Michaela Bršťáková](#) (M2, prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.)

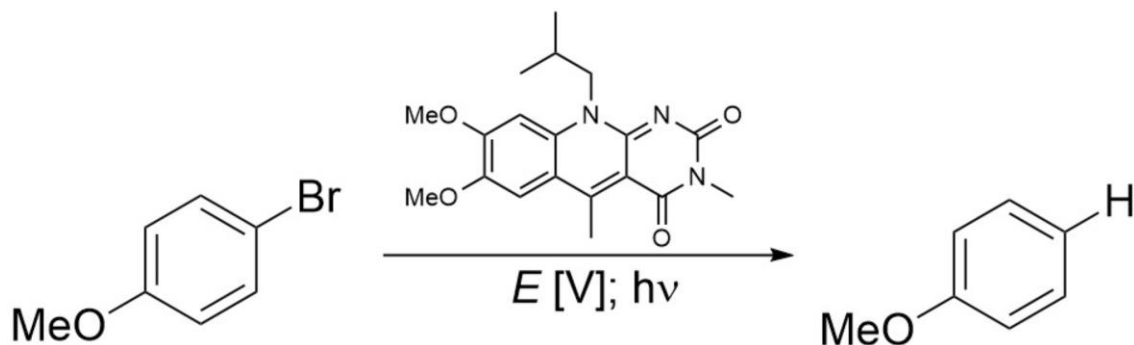
Syntéza fosfinových derivátů calix[4]arenů

Fotoelektrochemicky generované excitované radikály deazaflavinu jako redukční činidla

Bc. Rostislav Sponar (M2)

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

Deazaflaviny, deriváty flavinů, patří k látkám s velmi nízkým redoxním potenciálem. Díky této vlastnosti se mohou účastnit i reakcí, které pro svůj průběh vyžadují silné redukční podmínky (např. dehalogenace arylhalogenidů). Reaktivní částicí vystupující v těchto reakcích je radikál deazaflavinu ve své excitované formě. V předešlých pracích je ke generování radikálu použit mechanismus con-PET, kde se k redukci používá donor elektronů (např. DIPEA) a zároveň excitace viditelným světlem. Tato práce se zaměřuje na elektrochemické generování radikálu deazaflavinu, namísto použití donoru elektronů. Redukční vlastnosti generovaného radikálu byly testovány na *p*-bromanisolu jako modelovém substrátu.



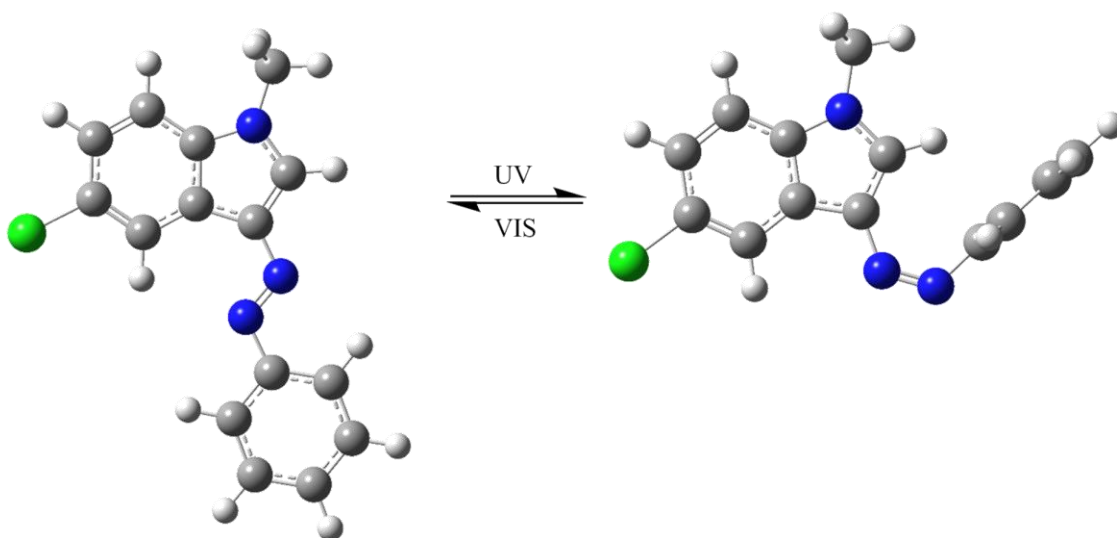
Synthesis and characterisation of azoindols as precursors of ultrafast LC-switches

Bc. Petr Bečvář (M2)

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

Photoswitches, compounds that change their shape upon UV or visible light illumination, are currently frequently incorporated into various smart organic materials, such as liquid crystals (LCs). This enables the creation of light-tuneable mesophases thereby adding additional stimuli responsiveness. There is a large variety of photoswitches based on different switching mechanisms, which bring different properties to the final material. An azobenzene unit is one of the most popular photosensitive moieties incorporated into the LC structures. It can be easily tuned by lateral substitution to provide highly stable UV light-induced *Z*-isomer of LC materials. Such materials show only very slow thermal back-relaxation to the thermodynamically stable *E*-isomer, which is important in optical memory applications. On the other hand, LCs showing fast thermal *Z*-to-*E* relaxation can be used for the fabrication of optical switches. In this lecture, we present the results of our effort to derivatize and study phenylazoindole switches and an early approach to obtaining a final liquid crystal.

Fig. 1 Photoinitiated isomerization substituted of phenylazoindole



Syntéza deuterovaných standardů psychoaktivních látek

Bc. Vojtěch Suchopár (M1)

Školitel: Ing. Radek Jurok, Ph.D.

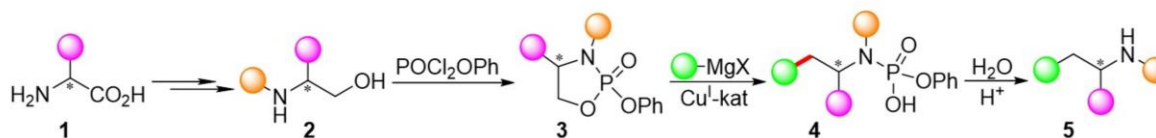
Zneužívání omamných a psychotropních látek je celospolečenským problémem. Pro forenzní a výzkumné účely je často nutné určit obsah účinných látek ve vzorcích drog nebo biologického materiálu. K tomu mohou sloužit analytické metody spřažené s hmotnostní spektrometrií, jako je GC-MS nebo HPLC-MS. Kvantitativní analýzu je výhodné provést metodou vnitřního standardu, u níž jsou využívány izotopicky značené analogy zkoumaných látek. Cílem této práce je syntéza deuterovaných standardů látek, jež se řadí mezi nejčastěji zneužívané drogy. Připraveny byly standardy, nesoucí v molekule tři atomy deuteria, od metamfetaminu (pervitinu), MDMA (extáze), heroinu, kokainu a ethylesteru benzoylekgoninu (kokaethylenu), který vzniká v játrech při současné intoxikaci kokainem a alkoholem. Dále byl syntetizován izotopicky neznačený standard 3,4-methyldioxyamfetaminu (MDA), látky, jež se také vyskytuje v tabletách extáze.

Príprava chirálnych amínov z prírodných aminokyselín

Bc. Scarlet Stefanie Vraník (M1)

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

Chirálné amíny sú farmaceutický veľmi významné látky na základe toho, že jednotlivé enantioméry daných látok majú častokrát iný účinok či efektivitu. Ich syntéza je aj preto zaujímavá a žiadaná v rámci organickej syntetickej chémie. Práca obsahuje návrh enantioselektívnej syntézy amínov z prírodných aminokyselín 1. V práci je zahrnutá príprava východiskového cyklického fosforamidátu 3 z aminoalkoholu 2 a následné štúdium jeho reaktivity využitím rôznych organokovov a komplexov prechodných kovov ako katalyzátorov.

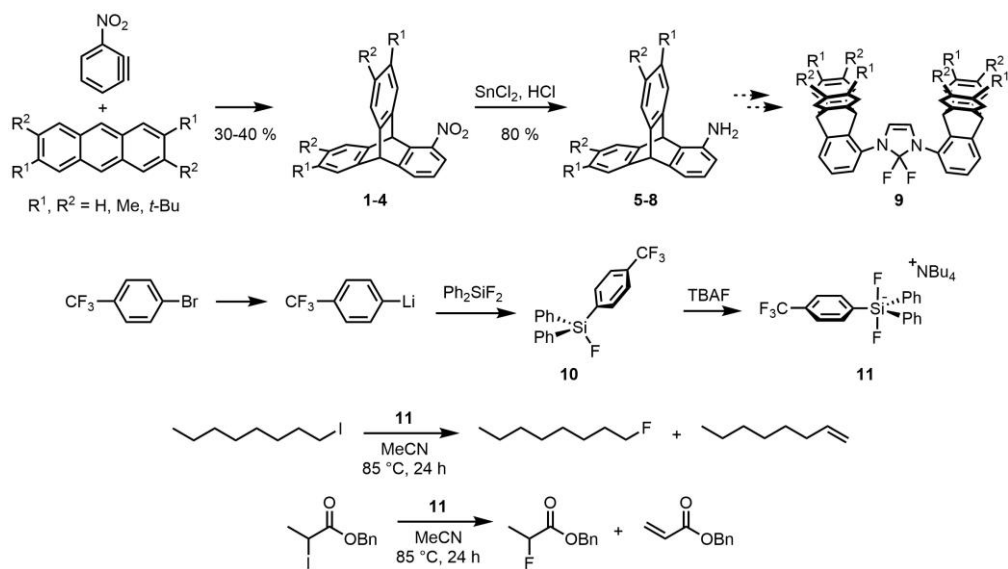


Syntéza intermediátů pro nukleofilní fluoraci a jejich aplikace

Bc. Adam Hroch (M1)

Školitel: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Nukleofilní fluorace je jednou z nejběžnějších metod pro přípravu organických sloučenin obsahujících atom fluoru. Problémy nukleofilní fluorace spočívají zejména ve špatné rozpustnosti anorganických fluoridů či nestabilitě tetrabutylamonium-fluoridu (TBAF). Nejlepší poměr substituce/eliminace pro fluorace halogenalkanů dávají činidla na bázi hypervalentního křemíku, z nichž je nejvýhodnější tetrabutylamonium-trifenyldifluorsilikát (TBAT). V první části své práce jsem se zabýval Dielsovou-Alderovou reakcí 3-nitroarynu s deriváty anthracenu za vzniku substituovaných 1-nitrotriptycenů 1-4 následovanou redukcí nitroskupiny za vzniku odpovídajících aminů 5-8. Ty by mohly být využity jako stavební bloky pro přípravu chirálních nukleofilních fluoračních činidel na bázi činidel 9. V druhé části práce jsem se v návaznosti na předchozí výzkum naší laboratoře zabýval přípravou difluorsilikátů. S využitím organolithné sloučeniny připravené z odpovídajícího bromidu jsem připravil trifenylfluorsilan 10 modifikovaný trifluormethylovou skupinou a následně jej reakcí s TBAF převedl na silikát 11, analog fluoračního činidla TBAT. Jeho reaktivitu a chemoselektivitu jsem spolu s dalšími difluorsilikáty, připravenými dříve v naší laboratoři, studoval na sérii primárních a sekundárních alkyljodidů.

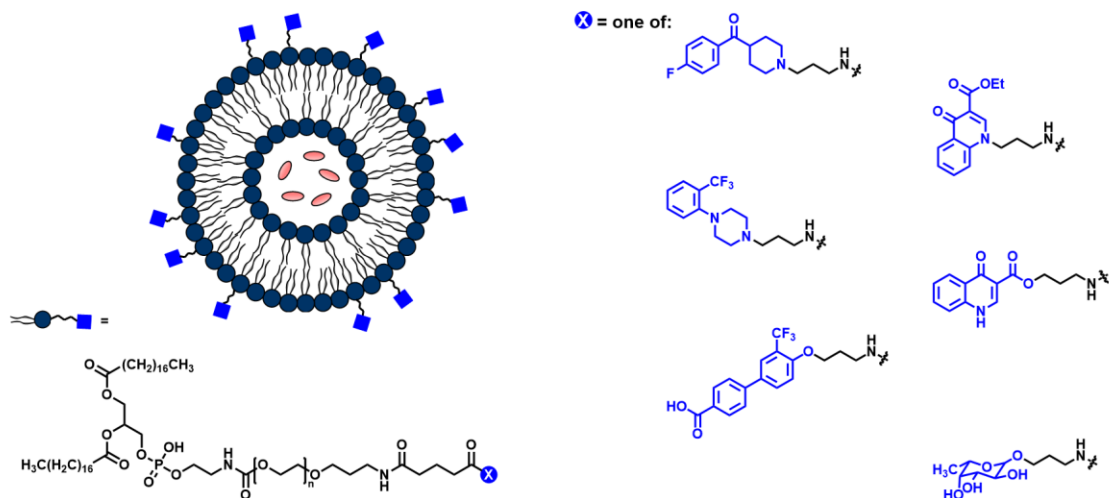


Liposomes for DC-SIGN targeting

Bc. Kateřina Jochová (M2)

Školitel: Ing. Petra Ménová, Ph.D.

DC-SIGN is a carbohydrate-binding receptor found on the surface of dendritic cells and macrophages. Its natural ligands are d-mannose and l-fucose, which bind to the hydrophilic primary binding site. Its interaction with these carbohydrates on the surface of pathogens is key for initiating immune response. Besides the primary binding site, a recent study has identified five secondary binding sites which bind non-carbohydrate-based ligands. Liposomes are biocompatible nanoparticles. They consist of an amphiphilic bilayer, can encapsulate bioactive molecules and are able to release these molecules into cells by the process of membrane fusion. By modifying liposomes with selective DC-SIGN ligands, the cargo could be delivered specifically to the macrophages, which is a promising approach for increasing vaccine efficiency. In this project, several DC-SIGN ligands were synthesized and coupled with a DSPE-PEG lipid. These lipid molecules were then used in formulation of targeted liposomes. The binding ability of the prepared liposomes was tested in cell cultures.

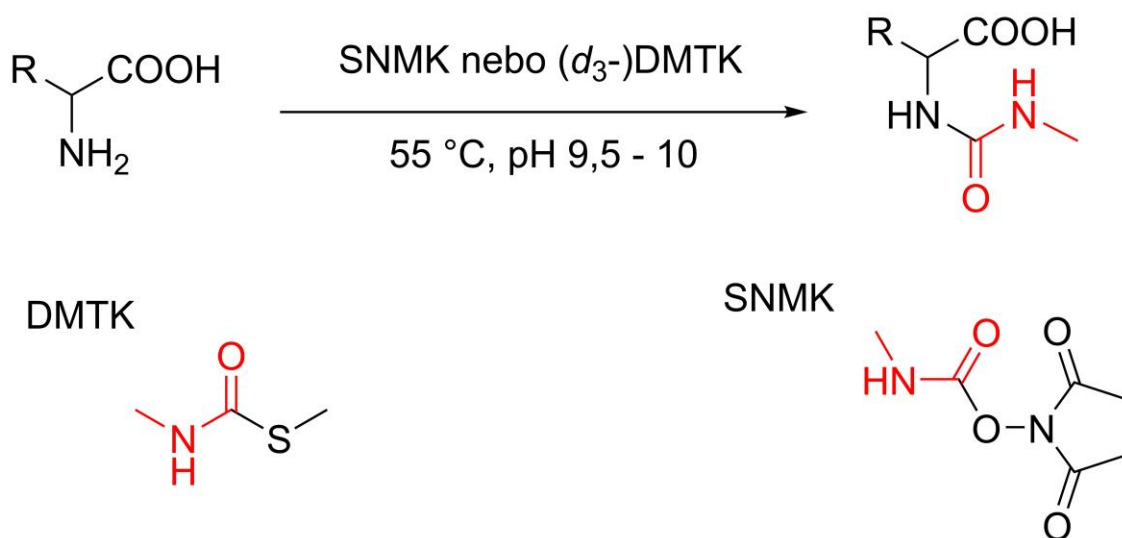


Syntéza derivátů aminokyselin s využitím pro toxikologický výzkum

Bc. Vojtěch Urban (M1)

Školitel: Ing. Michal Himl, Ph.D.

Cílem mé práce bylo nalézt jednostupňový postup pro *N*-methylkarbamoylaci aminokyselin a jejich derivátů, který by byl alternativou ke v současné době používanému postupu využívajícímu toxický methyl-isokyanát (MIK). Jako syntetické ekvivalenty MIK byly použity *N,S*-dimethylthiokarbamát (DMTK) a *N*-sukcinimidyl-*N*-methylkarbamát (SNMK). Činidlo SNMK s aminokyselinami reagovalo již po 2-3 hodinách při 50 °C a pH 9,5-10 a poskytovalo uspokojivé výtěžky. Za stejných podmínek DMTK reagoval pomaleji (48 h), ale s některými polárními aminokyselinami poskytl čistší produkty než SNMK. Obdobně byl použit *N*-trideuteriomethyl-*S*-methylthiokarbamát (DMTK-*d*₃) pro přípravu *N*_α- a *N*_ε-trideuteriomethylkarbamoylovaných derivátů valinu a lysinu. Připravené látky byly použity v toxikologických studiích jako standardy při analýze proteinových aduktů odvozených od MIK nebo jeho metabolického prekursoru – *N,N*-dimethylformamidu.



Syntéza fosfinových derivátů calix[4]arenů

Bc. Michaela Bršťáková (M2)

Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Calix[4]areny substituované v *meta*-poloze vůči fenolické skupině představují zajímavé deriváty, vykazující tzv. inherentní chiralitu. To je i případ calix[4]arenů substituovaných v *meta*-poloze difenylfosfinovou skupinou. Cílem práce je studium syntézy a vlastností calixarenů nesoucích fosfinové zbytky v *meta* poloze a následné využití těchto sloučenin pro syntézu přemostěných calixarenových systémů.



Organická chemie magisterská M4

MÍSTO: A243

KOMISE

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

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

Ing. Petr Kovaříček, Ph.D.

Ing. Petra Ménová, Ph.D.

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

Ing. Martin Valík, Ph.D. (Teva)

Ing. Petr Šimon, Ph.D. (Cayman)

PROGRAM

09:15 [Bc. Michal Trojan](#) (M2, prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.)

Difluorsilikáty jako nukleofilní fluorační činidla

09:30 [Bc. Anna Nožičková](#) (M1, Ing. Petr Kovaříček, Ph.D.)

Photoswitchable organic frustrated Lewis pairs

09:45 [Bc. Vojtěch Kramný](#) (M2, Ing. Petra Ménová, Ph.D.)

Small-molecule ligands for DC-SIGN receptor

10:00 [Bc. Eliáš Vrbovský](#) (M1, Ing. Michal Himl, Ph.D.)

Příprava vhodných prekurzorů pro syntézu močovinových makrocyclů

10:15 Coffee Break

10:30 [Bc. Michal Churý](#) (M2, doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.)

meta-Derivatizace para-aminocalix[4]arenového skeletu

10:45 [Bc. Jakub Křištof](#) (M1, RNDr. Tomáš Slanina, Ph.D.)

Influence of redox-active metallic complexes on fulgide-based photoswitches

11:00 [Bc. Sergej Mrkobrada](#) (M2, doc. Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D.)

Desymmetrization strategy for the preparation of ortho-substituted phenols

11:15 [Bc. Margarita Faizulina](#) (M1, Ing. Petr Kovaříček, Ph.D.)

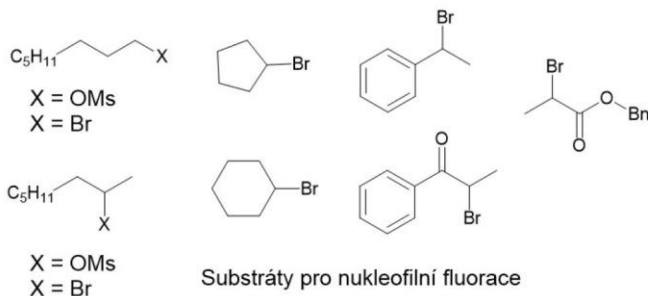
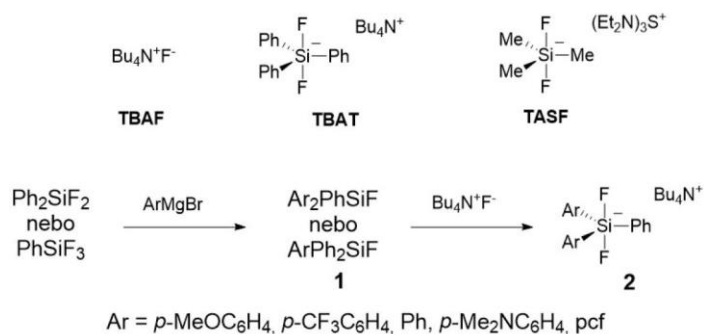
Řízená prostorově rozlišená funkcionalizace mikroskopických skel

Difluorsilikáty jako nukleofilní fluorační činidla

Bc. Michal Trojan (M2)

Školitel: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Nukleofilní fluorace patří mezi nejvýznamnější procesy pro přípravu monofluorovaných sloučenin. Levné fluoridy jako KF se vyznačují nízkou rozpustností a vysokou bazicitou. Mnohem lépe rozpustný tetrabutylamonium-fluorid (TBAF) se při zahřívání rozkládá. Proto nejlepšími činidly, zejména pro sekundární substráty, jsou hypervalentní sloučeniny křemíku jako TBAT nebo TASF, i pro ně je však konkurenční eliminace závažným problémem. Ve své práci jsem se zabýval modifikací činidla TBAT, u kterého jsem nahradil jednu nebo více fenylových skupin arylem obsahujícím elektrondonorní nebo elektronakceptorní skupinu, s cílem studovat roli této substituce na chemoselektivitu fluorace. Fenyly jsem také nahradil racemickou [2.2]paracyklofanovou skupinou (pcf) s cílem vypracovat postup pro přípravu chirálních fluoračních činidel. Pro syntézy jsem využil reakce fluorsilanů s Grignardovými činidly. Intermediáty 1 jsem následně převedl reakcí s TBAF na difluorsilikáty 2. Chemoselektivitu nukleofilní fluorace připravených silikátů 2 jsem studoval na sérii primárních a sekundárních alkylbromidů a alkyl-mesylátů. Zatímco modifikace elektrondonorní MeO skupinou vedla k lepší chemoselektivitě než u činidel TBAF a TBAT, substituce elektronakceptorní CF₃ skupinou měla za následek sníženou reaktivitu.

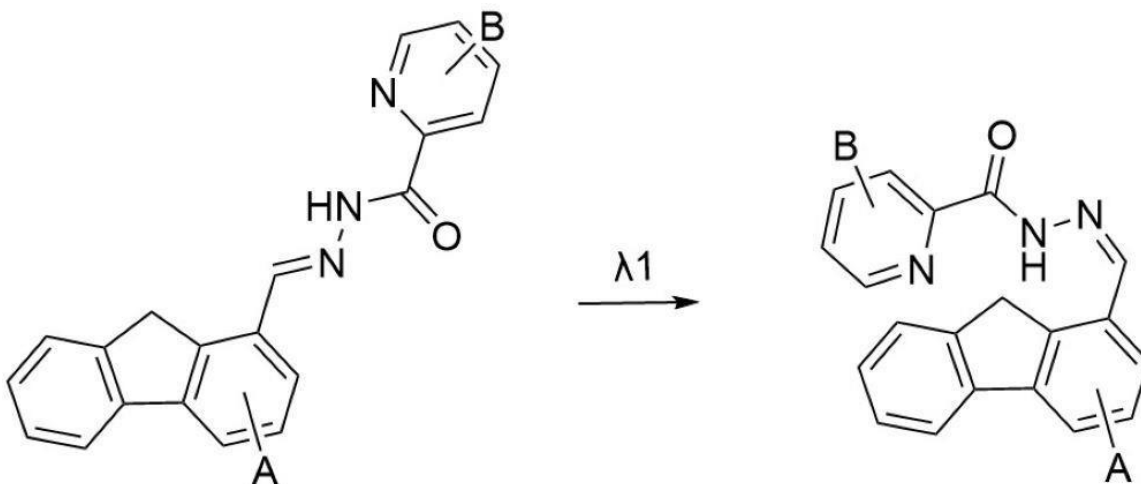


Photoswitchable organic frustrated Lewis pairs

Bc. Anna Nožičková (M1)

Školitel: Ing. Petr Kovaříček, Ph.D.

Frustrated Lewis pairs are molecules simultaneously activating electrophilic and nucleophilic sites in a substrate for a catalytic transformation. My target is to prepare organocatalytic analogues which are activated by light using acylhydrazone photoswitches. Acylhydrazones undergo C=N isomerization upon light excitation bringing in proximity two active sites of the molecule. My work focuses on acylhydrazones that change by photoisomerization the relative distance in between acidic and basic sites in the molecule which can thus serve as an light-activated organocatalyst.

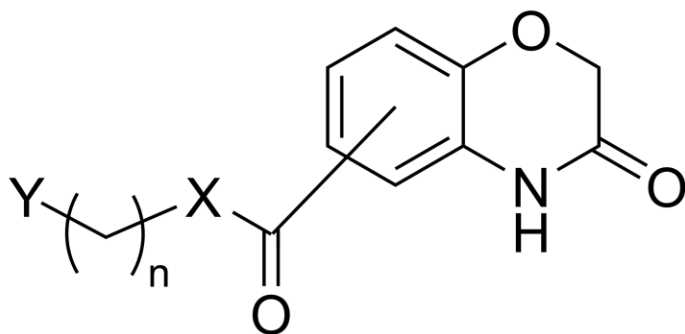


Small-molecule ligands for DC-SIGN receptor

Bc. Vojtěch Kramný (M2)

Školitel: Ing. Petra Ménová, Ph.D.

Viruses can enter mammalian cell by exploiting many different mechanisms. One of the possibilities is through the carbohydrate binding receptors expressed on the cell surface, such as the DC-SIGN receptor. It is well known that the carbohydrate binding site of this receptor is very shallow and hydrophilic, making it a challenging target for medicinal chemistry. However, low-affinity, small lipophilic ligands are known to bind to several secondary binding sites. Methods of fragment-based drug discovery can be used for discovery of novel compounds by growing or linking fragments together. The aim of this project is to find novel compounds with DC-SIGN inhibitory activity. Our first approach is linking a low-affinity fragment together with mannose, the receptor's natural ligand. Such compounds have been shown to have higher affinity than mannose or ligand themselves, although the exact binding mode is yet to be clarified. Secondly, connecting benzoxazinone carboxylates and amine- or alcohol-containing fragment could lead to secondary site binding allosteric ligands.



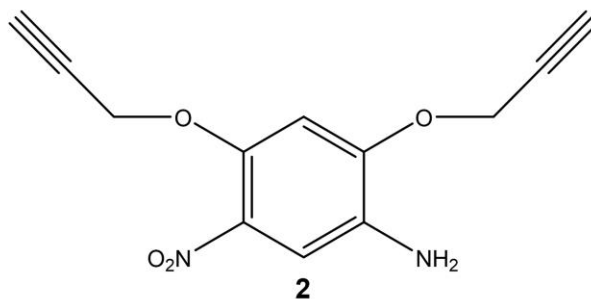
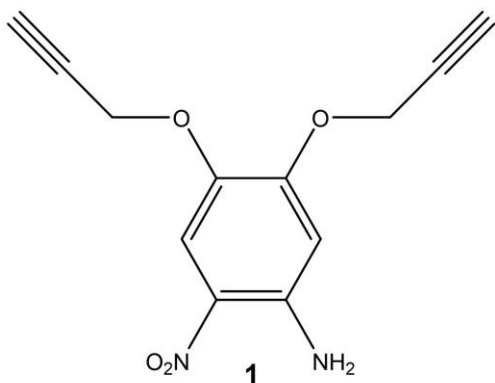
X = N or O
n = 0 – 5
Y = mannose
or amine

Příprava vhodných prekurzorů pro syntézu močovinových makrocyklů

Bc. Eliáš Vrbovský (M1)

Školitel: Ing. Michal Himl, Ph.D.

Práce se zabývá syntézou vhodných prekurzorů 2-nitro-4,5-bis(prop-2-yn-1-yloxy)anilinu (1) a 5-nitro-2,4-bis(prop-2-yn-1-yloxy)anilinu (2), které budou využity k přípravě substituovaných močovinových makrocyklů. V práci je diskutováno několik syntetických přístupů, které vychází z komerčně dostupného resorcinolu a pyrokatecholu nebo z 1,2 a 1,3-difluorbenzenu.

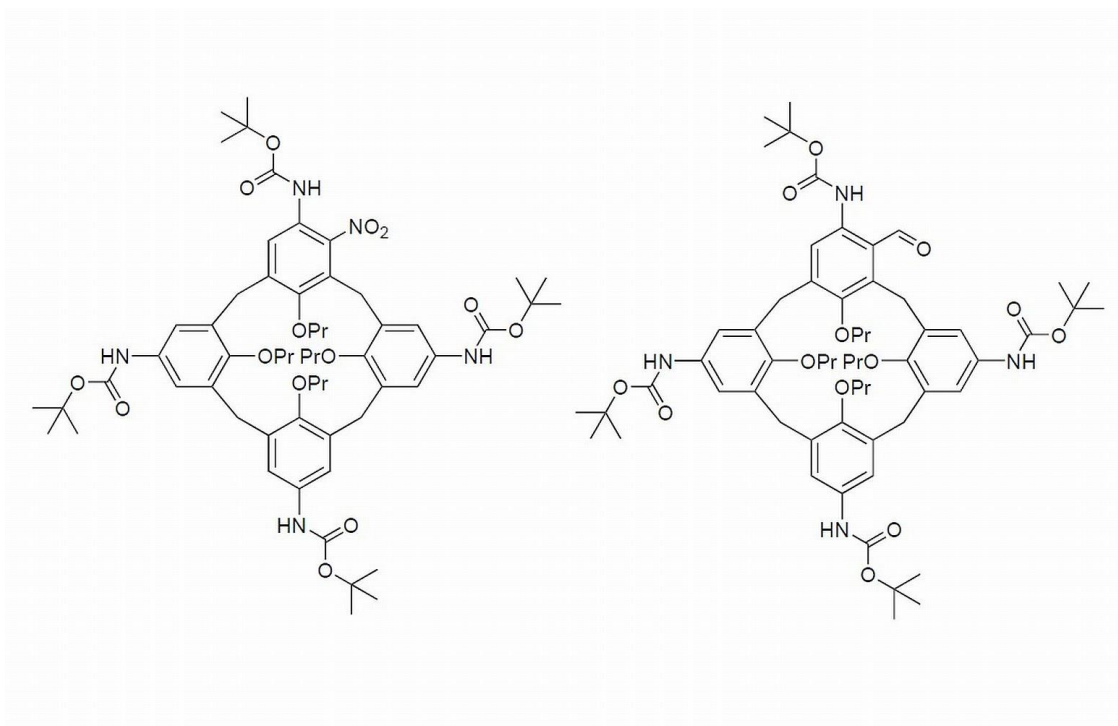


meta-Derivatizace para-aminocalix[4]arenového skeletu

Bc. Michal Churý (M2)

Školitel: doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.

Calixareny jsou známy tím, že se využívají k syntéze supramolekulárních receptorů. Typickou je pro ně substituce v aktivované *para*-poloze, avšak existuje i možnost *meta*-substituce, kdy je narušena symetrie molekuly a vznikají inherentně chirální struktury. Cílem této práce je syntéza takovýchto derivátů, separace enantiomerů a jejich využití k tvorbě chirálních aniontových receptorů. V této práci byla pro tvorbu *meta*-derivátů zvolena strategie zavedení aminoskupin do *para*-polohy, jejich ochrání pomocí Boc_2O a využití jejich aktivujících vlastností k derivatizaci *meta*-polohy za vzniku inherentně chirálních derivátů. Tímto způsobem byly provedeny pokusy o zavedení nitroskupiny a o *ortho*-lithiaci s následnou formylací. Takto derivatizovaný skelet je vhodný pro tvorbu heterocyklů, zavádění skupin obsahujících močovinový strukturní motiv a/nebo zavedení chirálních skupin pro tvorbu diastereomerů umožňujících separaci opticky čistých látek.

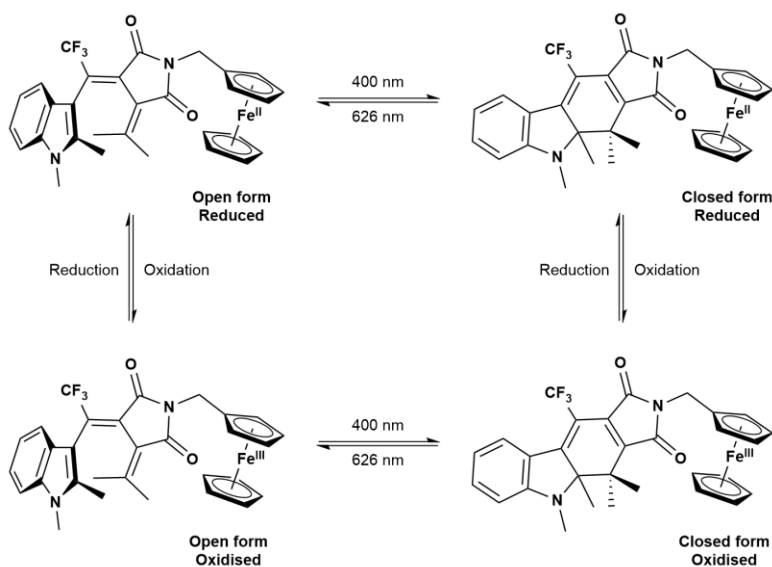


Influence of redox-active metallic complexes on fulgide-based photoswitches

Bc. Jakub Křištof (M1)

Školitel: RNDr. Tomáš Slanina, Ph.D.

My research concerns the preparation of a fulgide-based photoswitch bearing a redox-active centre and measuring its unique photochromic properties. Fluorinated indolylfulgide was chosen as a fulgide core for its high fatigue resistance and thermal stability. In addition, aminoferrocene was used as a redox-active centre. Both compounds were coupled to create a hybrid molecule containing a photoswitching fulgimide moiety and a ferrocene redox-active unit. The synthetic transformation of fulgide to fulgimide was optimized, focusing on the less reactive monoamide intermediate. The carboxylic acid group of the monoamide structure was transformed to methyl ester, which reacted more readily to afford the target fulgimide. The measured absorption properties of the prepared fulgimide proved its photoswitching upon irradiation with light of a suitable wavelength. Upon oxidation of the compound, the influence of ferrocenium was observed as a slight bathochromic shift of absorption maxima. Irradiation of oxidised forms proved that photoswitch preserves its photochromic properties even upon oxidation. To our best knowledge, this is the first functional orthogonal photoswitch based on a combination of ferrocene unit and fulgide.

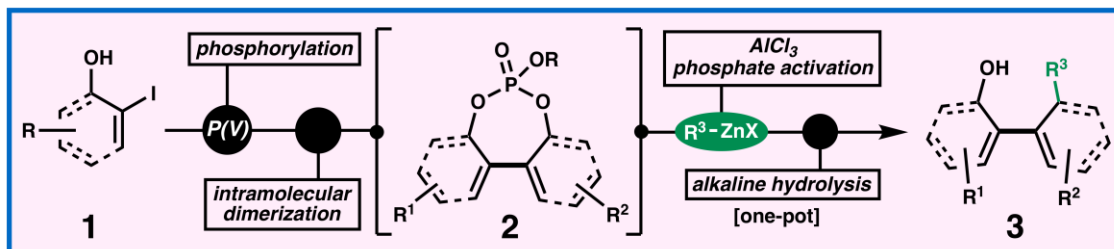


Desymmetrization strategy for the preparation of *ortho*-substituted phenols

Bc. Sergej Mrkobrada (M2)

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

The *ortho*-substituted 1,1'-biphenyl motif can be found in a number of natural substances, including aristolochic acid, cannabinol, or boldine. Unfortunately, the synthesis of unsymmetrically substituted 1,1'-biphenyls remains a challenging problem. Therefore, a novel approach for the synthesis of unsymmetrically *ortho*-substituted 1,1'-biphenyls is proposed. The proposed route takes advantage of the facile phosphorylation of *ortho*-iodophenols **1** followed by subsequent transition metal-mediated intramolecular dimerization. The final desymmetrization of biphenyl phosphate **2** is achieved by the Negishi cross-coupling.



Řízená prostorově rozlišená funkcionalizace mikroskopických skel

Bc. Margarita Faizulina (M1)

Školitel: Ing. Petr Kovaříček, Ph.D.

Sklo je jedním z nejběžnějších materiálů a uplatňuje se v různých oblastech od každodenní spotřeby až po výzkumné aplikace. Potenciál tohoto materiálu ve všech oblastech použití lze dále zvyšovat a upravovat chemickou úpravou povrchu - tato modifikace se nazývá funkcionalizace. Tento krok nám umožňuje měnit vlastnosti povrchu, který se může stát chemicky reaktivním, což okamžitě otevírá široké možnosti výzkumu v lékařství, biologii, biomedicině, chemickém inženýrství a mnoha dalších odvětvích. Cílem této práce je připravit funkcionalizovaná mikroskopická skla pro studium specifické interakce buněk pomocí super-rezoluční fluorescenční mikroskopie a pro vývoj sensorů proteinových biomarkerů.

Ústav organické technologie (111)

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](#)

Organická a farmaceutická technologie I

MÍSTO: A01

KOMISE

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

Ing. Lada Dolejšová Sekerová, Ph.D.

Ing. Jiří Trejbal, Ph.D.

Ing. Jan Patera, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Bc. Barbora Haláková](#) (M2, prof. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.)

Studium smáčivosti povrchu interaktivních směsí meloxikam-nosič

09:15 [Bc. Mariia Hryhoruk](#) (M2, Ing. Adam Karaba, Ph.D.)

Vývoj metody ke stanovování anionických tenzidů ze stěrů z výrobního zařízení

09:30 [Bc. Lukáš Koláčný](#) (M2, Ing. Martin Veselý, Ph.D.)

Kombinace skenovacího a transmisního elektronového mikroskopu pro studium vnitřní struktury materiálů

09:45 [Bc. David Novák](#) (M2, prof. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.)

Variabilita šarží účinné látky jako faktor v optimalizaci mísícího procesu

10:00 [Bc. Petra Přibyllová](#) (M2, Ing. Iva Paterová, Ph.D.)

Směsné oxidy jako katalyzátory pro Baeyerovu-Villigerovu oxidaci β -cyklocitralu

10:15 [Ing. Lukáš Sainer](#) (M2, Ing. Lenka Hašková)

Příprava acetalů furfuralu

10:30 [Bc. Martina Slaná](#) (M2, Ing. Iva Paterová, Ph.D.)

Heterogenně katalyzovaná kondenzace kamfolenického aldehydu s propanalem

10:45 [Tatiana Vargina](#) (M2, Ing. Maria Kotova, Ph.D.)

Příprava adamantan-1-yl acetátu.

Studium smáčivosti povrchu interaktivních směsí meloxikam-nosič

Bc. Barbora Haláková (M2)

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

Jednou z dlouhodobých výzev řešených formulačním inženýrstvím je hledání technologických způsobů zlepšení biologické dostupnosti špatně rozpustných léčiv. Zvýšení rozpouštěcí rychlosti je jedním z řešení a je možné jej dosáhnout prostřednictvím interaktivních směsí zahrnujících léčivo nanesené na povrchu pevného nosiče. Vzniklý strukturovaný povrch tvořený doménami hydrofilnějšího nosiče a hydrofobního léčiva je klíčový pro smáčivost celého systému, určuje jeho povrchovou energii a v konečném důsledku i kinetiku uvolňování léčiva. Cílem této práce je proto studium interakce kapaliny s uvedenými strukturovanými povrchy binárních formulací měřením povrchové energie. Strukturované povrchy byly připraveny pomocí nanášení suspenze meloxikamu na povrch tablet Neusilinu US2. Následným měřením kontaktního úhlu na povrchu bylo možné potvrdit souvislost mezi smáčivostí a množstvím nanesené účinné látky. V širším kontextu je možné na základě získaných dat dospět ke zobecnění vlivu struktury povrchu na smáčivost systémů hydrofobního léčiva naneseného na hydrofilnější nosič.

Vývoj metody ke stanovování anionických tenzidů ze stěrů z výrobního zařízení

Bc. Mariia Hryhoruk (M2)

Školitel: Ing. Adam Karaba, Ph.D.

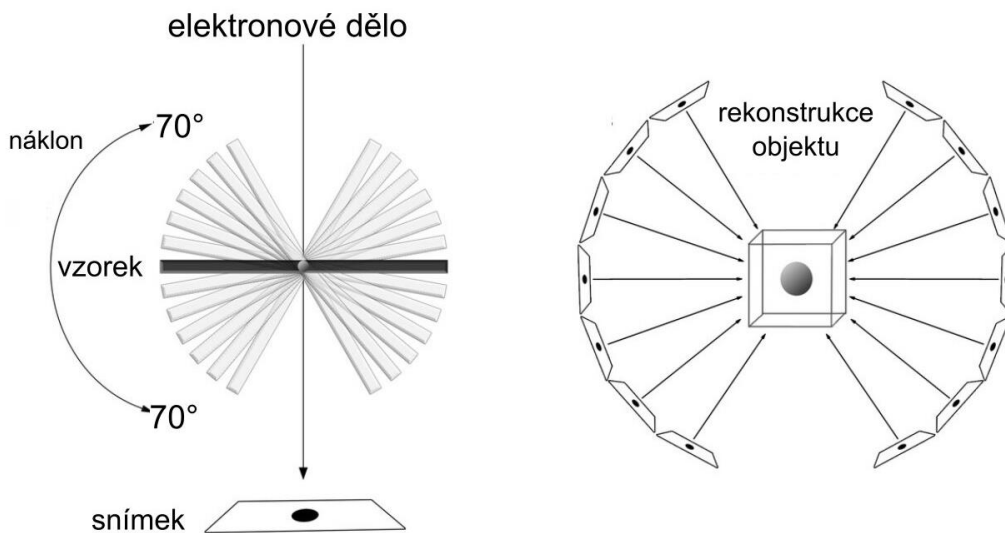
Vývoj metody ke stanovování anionických tenzidů ze stěrů z výrobního zařízení Tato práce se zabývá ověřením a optimalizací MBAS metody pro použití ve farmaceutickém průmyslu. Pomocí standardní MBAS metody lze spolehlivě stanovit obsah anionických tenzidů při validaci čisticích procesů ve farmacii. Standardní MBAS metoda dle normy ČSN EN 903 (ISO 7875-1:1984 modifikovaná) vyžaduje nepřímé vzorkování (stanovení tenzidů v oplachové vodě). Metoda je navíc poměrně pracná a časově náročná. Z těchto důvodů se zdá vhodné standardní metodu převést na přímé vzorkování, a to ze stěru. Standardní metoda byla kalibrována a testována s důrazem na ověření opakovatelnosti a mezí detekce. Byly podrobně ověřovány faktory, které mohou mít vliv na tuto metodu při vzorkování ze stěru. Bylo zjištěno, že nejdůležitějším krokem je pečlivé setření vzorků z povrchů. Další modifikace metody dle dostupné literatury by mohly zjednodušit provedení pro obsluhu farmaceutických zařízení.

Kombinace skenovacího a transmisního elektronového mikroskopu pro studium vnitřní struktury materiálů

Bc. Lukáš Koláčný (M2)

Školitel: Ing. Martin Veselý, Ph.D.

Tomografie je v medicíně a materiálové vědě postup pro získání prostorové (3D) informace o lidském těle nebo materiálu, přičemž k zobrazování lze využít různých záření, jako mohou být fotony či elektrony. V případě využití transmitovaných elektronů mluvíme o elektronové tomografii umožňující pracovat s prostorovým 3D rozlišením kolem 1 nm, což je typický rozměr TEM analýzy. Obecný princip elektronové tomografie je založen na pozorování stejného objektu při různých úhlech náklonu vzhledem k svazku elektronů. Byť je tento obecný postup známý, tak proces přípravy vzorků, snímání vzorků a vyhodnocování dat je nutné pro konkrétní akviziční zařízení (TEM) a software adjustovat. Vzhledem k tomu, že elektronová tomografie nebyla prozatím na VŠCHT Praha aplikována, je nutný vývoj metodiky, která umožní přesnost a efektivitu metody. Vývoj metodiky zahrnuje přípravu vzorku na skenovacím elektronovém mikroskopu pomocí iontového děla, snímání vzorku na transmisním elektronovém mikroskopu a zpracování obrazových dat do finální prostorové informace o rozložení materiálu.



Variabilita šarží účinné látky jako faktor v optimalizaci mísícího procesu

Bc. David Novák (M2)

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

Pro proces přímého tabletování je důležité, aby směs vstupující do tabletovacího lisu byla dostatečně homogenní. Je proto nezbytné k přípravě této směsi použít takový mísící proces, který zaručí, že uniformita připravených tablet bude vyhovující. Problém s přípravou homogenní směsi může nastat například ve chvíli, kdy dojde ke změně dodavatele účinné látky (API), protože fyzikálně-chemické vlastnosti této látky nemusí být vždy podobné. Připravené směsi lišící se v použité API vyráběné podle shodné mísící strategie tak nemusí mít vždy stejnou míru homogenity. Příčinou mohou být například rozdíly ve velikostech částic, tvaru krystalů, polymorfii atd. V této práci byly zkoumány vybrané vlastnosti tří různých šarží API bisoprolol fumarátu, ze kterých byly postupně podle pěti různých mísících strategií připraveny směsi určené pro přímé tabletování. Výsledná homogenita směsi vyjádřená variačním koeficientem byla porovnána s naměřenými hodnotami velikosti částic, kohezivity API a segregačními koeficienty směsí připravených vybranými mísícími strategiemi. Výsledky následně poskytují informace o snadnosti inkorporace zkoumané účinné látky do směsi excipientů. Tento poznatek může pomoci s rozhodováním o uspořádání mísícího procesu i u nově vyráběných tablet.

Směsné oxidy jako katalyzátory pro Baeyerovu-Villigerovu oxidaci β -cyklocitralu

Bc. Petra Příbylová (M2)

Školitel: Ing. Iva Paterová, Ph.D.

Baeyerova-Villigerova oxidace je chemická reakce, při které keton (či cyklický keton) reaguje s oxidačním činidlem za vzniku odpovídajícího esteru (či laktonu). Stejnou reakci lze provést také s aldehydem. Jako oxidační činidla lze pro reakci použít organické peroxokyseliny nebo peroxidy. Použití slabších oxidačních činidel vyžaduje také přítomnost katalyzátorů v reakční směsi. Tato práce byla zaměřena na Baeyerovu-Villigerovu oxidaci β -cyklocitralu na 2,6,6-trimethylcyklohexenolformiát, který je následně hydrolyzován na 2,6,6-trimethylcyklohexanon. Jako oxidační činidlo byl použit peroxid vodíku a v roli katalyzátorů vystupovaly směsné oxidy modifikované cínem. Konverzi reagující látky či selektivitu k vznikajícím produktům lze ovlivnit několika parametry. Mezi testované parametry byly zařazeny zejména teplota, způsob dávkování oxidačního činidla, zvolené rozpouštědlo a také druh katalyzátoru. Pro Baeyerovu-Villigerovu oxidaci β -cyklocitralu byl použit směsný oxid s molárním poměrem Mg/Al 2. Nejvyšší konverze bylo dosaženo v acetonitrilu při 80 °C při jednorázovém podání celého množství H_2O_2 (0,6 ml), kdy β -cyklocitral po 5 hodinách zreagoval ze 45 % a selektivita k žádaným produktům (formiátu a cylohexanonu) byla 60 %.

Příprava acetalů furfuralu

Ing. Lukáš Sainer (M2)

Školitel: Ing. Lenka Hašková

Furfural, aldehyd odvozený od furanu, je jedna z nejstarších látek izolovaných z obnovitelných zdrojů. Získává se ze zemědělských odpadů, jako jsou např. piliny nebo otruby. Furfural a jeho deriváty nachází své využití v zemědělství a farmacii. Tetrahydrofurfural, derivát furfuralu, je využíván v přípravcích pro kožní terapii. Lze ho připravit hydrogenací acetalů furfuralu, kde acetalové skupiny slouží k ochráněním karbonylové skupiny. Cílem této práce byla příprava acetalů furfuralu. Acetaly byly připraveny reakcí furfuralu s alkoholy katalyzovanou anorganickými kyselinami či zeolity. Byl sledován vliv typu katalyzátoru a alkoholu na průběh reakce. Reakce byly porovnávány z hlediska dosažené konverze furfuralu a selektivity k daným acetalům. Při reakci vedené v přítomnosti methanolu (za refluxu, 68 °C) bylo při použití 5 hm. % kyseliny sírové po 2 hodinách dosaženo téměř totální konverze.

Heterogenně katalyzovaná kondenzace kamfolenického aldehydu s propanalem

Bc. Martina Slaná (M2)

Školitel: Ing. Iva Paterová, Ph.D.

Práce se zabývá optimalizací reakčních podmínek heterogenně katalyzované aldolové kondenzace kamfolenického aldehydu s propanalem. Cíleným produktem je 2-methyl-4-(2,2,3-trimethylcyklopent-3-en-1-yl)but-2-enal, který nalézá využití především jako meziprodukt pro výrobu vonných látek typu santalového dřeva, jakými jsou například Santalinol či Brahmanol. Tyto látky se mohou připravit selektivní hydrogenací 2-methyl-4-(2,2,3-trimethylcyklopent-3-en-1-yl)but-2-enalu. Kromě ceněných vonných vlastností, byla u Brahmanolu také prokázána antimikrobiální účinnost s vysokou bezpečností a malým vlivem na střevní mikroflóru. Nejlepších výsledků (konverze kamfolenického aldehydu 76 % a selektivity k žádanému produktu 81 %) bylo dosaženo při vedení reakce v ethanolu, za refluxu propanalu s použitím hydrotalcitu jako katalyzátoru s molárním poměrem Mg:Al 3,5 v množství 40 hm. % vůči kamfolenickému aldehydu a při postupném dávkování propanalu ve 3 dávkách během první hodiny reakce.

Příprava adamantan-1-yl acetátu.

Tatiana Vargina (M2)

Školitel: Ing. Maria Kotova, Ph.D.

V literatuře jsou popsány různé syntetické postupy pro přípravu esterů primárních, sekundárních a terciárních alkoholů. Primární alkoholy tvoří estery snadněji než alkoholy sekundární. Syntéza esterů terciárních alkoholů probíhá obtížně a s nízkými výtěžky v důsledku sterického bránění hydroxylové skupiny. Hodně esterů terciárních alkoholů mají biologickou aktivitu a nacházejí se uplatnění ve farmaceutickém průmyslu. Např. adamantan-1-ylacetát je výchozí látkou při přípravě protichřipkového léčiva rimantadinu. Kromě toho adamantan-1-ylacetát je doporučen k použití při veterinární léčbě Newcastleké choroby. Cílem této práce byla příprava esteru terciárního alkoholu – adamantan-1-ylacetátu. K přípravě esteru byly použity různé syntetické postupy, jako jsou Fisherova a Steglichova esterifikace, acetylace alkoholu anhydridem kyseliny octové a acetylace alkoholu acetylchloridem. Jako katalyzátory pro tyto syntézní postupy byly použity minerální kyseliny, Steglichův katalyzátor DMAP a Lewisové kyseliny. Byl sledován vliv druhu katalyzátoru a rozpouštědla (dichlormethan, hexan, methanol, butanol, tetrahydrofuran a acetonitril) na selektivitu reakce a reakční rychlost.

Organická a farmaceutická technologie II

MÍSTO: A81A

KOMISE

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

Ing. Maria Kotova, Ph.D.

Doc. Ing. Bohumír Dvořák, CSc.

Ing. Adam Karaba, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Bc. Veronika Hrůzová](#) (M1, prof. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.)

Studium vlivu lubrikantu na formulaci vysokodávkových tablet s ibuprofenem

09:15 [Linda Chárová](#) (M1, Ing. Iva Paterová, Ph.D.)

Heterogenně katalyzovaná aldolová kondenzace skořicového aldehydu s butanalem

09:30 [Bc. Marie Kaňková](#) (M1, doc. Ing. Eliška Vyskočilová, Ph.D.)

Izomerace α -pinenoxidu s využitím nových katalyzátorů

09:45 [Bc. Zuzana Kubešová](#) (M1, doc. Mgr. Jarmila Zbytovská, Dr. rer. nat.)

Spojení lipidových nanoformulací s urychlovači permace - budoucnost transdermálního podání?

10:00 [Bc. Jiří Machyán](#) (M1, Ing. Tereza Školáková, Ph.D.)

Disoluce a stabilita kokrystalů acykloviru

10:15 [Bc. Martin Mařa](#) (M1, Ing. Jan Patera, Ph.D.)

Zlepšování rychlosti rozpouštění špatně rozpustné léčivé látky mletím

10:30 [Bc. Jana Mušková](#) (M1, Ing. Maria Kotova, Ph.D.)

Redukce 3-fenylpropanové kyseliny

Studium vlivu lubrikantu na formulaci vysokodávkových tablet s ibuprofenem

Bc. Veronika Hrůzová (M1)

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

Tablety vyráběné metodou přímého lisování (DC) jsou neekonomičtější volbou farmaceutických firem při vývoji nových lékových forem. Vlastnosti takových směsí a z nich připravených tablet však většinou nevyhoví striktním kritériím pro masovou výrobu. Cílem tohoto výzkumu je formulovat směs pro výrobu tablet s vysokým obsahem ibuprofenu (IBU) metodou DC. V prvotní fázi výzkumu bylo hodnoceno široké spektrum binárních (IBU + modelové plnivo) a ternárních směsí s obsahem lubrikantu (stearan hořečnatý) s ohledem na jejich kompaktační charakteristiky. Současná fáze výzkumu je zaměřena na doplnění hodnotícího kritéria formulací z hlediska vyrobitelnosti o ukazatele charakterizující rozpad a disoluční chování připravených tablet. Pro lisování tablet byl využit hydraulický lis Specac a jejich rozpad byl proveden na přístroji Sotax DisiTest 50. Z doposud provedených pilotních experimentů vyplývá, že s rostoucím obsahem lubrikantu klesá ve směsi s mikrokrytalickou celulórou (MCC) doba rozpadu (t) tablety. Naopak při sledování rostoucí doby míchání lubrikantu ve směsi se projevuje spíše trend růstu t. Při celkovém zhodnocení směsi s MCC se zahrnutím všech dosud studovaných charakteristik se jako nejlepší jeví směs s 0,75 hm.% lubrikantu a dobou míchání 1-5 min.

Heterogenně katalyzovaná aldolová kondenzace skořicového aldehydu s butanalem

Linda Chárová (M1)

Školitel: Ing. Iva Paterová, Ph.D.

Aldolová kondenzace je jednou ze základních reakcí organické chemie, umožňující prodloužení uhlíkatého řetězce pomocí vzniku nové C-C vazby. Práce se zabývá aldolovou kondenzací skořicového aldehydu s butanalem za využití heterogenních katalyzátorů typu hydrotalcitu, kdy žadáným produktem této reakce je 2-ethyl-5-fenyl-2,4-pentadienal. Právě produkty aldolové kondenzace skořicového aldehydu s alifatickými aldehydy jsou součástí syntézy vonných látek s potencionálním uplatněním v parfumářském průmyslu. Cílem práce byla optimalizace podmínek dané reakce. Podmínky reakce byly vybrány tak, aby bylo dosaženo vysokých hodnot konverze a selektivity k žadanému produktu - 2-ethyl-5-fenyl-2,4-pentadienal. Jako nejvhodnější byla vybrána teplota reakce 70 °C, poměr výchozích látek butanalu ku skořicovému aldehydu 2:1 a methanol jako rozpouštědlo. Pro reakci byly využity rehydratované hydrotalcity s poměrem Mg:Al iontů 3,1:1 a hmotnostním poměrem katalyzátoru vůči skořicovému aldehydu 0,2:1. Za těchto podmínek po 4. hodině reakce bylo dosaženo konverze skořicového aldehydu 68 % a selektivity k žadanému produktu 89 %.

Izomerace α -pinenoxidu s využitím nových katalyzátorů

Bc. Marie Kaňková (M1)

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

Tato práce byla zaměřena na kysele katalyzovanou izomeraci α -pinenoxidu s použitím nových katalyzátorů. Cílem bylo připravit katalyzátory na bázi zeolitů Beta s obsahem tantalu či niobu a sledovat jejich vliv na průběh reakce. Pozornost byla věnována především vlivu na selektivitu ke dvěma žádaným produktům – kamfolenickému aldehydu a trans-karveolu. Obě látky nacházejí využití v parfumářství nebo potravinářském a farmaceutickém průmyslu. Dva druhy zeolitů byly modifikovány kovy ve dvou formách impregnační metodou. Takto připravené katalyzátory byly charakterizovány a použity pro reakci α -pinenoxidu. Nejvyšší selektivity (52 %) k trans-karveolu bylo dosaženo při použití katalyzátoru s nosičem Beta-25 modifikovaným chloridem niobičným a DMSO jako rozpouštědla. Selektivita ke kamfolenickému aldehydu se ve všech experimentech pohybovala mezi 30–38 %. Významný vliv na selektivitu k produktům mělo použité rozpouštědlo. S rostoucí bazicitou rozpouštědla rostla selektivita k trans-karveolu a zároveň klesala ke kamfolenickému aldehydu. Připravené katalyzátory tedy je možno použít pro izomeraci α -pinenoxidu.

Spojení lipidových nanoformulací s urychlovači permeace - budoucnost transdermálního podání?

Bc. Zuzana Kubešová (M1)

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

Topické podání léčiv je v současné době předmětem řady výzkumů, jelikož poskytuje mnoho výhod oproti jiným způsobům podání. Je neinvazivní, nedochází k first-pass efektu ani k dráždění trávicího traktu a obecně má méně vedlejších účinků. Překonání ochranné kožní bariéry je však nesnadný a poměrně pomalý proces. Proto se tato práce zaměřovala na zvýšení efektivity absorpce léčiv kůží za pomoci použití lipidových nanotobolek v kombinaci s urychlovači permeace. Nanoformulace slouží jako nosič – enkapsuluje léčivou látku v lipidovém jádře, čímž zvyšuje její rozpustnost ve formulaci a chrání ji před degradací. Urychlovače permeace pak dočasně rozrušují kožní bariéru a umožňují tak snazší průnik léčiva do organismu. Spojením těchto přístupů lze tedy zvýšit koncentraci léčiva obsaženého ve formulaci a zvýšit efektivitu jeho permeace kůží. Byly připraveny lipidové nanotobolky s obsahem dvou různých léčiv – diklofenaku sodného a indomethacinu. Součástí nanoformulací byly také různé urychlovače kožní absorpce – isopropylmyristát, Azone[®] a N-alkylmorfoliny Mo12 a Mo14. Byl sledován jejich vliv na základní charakteristiky částic (velikost, polydisperzitu a stabilitu) a jejich efektivita transdermální absorpce *in vitro* permeačními experimenty.

Disoluce a stabilita kokrystalů acykloviru

Bc. Jiří Machyán (M1)

Školitel: Ing. Tereza Školáková, Ph.D.

V současné době má mnoho léčivých látek malou rozpustnost ve vodě, což vede i k jejich pomalému vstřebání. Jedním z možných řešení je zlepšení rozpouštění takové API. V této práci bylo studováno disoluční chování tablet (tbl.) kokrystalů acykloviru s kyselinou fumarovou, jako možnou formulací ke zlepšení rozpouštění, dále radiální pevnost těchto tbl. a vliv tepelné zátěže na jejich stabilitu. Radiální pevnost vykazovala převážně lineární závislost na aplikovaném lisovacím tlaku. Výrazná odchylka se projevila pouze u tbl. zatěžovaných při 60 °C, která byla pravděpodobně způsobena nestabilitou tbl. Zrychlení rozpouštění v kyselém prostředí oproti tbl. čistého acykloviru bylo dosaženo u tbl. lisovaných při nejnižších tlacích (50 MPa) bez tepelné zátěže a zatěžovaných při 30 a 40 °C. Důvodem je pravděpodobně zanedbatelná degradace tbl. ovlivňující disoluci, vyšší pórovitost tbl. a větší povrch částic způsobený přípravou kokrystalů metodou mletí s přikapáváním rozpouštědla. Tbl. namáhané při 50 °C vykazovaly nízkou rychlost rozpouštění. Ve fosfátovém pufru se tbl. rozpouštěly pomaleji než v kyselém prostředí a byl více pozorovatelný vliv lisovacího tlaku na rychlost rozpouštění. Zlepšení rozpouštěcí rychlosti oproti čistému acykloviru bylo dosaženo pouze u tbl. lisovaných při 50 MPa.

Zlepšování rychlosti rozpouštění špatně rozpustné léčivé látky mletím

Bc. Martin Mařa (M1)

Školitel: Ing. Jan Patera, Ph.D.

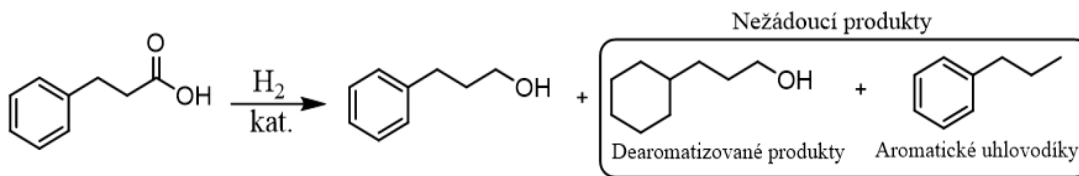
V současnosti je největším problémem při vývoji nových léčiv špatná rozpustnost ve vodném prostředí, což významně komplikuje formulaci lékové formy. Je proto důležitým cílem výroby zvýšení rozpustnosti a rychlosti rozpouštění léčivých látek a tím i zvýšení biodostupnosti. Používají se různé metody modifikace účinné látky. Mezi jednu z možných modifikací patří zlepšení disolučních vlastností mletím. Cílem práce bylo charakterizovat změny v disolučním chování špatně rozpustné léčivé látky technikou mletí. Jako modelová látka bylo zvoleno analgetikum indometacin. Byly připraveny vzorky indometacinu s odlišnou dobou mletí a ty byly postupně testovány prostřednictvím disoluce v průtokové cele. Současně byla měřena velikost částic pomocí laserové difrakce a u vybraných vzorků byla měřena i povrchová energie inverzní plynovou chromatografií. Pomocí rentgenové práškové difraktometrie byl nakonec zkoumán vliv mletí na vznik amorfní fáze. Výsledky ukázaly, že s prodlužující se dobou mletí se velikost částic indometacinu snižuje a roste rozpouštěcí rychlost. Nárůst je nejvíce znatelný při přechodu z nemletého vzorku na mletý. Mikronizací se zvyšovala celková povrchová energie a nedocházelo k zásadní změně krystalinity a vzniku amorfní fáze, pouze ke změně preferované orientace krystalů.

Redukce 3-fenylpropanové kyseliny

Bc. Jana Mušková (M1)

Školitel: Ing. Maria Kotova, Ph.D.

Redukce karboxylových kyselin za vzniku alkoholů je zajímavou reakcí pro farmaceutický, potravinářský a kosmetický průmysl. Katalytická hydrogenolýza karboxylových kyselin je přímá a účinná syntetická metoda pro získání alkoholů. Při použití heterogenních katalyzátorů pro redukcí karboxylových kyselin s aromatickým zbytkem bylo zjištěno, že ve většině případů dochází k přednostní hydrogenaci aromatického kruhu před redukcí karboxylové skupiny nebo k odštěpení celé hydroxylové skupiny a vzniku aromatických uhlovodíků (Obr. 1). Výtěžek požadovaného alkoholu je často natolik nízký, že v porovnání s ostatními produkty je až zanedbatelný. Při řešení tohoto problému se jeví jako vhodná cesta použití katalyzátorů na bázi rhenia, které je známo svými schopnosti katalyzovat redukcí karboxylové skupiny na alkohol s vysokými výtěžky. Cílem práce byla redukce 3-fenylpropanové kyseliny na různých kovových nosičových katalyzátorech. Byly použity nosičové katalyzátory Pd/C, Ru/C, Pt/C, a v rámci práce připravený Re/TiO₂. Použité katalyzátory byly porovnány z hlediska účinnosti. Byl sledován vliv typu kovu a reakčních podmínek na rychlost hydrogenace, případně hydrogenolýzy a selektivitu k jednotlivým produktům.



Obr. 1: Produkty redukce 3-fenylpropanové kyseliny

Organická a farmaceutická technologie III

MÍSTO: A77C

KOMISE

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

Ing. Tereza Školáková, Ph.D.

Ing. Martin Veselý, Ph.D.

Ing. Eva Zapletalová, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Bc. Kateřina Čermáková](#) (M1, doc. Mgr. Jarmila Zbytovská, Dr. rer. nat.)

Příprava a charakterizace polymerních nanočástic s diklofenakem

09:15 [Bc. Helena Hinterholzová](#) (M1, Ing. Iva Paterová, Ph.D.)

Hydrogenace dehydrosantalínu

09:30 [Bc. Marcel Mimra](#) (M1, prof. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.)

Vliv složení formulace na mikrostrukturu a disoluční vlastnosti tablet

09:45 [Bc. Huyen Thao Nguyen](#) (M1, Ing. Tereza Školáková, Ph.D.)

Studium lisovatelnosti kokystalů acykloviru

10:00 [Bc. Tereza Staňková](#) (M1, prof. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.)

Studium kinetiky dezintegrace modelových systémů ibuprofen-laktóza-rozvolňovadlo

10:15 [Bc. Anna Šmídová](#) (M1, Ing. Lada Dolejšová Sekerová, Ph.D.)

Optimalizace syntézy Pt(IV) komplexů s 1-adamantylaminovým ligandem jako proléčiv s potenciální cytostatickou aktivitou

10:30 [Bc. Matúš Švichký](#) (M1, Ing. Jan Patera, Ph.D.)

*Batch-to-batch variabilita Hansenových parametrov rozpustnosti stanovená
prostřednictvím IGC*

Příprava a charakterizace polymerních nanočástic s diklofenakem

Bc. Kateřina Čermáková (M1)

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

Nesteroidní analgetikum diklofenak se kromě léčby bolesti používá i na léčbu aktinické keratózy. Jeho biologická dostupnost z komerčně dostupného hyaluronového gelu je problematická. Cílem je zefektivnění této formulace uzavřením diklofenaku do nanočástic z kopolymeru mléčné a glykolové kyseliny (PLGA) v molárních poměrech 75:25 a 50:50. Výsledné nanočástice připravené metodou nanoprecipitace obsahovaly 0,05 hm. % a 0,1 hm. % diklofenaku. Následně z nich byl připraven gel o 2 hm. % hyaluronové kyseliny. Morfologie gelu byla pozorována pomocí transmisní elektronové mikroskopie. Závěrem studie byl *in vitro* permeační experiment přes prasečí kůži, jímž byla ověřena účinnost nově vyvinutých gelů. Pomocí HPLC byly stanoveny hodnoty hmotnostního toku diklofenaku přes kůži a jeho množství zachycené v kůži. Studie potvrdila efektivitu PLGA nanočásticových hyaluronových gelů s diklofenakem z hlediska zachycení diklofenaku v kůži i prostupu přes kůži. Gel nanočástic s 0,05 hm. % diklofenaku dosahoval 1,4 -1,6krát větší intenzity hmotnostního toku vůči gelu s 0,5 hm. % suspendovaného diklofenaku a 1,7krát většího množství zachyceného v kůži.

Hydrogenace dehydrosantalínu

Bc. Helena Hinterholzová (M1)

Školitel: Ing. Iva Paterová, Ph.D.

Práce se zabývá optimalizací reakčních podmínek dehydrosantalínu za vzniku látek Sandal Mysore Core a Brahmanol. Sandal Mysore Core i Brahmanol jsou vonné látky využívající se v parfumářském průmyslu, Brahmanol je navíc navržen jako potenciální léčivo neurodegenerativních onemocnění a onemocněních souvisejících s poruchou pigmentace (Parkinsonova choroba, melanom). V rámci optimalizace reakčních podmínek byl sledován vliv teploty, tlaku, použitého rozpouštědla, typu a množství katalyzátoru na konverzi výchozí látky a selektivitu k Brahmanolu. Bylo dosaženo 100 % konverze dehydrosantalínu a došlo ke vzniku Brahmanolu se selektivitou 76 % za následujících podmínek: teplota 130 °C, tlak 7 MPa, rozpouštědlo methanol, 15 hm. % NiSAT 340 RS ku dehydrosantalínu. Hydrogenace probíhala po dobu 6 hodin. Závěrem této práce byla provedena hydrogenace ve 30x zvětšeném měřítku, kdy došlo ke vzniku Brahmanolu se selektivitou 58 %.

Vliv složení formulace na mikrostrukturu a disoluční vlastnosti tablet

Bc. Marcel Mimra (M1)

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

Cílem výzkumu bylo zjistit a popsat vztah mezi složením formulace, mikrostrukturou a disolučními vlastnostmi tablet. Modelové tablety byly připravovány ze 6 formulací, které se lišily obsahem účinné látky amlodipinu a pomocných látek – $\text{CaHPO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ a mikrokryсталické celulózy. Tablety byly lisovány za použití tří lisovacích tlaků. Byl tedy zkoumán i vliv lisovacího procesu na mikrostrukturu a disoluční chování tablet. Jednotlivé tablety byly podrobeny analýze na skenovacím elektronovém mikroskopu (SEM), pro objasnění jejich mikrostruktury v závislosti na složení dané formulace a použitém lisovacím tlaku. Snímky ze SEM byly následně pomocí manuální a automatické segmentace v programu MATLAB® vyhodnoceny z hlediska rozložení částic v tabletě. Disoluční zkouška probíhala na zařízení s průtokovou celou. Bylo zjištěno, že tablety v závislosti na složení uvolňují účinnou látku odlišnými způsoby. Z výsledků lze usoudit, že pro disoluční chování tablet je její mikrostruktura určující a může sloužit jako mezičlánek při snahách o vysvětlení vztahu mezi způsobem přípravy a disolučním chováním. Aplikačním výstupem této práce je zhodnocení možností formulace amlodipinu se špatně rozpustnými sartany, které by převzaly roli jedné z nerozpustných pomocných látek, do kombinovaného přípravku.

Studium lisovatelnosti kokrystalů acykloviru

Bc. Huyen Thao Nguyen (M1)

Školitel: Ing. Tereza Školáková, Ph.D.

Acyklovir je antivirotikum, které je dle Biofarmaceutického klasifikačního systému pro API řazeno do třídy IV, tedy mezi látky s nízkou rozpustností a permeabilitou. Tvorbou právě kokrystalů by mohla být rozpustnost, a tedy i výsledná biodostupnost zvýšena. Cílem této práce bylo zvolit vhodného kokrystalizačního partnera pro acyklovir a pomocí viskoelastických charakteristik a mechanických vlastností prostudovat chování tablet vzniklých kokrystalů. V rámci práce byly provedeny zkoušky lékopisné zkoušky, tj. stanovení radiální pevnosti, oděru a doby rozpadu. Bylo zjištěno, že tablety kokrystalu acykloviru a kyseliny fumarové připravené v ekvimolárním poměru vykazovaly vyšší radiální pevnost než tablety čistého acykloviru. Ze zkoušky rozpadavosti vyplynulo, že čím vyšší tlak byl při přípravě tablet použit, tím delší byla doba jejich rozpadu. V rámci zkoušky pro oděr tablet bylo experimentálně dokázáno, že míra oděru tablet kokrystalu byla ve srovnání s tabletami čistého acykloviru a tabletami odpovídající fyzikální směsi výrazně nižší. Na základě vyhodnocení výsledků zkoušek rozpadavosti, radiální pevnosti a oděru byly sestaveny, tzv. pracovní oblasti, díky nimž bylo prokázáno, že největší pracovní oblast měl právě kokrystal,

Studium kinetiky dezintegrace modelových systémů Ibuprofen-laktóza-rozvolňovadlo

Bc. Tereza Staňková (M1)

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

Dezintegrace tablet je komplexní proces, který hraje významnou roli při zajištění účinnosti tablet v lidském těle. Za účelem ovlivnění tohoto procesu se do tablet přidávají rozvolňovadla, která usnadňují následný rozpad tablety v lidském těle na menší částice. Dalším faktorem ovlivňující tento proces je lisovací tlak tablety, který pomáhá zajistit její požadovanou pevnost. Společně tedy tyto dva faktory hrají podstatnou roli pro výsledné chování tablety v lidském těle. Tato práce se zabývá studiem procesu dezintegrace tablet modelového systému Ibuprofen-laktóza-rozvolňovadlo v závislosti na použitých lisovacích tlacích. Tablety byly připraveny s použitím 5 rozdílných lisovacích tlaků a jejich rozpad byl pozorován pomocí optického mikroskopu s následnou analýzou pořízených snímků v softwaru NIS Elements. Pro popsání kinetiky dezintegrace tablet byl využit matematický model založený na populační bilanci, kde na základě regresní analýzy byly získány kinetické koeficienty popisující rozpad tablety na jednotlivé velikostní třídy. Lze tedy získat informace nejenom o tom, jak se lisovací tlak projeví na výsledné velikosti částic během dezintegrace tablety, ale i na způsobu a rychlosti její dezintegrace. Získání těchto informací může poté pomoci s následnou optimalizací tohoto procesu.

Optimalizace syntézy Pt(IV) komplexů s 1-adamantylaminovým ligandem jako proléčiv s potenciální cytostatickou aktivitou

Bc. Anna Šmídová (M1)

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

Platinová cytostatika v oxidačním stavu IV jsou v dnešní době jednou ze zkoumaných alternativ k doposud schváleným Pt(II) komplexům. Prvním platinovým cytostatikem zavedeným do klinické praxe se stala cisplatina na konci 60. let. Ta se kvůli své vysoké účinnosti využívá dodnes i přes to, že vyvolává vážné nežádoucí účinky způsobené nízkou selektivitou k nádorovým buňkám. Platičité komplexy se na rozdíl od Pt(II) cytostatik využívají jako proléčiva a na aktivní formu se přeměňují až po vstupu do buňky. Tím je dosaženo zlepšení cytostatické aktivity a snížení nežádoucích účinků. Jejich významnou výhodou je také možnost perorálního podání. V rámci této studie byla provedena optimalizace reakčních podmínek tříkrokové syntézy modelového komplexu LA-12 (bis(acetáto)(1-adamantylamin)amindichloroplatičitý komplex), a sice druhu báze, rozpouštědla, molárního poměru výchozích látek, teploty a reakční doby. Následně byla za optimalizovaných podmínek připravena čtyři strukturní analoga lišící se acylovým ligandem v axiální poloze (trimethylkarbonyl-, cyklopropankarbonyl-, cyklohexankarbonyl-, 1-adamantylkarbonyl-), jelikož právě obměna tohoto ligandu může ovlivnit některé vlastnosti komplexu, které jsou důležité pro jeho farmakokinetický profil, např. lipofilitu nebo rozpustnost ve vodě.

Batch-to-batch variabilita Hansenových parametrov rozpustnosti stanovená prostřednictvím IGC

Bc. Matúš Švichký (M1)

Školitel: Ing. Jan Patera, Ph.D.

Rozpustnost je jedna z nejdůležitějších vlastností vo farmaceutickom priemysle. Práve vďaka nej je možné určiť rýchlosť vstrebávania alebo tiež absorpcie, či rýchlosť nástupu účinku. Absorpciu v značnej miere ovplyvňuje permeabilita membrán či voľba vhodných excipientov. Tieto excipienty neovplyvňujú len rozpustnosť ale aj farmakokinetiku či farmakodynamiku. Práve k výberu excipientov pre formuláciu novej či inovatívnej liekovej formy sa ukazujú Hansenove parametre rozpustnosti (HSP) ako jedna z možných ciest. Parametre dobre popisujú interakcie medzi rozpúšťadlom a rozpúšťanou látkou a preto by mohli byť použité na určenie rozpustnosti samotnej API vo vodnom prostredí alebo aj na výber vhodných excipientov. Parametre môžu byť rovnako využité k určeniu tzv. batch-to-batch variability, teda k stanoveniu rozdielov fyzikálne-chemických vlastností rôznych šarží od rôznych výrobcov. Cieľom práce bolo stanoviť hodnoty HSP jednej modelovej účinnej látky od štyroch rôznych výrobcov a ich následné porovnanie. Parametre boli stanovené experimentálne za využitia inverznej plynovej chromatografie kvôli dostatočnej citlivosti pre charakterizáciu vlastností povrchu vzoriek. Výsledky ukazujú, že HSP sú citlivé nie len na charakter skúmanej látky, ale aj na jej možný spôsob prípravy.

Organická a farmaceutická technologie IV

MÍSTO: S02

KOMISE

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

prof. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.

Ing. Tomáš Sommer, Ph.D.

Ing. Martina Pitínová, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Valérie Bížová](#) (B3, Ing. Iva Paterová, Ph.D.)

Aldolová kondenzace kamfolenického aldehydu s butanalem

09:15 [Radek Ludas](#) (B3, prof. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.)

Studium vlivu vnější lubrikace na proces lisování tablet Trazodon hydrochloridu

09:30 [Bc Josef Uher](#) (M1, Ing. Maria Kotova, Ph.D.)

Hydrogenace furfuralu s využitím katalyzátorů na bázi niklu a mědi

09:45 [Monika Valovičová](#) (B3, Ing. Lenka Hašková)

Otevírání kruhu (R)-benzylglycidyletheru

10:00 [Bc. Jana Vostrá](#) (M1, doc. Ing. Eliška Vyskočilová, Ph.D.)

Příprava hydrofóbních silikátů

10:15 [Bc. Šimon Zahradník](#) (M1, prof. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.)

Metody nanášení mikrosuspenzí léčiv určených pro přípravu nosičových systémů

Aldolová kondenzace kamfolenického aldehydu s butanalem

Valérie Bížová (B3)

Školitel: Ing. Iva Paterová, Ph.D.

2-ethyl-4-(2,2,3-trimethyl-3-cyclopenten-1-yl)-2-butenal, známý jako Levosandal, je průmyslově významná látka nacházející svoje využití především v parfumérském průmyslu jako intermediát pro výrobu Levosandalu, také nazývaného Bacdanol. Bacdanol je látka s vůní santalového dřeva, chemická syntéza takových látek je velmi žádaná, protože přírodně získávaný olej ze santalového dřeva je drahý a málo dostupný. Tato práce je zaměřená na optimalizaci reakčních podmínek aldolové kondenzace butanalů s kamfolenickým aldehydem za vzniku cíleného produktu Levosandalu. Reakce probíhala za použití homogenního bazického katalyzátoru. Jsou studovány různé reakční podmínky, a to vliv typu rozpouštědla, teploty a poměru výchozích látek a vliv koncentrace, množství a typu katalyzátoru. Nejlepších výsledků bylo dosaženo při vedení reakce v N,N-Dimethylformamidu za teploty 75°C, kdy docházelo k refluxu butanalů. Butanal byl v molárním poměru ku kamfolenickému aldehydu 2:1 a jako katalyzátor byl použit 36% roztok NaOH v množství 40 mol. % vůči kamfolenickému aldehydu. Při takových podmínkách bylo po 30 minutách reakce dosaženo 100% konverze kamfolenického aldehydu a 86,8% selektivity vůči Levosandalu.

Studium vlivu vnější lubrikace na proces lisování tablet Trazodon hydrochloridu

Radek Ludas (B3)

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

Trazodon hydrochlorid (dále jen Trazodon) je antidepresivum vyráběné především ve formě tobolek, neboť lisování tablet je komplikované jeho lepivostí, v důsledku čehož tablety nedosahují požadované kvality. Výroba tobolek je však pomalejší a ekonomicky náročnější. Proto by optimalizace výroby Trazodonu formou tablet byla z pohledu průmyslu přínosná, a to zejména z důvodu úspory času, energie a materiálu. Tato práce studuje efekt vnější lubrikace a snížení lepivosti stearanem hořečnatým na parametry lisovacího procesu a kvalitu vylisovaných tablet Trazodonu. Pozornost byla věnována vlivu lubrikace na zdánlivou hustotu tablet (ρ_T), pevnost (T_S), separační napětí (τ_D) a ejekční napětí (σ_E). Pro lisování tablet byl využit kompaktní analyzátor Gamlen GTP-1, který umožňuje vyhodnotit studované τ_D a σ_E . Pro měření T_S byl použit přístroj Sotax Multitest 50, který rovněž poskytl informace o rozměrech tablet potřebných pro zjištění ρ_T . Z výsledků bylo zjištěno, že efekt vnější lubrikace je benefitní pro všechny zkoumané parametry. Lubrikant napomáhá k lepšímu přeuspořádání částic API v matici, což vede k vyšší ρ_T a T_S . V případě τ_D a σ_E lze pozorovat naopak pokles hodnot v důsledku zmenšení třecích sil v průběhu lisování a snazší proces vytlačení tablety z matrice.

Hydrogenace furfuralu s využitím katalyzátorů na bázi niklu a mědi

Bc Josef Uher (M1)

Školitel: Ing. Maria Kotova, Ph.D.

Furfural je v přírodě se vyskytující látka, která je připravována pro průmyslové využití semisynteticky. Cílem této práce byla hydrogenace furfuralu na různých heterogenních katalyzátorech zejména na bázi niklu a mědi. Žadánymi produkty byly furfurylalkohol, tetrahydrofurfural a tetrahydrofurfurylalkohol. Ty nacházejí využití v nejrůznějších odvětvích průmyslu, jako například ve farmacii, palivářství (biopaliva) a také ve slévárenství. Byl sledován vliv typu kovu a reakčních podmínek na rychlost hydrogenace a selektivitu k jednotlivým produktům. Tetrahydrofurfural se v rámci této práce připravit nepodařilo. Furfurylalkohol byl připraven hydrogenací furfuralu za použití všech katalyzátorů. V přítomnosti katalyzátorů na bázi mědi dosahovala konverze i selektivita k furfurylalkoholu 100 %. Za přítomnosti niklového katalyzátoru NiSAT 340 RS byl také připraven furfurylalkohol se 100% selektivitou. Konverze furfuralu činila po třech hodinách 84 % za teploty 100 °C a tlaku 5 MPa. Tetrahydrofurfurylalkohol byl připraven pouze za použití katalyzátoru nikl alloy 1200. Po 3 hodinách při teplotě 50 °C a tlaku 2 MPa byla dosažena 99% konverze furfuralu a selektivita k tetrahydrofurfurylalkoholu činila 34 %.

Otevírání kruhu (R)-benzylglycidyletheru

Monika Valovičová (B3)

Školitel: Ing. Lenka Hašková

Nukleofilní otevírání epoxidového cyklu je často využívanou reakcí v organické syntéze. Jedná se o jeden z nejsnazších způsobů přípravy 2-aminoalkoholů, které jsou součástí struktur mnohých léčivých látek. Tato práce je zaměřena především na konkrétní reakci v rámci syntézy jednoho z fragmentů léčiva tezakaftoru používaného k léčbě cystické fibrózy. Jako reaktant zde vystupuje předem připravený 2-brom-5-fluor-4-nitroanilin, který atakuje (R)-benzylglycidylether na jeho stericky méně bráněném uhlíku. Reakce probíhá v toluenu jako rozpouštědle za přítomnosti Lewisovy kyseliny jako katalyzátoru. Vzhledem k tomu, že navrhovaná Lewisova kyselina je komerčně dostupná ve formě hydrátu a reakce má probíhat v bezvodém prostředí, přidávají se do směsi také molekulová síta jako adsorbenty vody. Podle patentu je katalyzátorem studované reakce chloristan zinečnatý, dále bude vyzkoušen také chloristan sodný či chlorid zirkoničitý. Za přítomnosti 2 ekvivalentů (R)-benzylglycidyletheru a 20 mol. % chloristanu zinečnatého vůči výchozí látce bylo dosaženo konverze 70%. Součástí této práce je studium průběhu reakce za přítomnosti různých katalyzátorů či způsob přidávání samotného (R)-benzylglycidyletheru do reakční směsi. Cílem práce je především zjištění optimálních podmínek reakce.

Příprava hydrofóbních silikátů

Bc. Jana Vostrá (M1)

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

Práce je zaměřena na přípravu MCM-41 a jeho modifikaci hydrofobními skupinami. Jako modifikátory byly použity: triethoxy(ethyl)silan, trimethoxy(2-phenylethyl)silan, isobutyl(trimethoxy)silan, trimethoxy(oktadecyl)silan, triethoxy(vinyl)silan, (3aminopropyl)triethoxysilan. Připravené hydrofobizované materiály byly charakterizovány pomocí elementární analýzy, UV/Vis spektroskopie a sorpce dusíku, pro zjištění specifického povrchu a objemu pórů materiálů. Následně byly materiály testovány pro možné využití v oblasti sorpce hydrofobních látek z kapalně a plynné fáze. Zatímco pro fyzisorpci limonenu, antracenu, acetaminofenu a ibuprofenu z kapalně fáze na isobutylem (1:1) modifikovaný materiál byly výsledky neuspokojivé, z plynné fáze materiál (Isobutyl (1:1), vinyl, oktadecyl) testovací látku (limonen) sorboval. Materiál má tedy potenciál pro využití v oblasti sorpce těkavých organických polutantů ze vzduchu.

Metody nanášení mikrosuspenzí léčiv určených pro přípravu nosičových systémů

Bc. Šimon Zahradník (M1)

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

Zlepšení biodostupnosti perorálně podávaných léčiv lze docílit zlepšením permeability a rozpustnosti. Jelikož lze rozpustnost ovlivnit pouze omezeně, lze se u léčiv s vysokou permeabilitou (třída II biofarmaceutického klasifikačního systému, BCS) spokojit se zvýšením rozpouštěcí rychlosti. Toho lze dosáhnout například snížením velikosti částic léčiva, a tedy zvýšením jeho specifického povrchu, pokud se podaří malé částice stabilizovat a zabránit jejich agregaci. Cílem této práce je prozkoumat možnosti naplnění uvedeného cíle pomocí systémů s nanesenou mikrosuspenzí. Během studie byla prozkoumána kinetika mokrého mletí a připraveny mikrosuspenze modelové látky meloxikamu, spadajícího do třídy II BCS. Následně byly tyto suspenze naneseny na dobře smáčivý porézní nosič Neusilin® US2 s cílem zlepšení uvolňování a fixace velikosti částic účinné látky. Poté byla provedena obrazová analýza pomocí SEM a disoluční testy, aby bylo možné směsi porovnat a zhodnotit z hlediska efektivity nanášecí metody a rychlosti uvolňování API. Bylo zjištěno, že porézní nosič přispívá k uniformitě nanesení částic léčiva na jeho povrch. Optimálních disolučních vlastností dosahovaly systémy s určitou mírou pokrytí povrchu, menší než 100 %.

Ústav polymerů (112)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Monika Hittlová

SEZNAM SEKČÍ

1. [Chemie a technologie polymerů: Inženýrství polymerů](#)
2. [Chemie a technologie polymerů: Syntéza polymerů](#)

Chemie a technologie polymerů: Inženýrství polymerů

MÍSTO: B123

KOMISE

Doc. Kuta (předseda)

Doc. Hrdlička

Dr. Kalousková

PROGRAM

08:45 **zahájení**

09:15 [Michaela Jindrová](#) (B3, Ing. Drahomír Čadek, Ph.D.)

Vulkanizační chování směsí epoxidovaného přírodního kaučuku a termoplastického bramborového škrobu

09:35 [Bc. Adriana Šmejkalová](#) (M1, Ing. Radka Kalousková, CSc.)

Měkčení PVC poly(ϵ -kaprolaktonem) připraveným in situ v přítomnosti Ca iniciátoru

09:55 [Bc. Jonáš Priškin](#) (M1, Ing. Alena Kadeřábková, Ph.D.)

Vývoj aditivních biodegradabilních materiálů

10:15 [Bc. Nikolai Perminov](#) (M1, Ing. Drahomír Čadek, Ph.D.)

Pokročilé hodnocení zpracovatelnosti přírodního kaučuku

10:35 [Bc. Štěpán Maštalíř](#) (M2, Ing. Radka Kalousková, CSc.)

Využití (kaprolaktammagnesium)bromidu jako iniciátoru polymerace ϵ -kaprolaktonu a stabilizátoru ve směsi PVC

10:55 [Bc. Eliška Manligová](#) (M2, Ing. Drahomír Čadek, Ph.D.)

Vliv přítomnosti oxidu zinečnatého na vulkanizaci přírodního kaučuku peroxidem

11:15 [Bc. Dominik Březina](#) (M2, Ing. Alena Kadeřábková, Ph.D.)

Vliv rozměrů zkušebních těles na tahové vlastnosti pryže

Vulkanizační chování směsí epoxidovaného přírodního kaučuku a termoplastického bramborového škrobu

Michaela Jindrová (B3)

Školitel: Ing. Drahomír Čadek, Ph.D.

Termoplastický bramborový škrob (TPS) je kompletně biodegradabilní polysacharid, který by mohl přispět k menšímu využívání nerozložitelných plastů a celkově tak k udržitelnému nakládání s polymerními materiály. Díky přidavku změkčovadla, jako je například glycerol, získá škrob termoplastické vlastnosti, stává se méně křehkým a je zpracovatelný běžnými plastikářskými technikami. Stále je ovšem náchylný k navlhnutí a jeho mechanické vlastnosti nejsou uspokojivé. Bylo prokázáno, že přídavek epoxidovaného přírodního kaučuku (ENR) zlepšuje mechanické vlastnosti směsi, např. pevnost v tahu, a to i do takové míry, že je vyšší než pevnost v tahu samotného ENR. Cílem této práce je vyzkoušet, jak budou výše zmíněné vlastnosti směsi ENR/TPS ovlivněny vulkanizací. Za tímto účelem byly připraveny směsi s různým poměrem ENR a TPS, které byly zvulkanizovány a následovala analýza výsledného materiálu, z pohledu mechanických vlastností, navlhavosti a kompostovatelnosti.

Měkčení PVC poly(ϵ -kaprolaktonem) připraveným in situ v přítomnosti Ca iniciátoru

Bc. Adriana Šmejkalová (M1)

Školitel: Ing. Radka Kalousková, CSc.

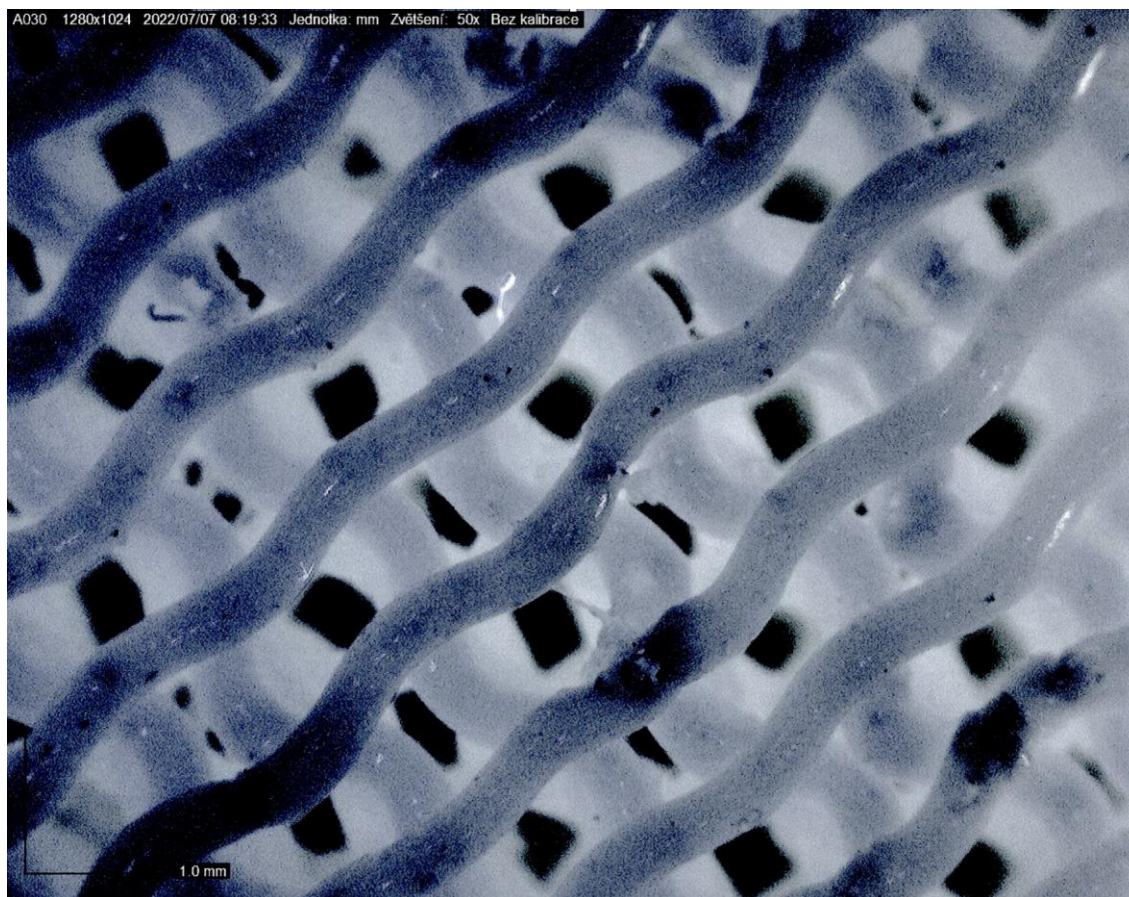
Předmětem práce je příprava ekologického polymerního změkčovadla na bázi ϵ -kaprolaktonu a jeho aplikace v polyvinylchloridu. K iniciaci polymerizace ϵ -kaprolaktonu byl použita sloučenina na bázi vápníku /bis(ϵ -kaprolaktamát) vápenatý/, vápník je na rozdíl od běžně užívaných kovů v organokovových iniciátorech ekologicky a zdravotně nezávadný. Ca iniciátor se osvědčil i jako stabilizátor PVC. V modelových reakcích byla sledována rychlost polymerizace ϵ -kaprolaktonu v závislosti na teplotě a koncentraci iniciátoru a získaný polyester byl využit k měkčení a stabilizaci PVC. Zmíněný iniciátor byl aplikován i při polymeraci ϵ -kaprolaktonu in situ v hnětiči při přípravě měkčených směsí PVC/poly(ϵ -kaprolakton). U směsí pak byl sledován rozsah přeměny ϵ -kaprolaktonu, rozsah naměkčení a tepelná stabilita PVC.

Vývoj aditivních biodegradabilních materiálů

Bc. Jonáš Priškin (M1)

Školitel: Ing. Alena Kadeřábková, Ph.D.

Budoucnost medicínálních technologií lpí na biomateriálech a průmysl zažívá v poslední dekádě revoluci aditivní výroby. V této práci je zkoumané možné spojení obou ve formě kostních nosičů a aditivních materiálů. Bylo vyrobeno 8 polymerních směsí PLA s různými koncentracemi hydroxyapatitu a poly(akrylátu) draselného a z nich na 3d tiskárně vyrobeny vzorky pro rázové a tahové mechanické zkoušky. Ve fosfátovém pufru byly provedeny degradační studie do délky 7 dní. Z výsledků je patrný výrazný pokles Youngova modulu u vzorků s oběma aditivy. Směs s 2 % PPAC se ukázala jako hraniční pro výrobu s PLA základem při 200 °C. Všechny vzorky byly snímkovány optickým mikroskopem při x50 a x230 zvětšení ve viditelném světle, UV a tmavém poli.



Pokročilé hodnocení zpracovatelnosti přírodního kaučuku

Bc. Nikolai Perminov (M1)

Školitel: Ing. Drahomír Čadek, Ph.D.

Přírodní kaučuk vykazuje proměnlivé vlastnosti při zpracování, proto předpovědět jeho chování při zpracování není jednoduchá záležitost. K měření zpracovatelnosti se běžně užívají plasticita Wallace a viskozita Mooney, které poskytují jen omezené informace o tokovém chování přírodního kaučuku. Tato práce je zaměřená na pokročilém hodnocení zpracovatelnosti přírodního kaučuku. Jedna z použitých metod byla měření na viskozimetru Mooney doplněna různými dobami předehtěvu a otáčení. Také byl použit rheovulkametr RPA, na kterém proběhla měření v deformačním a frekvenčním programu. Dále byla použita časově náročná metoda – vytlačování s rheologickou hlavou, která vyniká vysokými smykovými rychlostmi. Různé způsoby měření, různé doby měření a programy byly mezi sebou porovnány a na jejich základě byla stanovena doporučení.

Využití (kaprolaktammagnesium)bromidu jako iniciátoru polymerace ϵ -kaprolaktonu a stabilizátoru ve směsi PVC

Bc. Štěpán Maštalíř (M2)

Školitel: Ing. Radka Kalousková, CSc.

Polymerní změkčovadla, například na bázi poly(ϵ -kaprolaktonu), jsou jednou ze slibných náhrad ftalátových změkčovadel ve směsích PVC. Oproti ftalátovým změkčovadlům mají polymerní změkčovadla zvýšenou odolnost vůči migraci z těchto směsí. Předmětem této práce je nalezení optimálních podmínek pro polymeraci ϵ -kaprolaktonu ve směsi PVC při jejím zpracování za iniciace kaprolaktam(magnesiumbromidem), následná příprava měkkčenných směsí PVC a poly(ϵ -kaprolaktonu) s využitím tohoto iniciátoru a charakterizace připravených směsí.

Vliv přítomnosti oxidu zinečnatého na vulkanizaci přírodního kaučuku peroxidem

Bc. Eliška Manligová (M2)

Školitel: Ing. Drahomír Čadek, Ph.D.

Přez se vyrábí procesem zvaná vulkanizace. Existuje spousta vulkanizačních činidel, např. síra, peroxidy a reaktivní pryskyřice. V průmyslu se vybírají podle použitého kaučuku, ale i podle požadovaných vlastností přez. Pro zjednodušení procesu či zlepšení vlastností se do kaučukové směsi přidávají přísady. Příkladem je oxid zinečnatý (ZnO), který se používá při sirné vulkanizaci společně s kyselinou stearovou. Zde v kombinaci s urychlovačem plní úkol aktivátoru – urychluje vulkanizaci, snižuje potřebnou teplotu a zvyšuje účinnost vulkanizačního činidla. ZnO se také objevuje v některých systémech s peroxidem, zde však nefunguje jako aktivátor. I přesto že se v průmyslu tato kombinace používá, konkrétní důvod přidávání ZnO k peroxidu není znám. Nejspíše funguje jako plnivo, které by mělo např. zlepšovat mechanické vlastnosti přez. V této práci se zkoumá vliv ZnO na průběh vulkanizace, mechanické vlastnosti (pevnost v tahu, tažnost), trvalou deformaci a stárnutí.

Vliv rozměrů zkušebních těles na tahové vlastnosti pryže

Bc. Dominik Březina (M2)

Školitel: Ing. Alena Kadeřábková, Ph.D.

Norma pro stanovení tahových vlastností pryžových výrobků umožňuje použití několika různých velikostí zkušebních tělísek. Na laboratorním dvouválci byly připraveny směsi přírodního a butadien-styrenového kaučuku. Nejprve byly zamíchány směsi kaučuků pouze s vulkanizačním systémem, dále pak plněné aktivním (pyrogenní oxid křemičitý) a neaktivním plnivem (křídou). Použitý vulkanizační systém byl u všech směsí shodný. Následně byly lisováním připraveny destičky o různých tloušťkách, ze kterých byla vysekána tělíska tří velikostí. S využitím přístroje Instron 3365 byly změřeny rozdíly v tahových vlastnostech připravených vzorků.

Chemie a technologie polymerů: Syntéza polymerů

MÍSTO: B11

KOMISE

Prof. J. Brožek (předseda)

Dr. Železník

Dr. A. Sokolohorskyj

PROGRAM

08:45 **zahájení**

09:15 [Lucie Reinšteinová](#) (B3, prof. Ing. Jiří Brožek, CSc.)

Degradace nanovláknenných vrstev z polyamidu 4

09:35 [Michal Handt](#) (B3, prof. Ing. Jan Merna, Ph.D.)

Příprava blokových kopolyesterů katalytickou ROP anhydridů s epoxidy

09:55 [Tomáš Doubek](#) (B3, prof. Ing. Jan Merna, Ph.D.)

Příprava koncově funkcionizovaných polyolefinů živou polymerací katalyzovanou α -diiminovými komplexy niklu a paládía

10:15 [Bc. Tomáš Beinhauer](#) (M1, prof. Ing. Jan Merna, Ph.D.)

Polymerace dicyclopentadienu pomocí metatezních a koordinačních katalyzátorů

10:35 [Bc. Karolína Zoulová](#) (M2, prof. Ing. Jan Merna, Ph.D.)

Amfifilní kopolymery na bázi chain-walking polyethylenu nesoucím termoresponzivní rouby připravenými ATRP

10:55 [Bc. Adéla Slavíková](#) (M2, prof. Ing. Jiří Brožek, CSc.)

Syntéza, charakterizace a testování biokompatibility kopolymerů na bázi polyesteramidů a polyetherů

11:15 [Bc. Hynek Urban](#) (M2, prof. Ing. Jan Merna, Ph.D.)

Chain-walking polyethylen roubovaný p(OEGMA) RAFT polymerizací

Degradace nanovláknenných vrstev z polyamidu 4

Lucie Reinšteinová (B3)

Školitel: prof. Ing. Jiří Brožek, CSc.

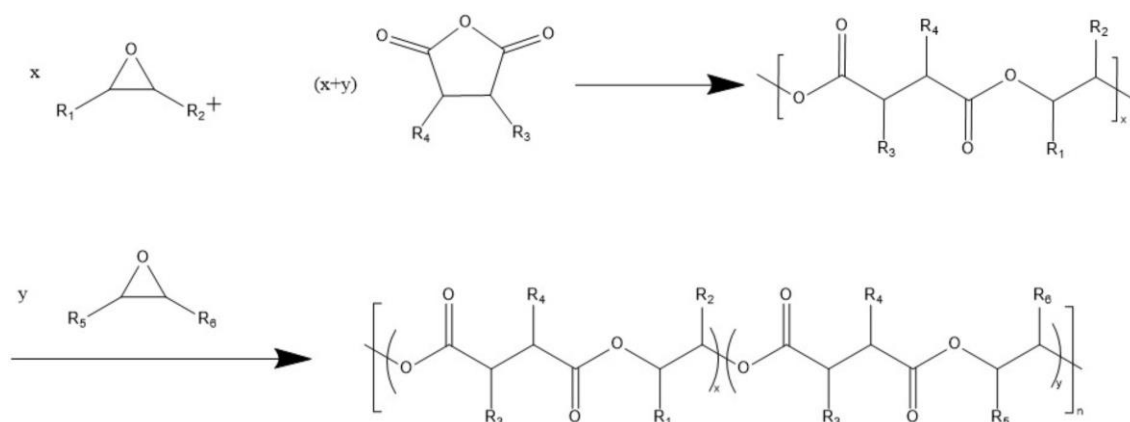
Biodegradovatelné polymery nacházejí uplatnění v medicíně ať už v cílené dopravě léků, tkáňovém inženýrství nebo v implantátech. Na základě literárních údajů je možné polyamid 4 zařadit mezi biodegradovatelné polymery, názory na jeho rozložitelnost se v literatuře ovšem různí. Proto je záměrem práce přispět k posouzení jeho degradace. Polyamid 4 je termicky nestabilní polymer a nadějnou cestou jeho zpracování je příprava nanovláknenných vrstev elektrostatickým zvlákňováním z roztoku. Vrstvy byly podrobeny dlouhodobé hydrolýze v simulovaném tělním prostředí, tj. ve fosfátovém pufru o pH 7,3 a teplotě 37 °C. Rychlost degradace v průběhu pokusu byla posuzována na základě změn hmotnostních úbytků vzorku a molární hmotnosti stanovené viskozimetrickou metodou. Doplnující informace byly získány z diferenciální snímací kalorimetrie (DSC), tj. ze změn v teplotách a entalpiích tání. Morfologie vrstev byla zkoumána pomocí skenovací elektronové mikroskopie.

Příprava blokových kopolyesterů katalytickou ROP anhydridů s epoxidy

Michal Handt (B3)

Školitel: prof. Ing. Jan Merna, Ph.D.

Blokové kopolyestery patří mezi velmi aktuální a hojně studované materiály 21. století. Za enormním zájmem o tuto problematiku stojí především vysoká variabilita užitných vlastností, které můžeme snadno modifikovat použitím velkého spektra nejen syntetických, ale zejména přírodních monomerů. Blokové kopolyestery jsou tvořené dvěma či více bloky různých polyesterů, a jsou připravené dvou či více stupňovou *one-pot* polykondenzací. V této práci se věnuji přípravě blokových polyesterů kombinací epoxidů s anhydridy, konkrétně kombinací ftalananhydridu s propylenoxidem a cyklohexanoxidem. Polymerizací těchto monomerů, iniciovanou vhodnou organickou bází, např. bis(trifenylfosfin)iminium chloridem (PPNCl), lze polymerací za otevření kruhu připravit blokové polyestery, obsahující labilní vazby, které jsou klíčem k možné biodegradovatelnosti těchto materiálů. Takové materiály pak mohou najít uplatnění v biomedicínských aplikacích, genovém inženýrství či ve farmaceutickém průmyslu, jako nosiče aktivních látek léčiva a pro jejich řízené uvolňování.

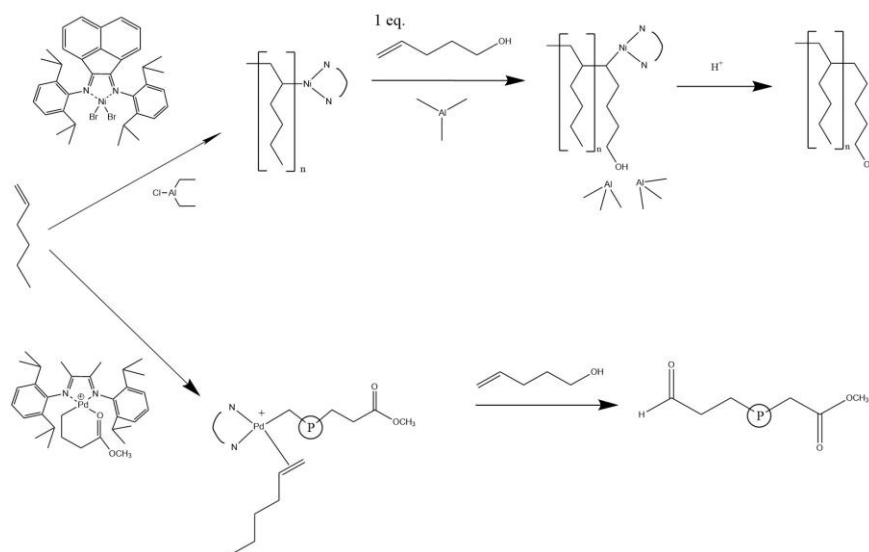


Příprava koncově funkcionalizovaných polyolefinů živou polymerací katalyzovanou α -diiminovými komplexy niklu a paládia

Tomáš Doubek (B3)

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. Strategie funkcionalizace spočívá na přidání pent-4-en-1-olu k živým polymerním řetězcům, kdy je z literatury známo, že inserce následovaná CW isomerizací koncové -OH skupiny vede u Pd katalyzovaných reakcí ke vzniku polymerů končících aldehydovou skupinou. Cílem této práce je zjistit, zda je možné takto zavádět koncové skupiny i do polymerů připravovaných niklovými katalyzátory. Pentenol je v tomto případě nutno chránit trimethylaluminím (TMA), jelikož Ni centra jsou k polárním monomerům méně tolerantní než analogická Pd centra. Studovanými parametry byla reakční teplota a molární hmotnost živých polymerů předurčená poměrem monomer/Ni (Pd) a použití nebo nepoužití TMA jako chránícího (nebo nežádoucího redukčního) činidla. Molární hmotnost získaných polymerů byla analyzována pomocí rozměrově-vylučovací chromatografie (SEC/GPC) a účinnost funkcionalizace pomocí ^1H -NMR spektroskopie.

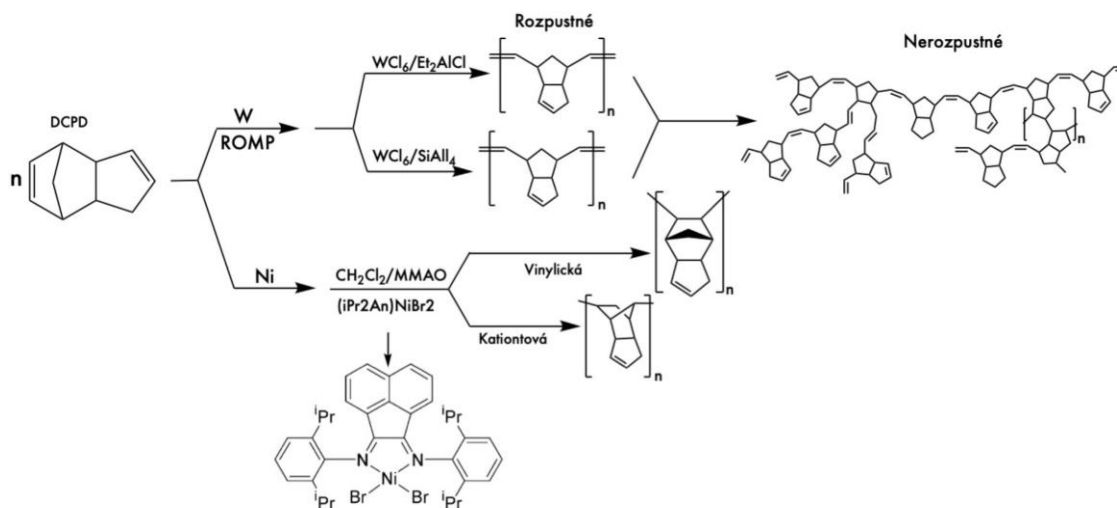


Polymerace dicyclopentadienu pomocí metatezních a koordinačních katalyzátorů

Bc. Tomáš Beinhauer (M1)

Školitel: prof. Ing. Jan Merna, Ph.D.

Dicyklopentadien (DCPD) se řadí mezi základní chemické suroviny ropného původu. Získává se frakční destilací C5 frakce a jeho současná vysoká poptávka zapříčinila spuštění nové výrobní linky na DCPD ORLEN Unipetrol v Litvínově. Z řady makromolekulárních aplikací lze zdůraznit pryskyřičné kompozice, EPDM kaučuky a kopolymery s α -olefiny. Homopolymer (PDCPD) pro své specifické mechanické vlastnosti nachází uplatnění ve formách prvků karoserie velkých strojů jako traktory, kamiony, autobusy, atd. Aplikována je polymerace metatezí za otevření kruhu (ROMP) a produktem je tuhý, vysoce pevný a nárazu odolný termoset s vysokou T_g (120 – 180 °C). Homopolymer s přidavkem změkčovadla se používá jako pryžové výrobky namáhané tlakově (podešvy bot). V této práci bylo porovnáno polymerační chování DCPD ze dvou zdrojů – ORLEN Unipetrol Litvínov před zahájením výroby a komerčně distribuovaného vzorku. Cílem bylo připravit lineární PDCPD za užití ROMP katalytických systémů WCl_6/Et_2AlCl a $WCl_6/Si(allyl)_4$ a Ni α -diiminového katalyzátoru zajišťující koordinační polymeraci běžných α -olefinů. Připravený PDCPD byl analyzován diferenciální skenovací kalorimetrií (DSC), termogravimetrickou analýzou (TGA) a v případě rozpustných vzorků rozměrově vylučovací chromatografií (SEC).

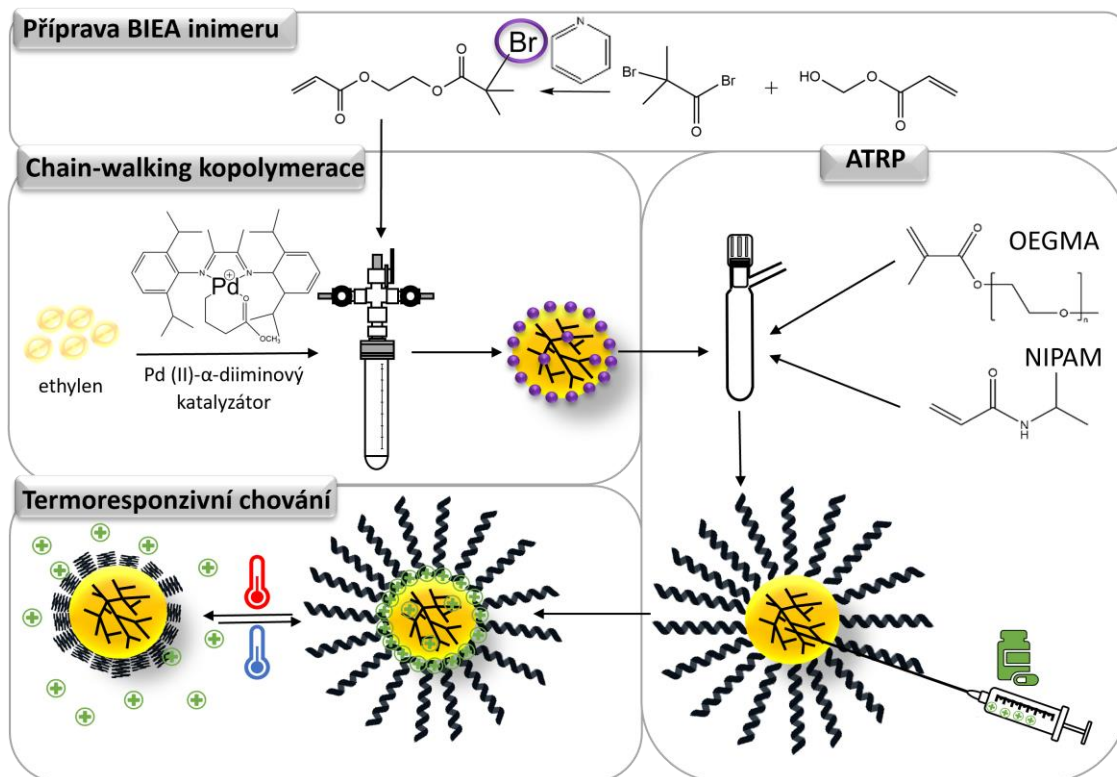


Amfifilní kopolymery na bázi chain-walking polyethylenu nesoucím termoresponzivní rouby připravenými ATRP

Bc. Karolína Zoulová (M2)

Školitel: prof. Ing. Jan Merna, Ph.D.

Termoresponzivní polymery, díky jejich schopnosti reagovat na změnu teploty, jsou považovány za polymery s velkým potenciálem v biomedicínské oblasti. Zde si již našly mnoho uplatnění, kde jednou z možností je příprava částic pro cílený transport léčiv, kterým lze omezit rizika spojená s chemoterapií a prodloužit cirkulaci léčiva v těle. Takové částice mohou být typu jádro-plášť, kde se léčivo uschované v hydrofobním jádře po zkolabování hydrofilního pláště tvořeného termoresponzivními rouby uvolní ve specifické části lidského těla. V této práci jsou připravovány kopolymery tvořené dPE jádrem připraveného chain-walking kopolymerací a pláštěm z termoresponzivních polymerů OEGMA nebo NIPAM připravených pomocí ATRP.



Syntéza, charakterizace a testování biokompatibility kopolymerů na bázi polyesteramidů a polyetherů

Bc. Adéla Slavíková (M2)

Školitel: prof. Ing. Jiří Brožek, CSc.

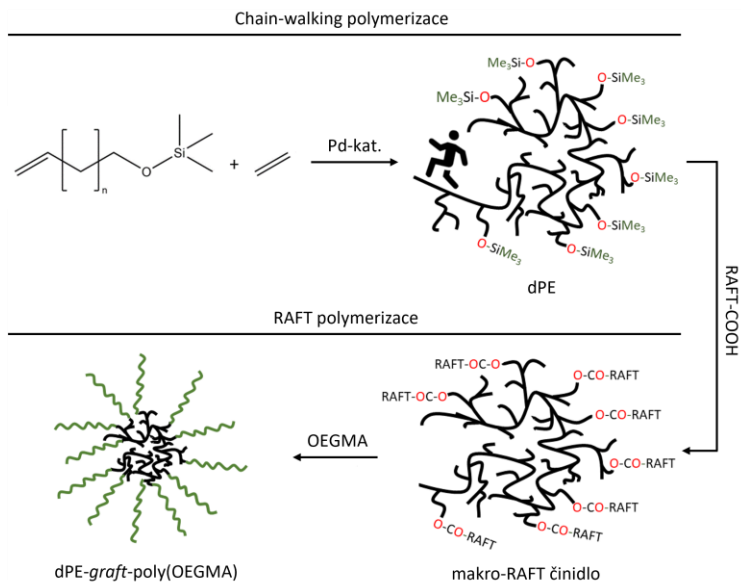
Polyesteramidy (PEA) jsou biokompatibilní a biologicky rozložitelné polymery, jejichž degradaci umožňují především esterové skupiny v řetězci. Začleněním hydrofilních segmentů do jejich struktury se zvyšuje jejich hydrofilita, rychlost degradace a také interakce s buňkami. Tento materiál může nalézt využití v biomedicínských aplikacích, například ve formě implantátu k fixaci kostí nebo jako nosič léčiv. V práci byly připraveny blokové kopolymery PEA/poly(oxyethylen) (PEA-*blok*-POE) kopolymerací ϵ -kaprolaktamu a ϵ -kaprolaktonu v přítomnosti poly(oxyethylen) (POE) s různým poměrem jak laktonových a laktamových jednotek, tak i obsahu POE. U takto připravených materiálů byl stanoven obsah kopolymeru, molární hmotnost viskozimetrickou metodou, bobtnací indexy ve vodě a byly proměřeny termické a mechanické vlastnosti. Biokompatibilita a adherence vyliisovaných PEA-*blok*-POE fólií byla hodnocena pomocí kultivace lidských multipotentních mezenchymálních stromálních buněk (MSCs) pocházejících z tukové tkáně. Metabolická aktivita buněk byla hodnocena pomocí barvení alamarBlue (resazurin), zatímco vizualizace buněk na povrchu materiálu barvivem PKH26 nebo Live/Dead barvením.

Chain-walking polyethylen roubovaný p(OEGMA) RAFT polymerizací

Bc. Hynek Urban (M2)

Školitel: prof. Ing. Jan Merna, Ph.D.

Pro zvýšení účinnosti léčiv, potlačení vedlejších účinků nebo zlepšení diagnostiky si moderní medicína oblíbila využití nanočástic na bázi amfifilních molekul schopných transportovat nepolární obsah. Nanočástice na bázi syntetických polymerů, oproti v medicíně zaběhlých liposomům, mají nezměrnou výhodu v možnostech řízení jejich architektury. Jednou z metod, které otevírají tuto cestu je řízená radikálová polymerizace RAFT. Cílem mé práce je ověřit za použití chain-walking (CW) a RAFT polymerizace přípravu amfifilních molekul s nepolárním dendritickým polyethylenovým (dPE) jádrem roubovaným polárním oligo(ethylenglykol) methyl ether metakrylátem (OEGMA). Nejprve je nutné zdokonalit RAFT polymerizaci OEGMA se standardním RAFT činidlem tak, aby bylo dosaženo úzké distribuce molárních hmotností a byla zaručena uniformita pláště. Dále víceukroková příprava makro-RAFT činidla na bázi dPE CW kopolymerizací ethylenu a alken-olu na Pd katalyzátoru. Hydroxy skupina alken-olu bude před polymerizací ochráněna trimethylsilylovou skupinou. RAFT činidlo ve formě kyseliny se na alken-ol váže esterifikací. V posledním kroku RAFT polymerizace OEGMA pomocí připraveného makro-RAFT činidla.



Ústav inženýrství pevných látek (126)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Alena Řezníčková, Ph.D.

SEZNAM SEKČÍ

1. [Materiálové inženýrství I](#)
2. [Materiálové inženýrství II](#)

Materiálové inženýrství I

MÍSTO: B350

KOMISE

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

prof. Ing. Václav Švorčík, DrSc.

Ing. Alena Řezníčková, Ph.D.

prof. Ing. Zdeňka Kolská, Ph.D.

Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.

doc. Ing. Jaromír Lederer, CSc.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Bc. Terezie Altnerová](#) (M2, Ing. Ondřej Kvítek, Ph.D.)

Kompozity na bázi bakteriální nanocelulózy

09:15 [Bc. Terezie Burianová](#) (M2, Ing. Roman Elashnikov, Ph.D.)

Využití materiálů na bázi poly(N-isopropylakrylamidu) pro měkkou robotiku

09:30 [Bc. Jakub Dědek](#) (M2, prof. Ing. Václav Švorčík, DrSc.)

Plazmonem indukovaná foto-elektrochemická aktivace N_2

09:45 [Bc. Daniel Grossberger](#) (M2, doc. Ing. Jakub Siegel, Ph.D.)

Imobilizace Ag nanočástic na polymerech a jejich modifikace

10:00 [Bc. Eliška Gráfová](#) (M2, Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.)

Plasmon-aktivní katalyzátor na bázi slitiny Au-Pd pro Suzukiovu – Mijaurovu reakci

10:15 [Bc. Veronika Juřicová](#) (M2, prof. Ing. Petr Slepíčka, Ph.D.)

Rekonstrukce svalové tkáně pomocí biomimetických scaffoldů

10:30 [Bc. Alžběta Kociánová](#) (M2, Ing. Roman Elashnikov, Ph.D.)

Samoaktivující se antibakteriální povlaky na bázi MOFs na medicínsky významných polymerech

10:45 [Bc. Karolina Kukrálová](#) (M2, Mgr. Elena Miliutina)

Příprava mesoporézních křemíkových substrátů a jejich použití jako senzoru pro SERS a elektrochemickou detekci PFOA

Kompozity na bázi bakteriální nanocelulózy

Bc. Terezie Altnerová (M2)

Školitel: Ing. Ondřej Kvítek, Ph.D.

Výzkum v oblasti tkáňového inženýrství přitahuje v poslední době velkou pozornost. Pro využití jako buněčné “scaffoldy” jsou vyvíjeny nové materiály, dříve používané materiály jsou dále inovovány. Jedním z těchto materiálů je bakteriální nanocelulóza (BNC), která má výborné mechanické vlastnosti, je netoxická, ale nevyvolává dostatečnou buněčnou odezvu. Řešením by mohlo být vytvoření kompozitního materiálu na bázi BNC, kde přídavkem vhodné látky vytvoříme příznivější prostředí pro buněčný růst. V rámci projektu jsem se zaměřila na kompozity BNC s hydroxyapatitem nebo kolagenem, látkami, které by mohly podpořit růst kostních, respektive kožních buněk. Vznik kompozitů jsem ověřila pomocí infračervené spektroskopie, kde byly přítomny charakteristické píky pro obě čisté látky. Organická elementární analýza ukázala v kolagenních kompozitech přítomnost dusíku, jenž je přítomen pouze v kolagenu. Modifikací BNC došlo ke zhoršení jejích mechanických vlastností a snížení parametru bobtnání. Přídavek kolagenu vedl k nárůstu kontaktního úhlu proti čisté BNC, kde kontaktní úhel dosahoval neměřitelných hodnot. Buněčné testy potvrdily zvýšený růst buněk na kompozitním kolagenním materiálu. Dosažené výsledky prokázaly, že tento typ materiálů je slibný pro vývoj buněčných “scaffoldů”.

Využití materiálů na bázi poly(N-isopropylakrylamidu) pro měkkou robotiku

Bc. Terezie Burianová (M2)

Školitel: Ing. Roman Elashnikov, Ph.D.

Responzivní polymerní hydrogely, které reagují na změnu teploty a ozáření, přitahují velkou pozornost zejména v oblasti měkké robotiky. V této práci byly připraveny vodivé polymerní hydrogely na bázi poly(N-isopropylakrylamidu) (PNIPAm) dopovaného karbonizovanými polypyrolovými nanotrubicemi. PNIPAm hydrogely s různým stupněm zesíťování byly připraveny pomocí radikálové polymerace. Morfologie hydrogelů byla analyzována pomocí SEM. Měření dolní kritické rozpouštěcí teploty (LCST) bylo měřeno pomocí refraktometrie. Pozornost je věnována především mechanickým vlastnostem, zejména měření mechanického napětí při cyklickém natahování a související změně vodivosti. Zkouška tahem a komprese byla provedena jak při pokojové teplotě, tak při teplotě nad LCST. Mechanické testy ukázaly, že hydrogel si zachovává své vlastnosti jen do určitého relativního prodloužení a do opakování 50ti cyklů. Byl prokázán ohyb hydrogelu a změna vodivosti materiálu při ozáření, což má velký potenciál pro aplikaci v jemné robotice.

Plazmonem indukovaná foto-elektrochemická aktivace N_2

Bc. Jakub Dědek (M2)

Školitel: prof. Ing. Václav Švorčík, DrSc.

Tato práce se zabývá plazmonem indukovanou fotoelektrochemickou aktivací dusíku. Pomocí naprašování a spin-coatingu byly vytvořeny plazmon-aktivní struktury, které byly použity ve vodném prostředí elektrolytu. Připravené struktury byly schopny chemicky fixovat a aktivovat dusík. Struktury byly ozářeny lampou se spektrem odpovídajícím slunečnímu záření, což způsobilo excitaci povrchových plazmonů. Ty aktivovaly zachycený dusík a výrazně přispěly k překonání jeho aktivační bariéry. Ve výsledku se dusík mohl účastnit chemické redukce s následným vytvořením produktu - NH_3 .

Imobilizace Ag nanočástic na polymerech a jejich modifikace

Bc. Daniel Grossberger (M2)

Školitel: doc. Ing. Jakub Siegel, Ph.D.

Stříbro a jeho nanoformy jsou lidstvem využívány pro své unikátní antibakteriální vlastnosti. Rozvoj nanotechnologií umožnil syntézu stříbrných nanočástic s řízeným poměrem povrchu a objemu, tedy parametru, který klíčovým způsobem ovlivňuje fyzikálně-chemické vlastnosti tohoto prvku. Nanostrukturované formy stříbra, včetně nanočástic, umožňují jeho efektivnější využití při syntéze kompozitů na bázi polymerů. Specifických vlastností lze dosáhnout pouhým obohacením povrchovým vrstev matrice, při zachování všech charakteristik polymerního nosiče v jeho objemu. Cílem práce bylo připravit stříbrné nanočástice elektrochemickým rozpouštěním elektrod a pomocí LIFT (z angl. laser induced forward transfer) technologie je imobilizovat do svrchních vrstev polymeru. Následně byla studována odolnost těchto struktur při expozici v plazmatu. Vzorky byly studovány analýzami AFM, FEG-SEM, UV-VIS a XPS. Takto připravené materiály mohou být využity v medicínském prostředí k prevenci výskytu a rozšíření bakterií a také jako ochranné obaly při skladování nebo transportu potravin.

Plasmon-aktivní katalyzátor na bázi slitiny Au-Pd pro Suzukiovu – Mijaurovu reakci

Bc. Eliška Gráfová (M2)

Školitel: Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.

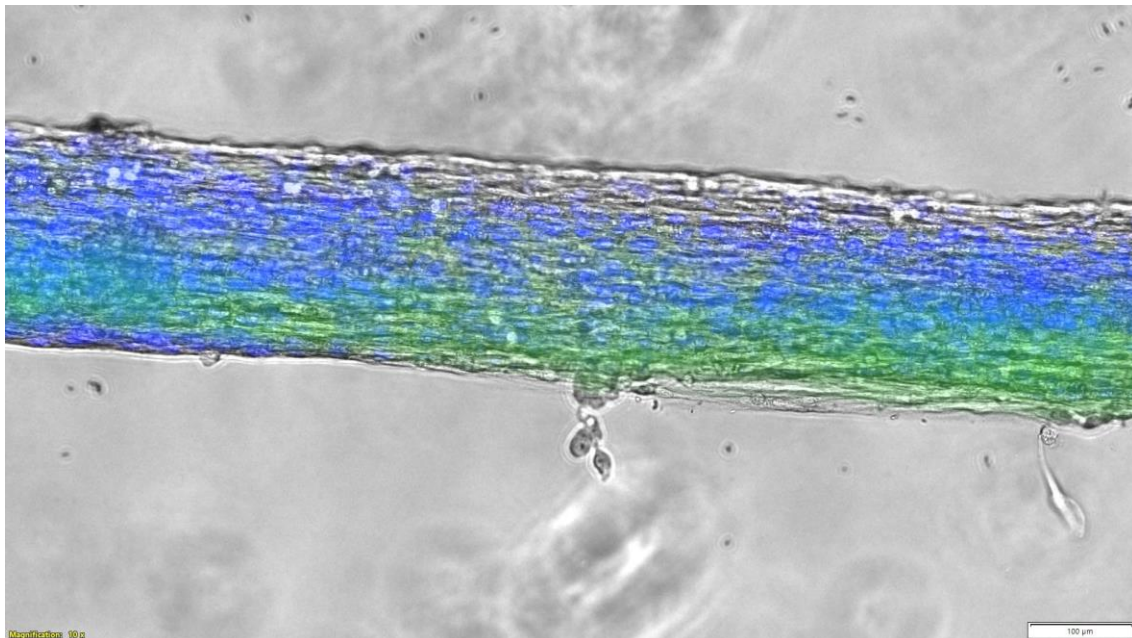
V dnešní době Suzukiova–Mijaurova cross coupling reakce se široce používá pro syntézu biarylových a heterocyklických sloučenin, které jsou důležitými složkami farmaceutických látek. Nedílnou součástí reakce je přítomnost katalyzátoru na bázi palladia (Pd), který patří mezi finančně nákladnější a méně dostupnější kovy. V dané práci byla navržena příprava nového bimetalického (Au/Pd) (foto)katalyzátoru na bázi slitiny zlata (Au) a Pd pro Suzukiovou – Mijaurovou reakci brombenzenu a kyseliny fenylboronové. Výsledný produkt, bifenyl, je velmi žádoucí sloučeninou, jehož deriváty se hojně používají v přípravě léků a biologicky-aktivních sloučenin. Au je finančně dostupnějším kovem oproti Pd a zároveň díky své schopnosti vykazovat efekt povrchové plazmonové rezonance může zaručit foto-aktivací katalyticky-aktivního palladia. V představené práci byla studována možnost provedení Suzukiova–Mijaurova cross coupling reakce za laboratorní teploty s použitím světla jako zdroje energie. Taky bylo docíleno použití nižšího množství Pd v připraveném Au/Pd katalyzátoru a zkrácení doby nutné pro dosažení přijatelné konverze a výtěžku reakci. Lze říct, že po zohlednění těchto aspektů, námi vytvořený katalyzátor je levnější a pracuje efektivněji než dosud používané.

Rekonstrukce svalové tkáně pomocí biomimetických scaffoldů

Bc. Veronika Juřicová (M2)

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

Pro účely rekonstrukce kosterní svalové tkáně byly v posledních letech vyvinuty různé strategie tkáňového inženýrství. Nicméně studované buněčné typy kultivované *in vitro* stále postrádají vhodnou morfologickou organizaci a funkčnost. K vylepšení požadovaných vlastností potřebných pro dostatečnou regeneraci v těle pacienta může vést přístup třídimenzionální kultivace. Problematika dopravy kyslíku a ostatních esenciálních živin do 3D matrice byla řešena pomocí inkorporace alginátových kapilár připravovaných metodou elektrické depozice. Jako kontrolní systém byl zvolen kolagen typu I, v němž byly kultivovány dva typy prekursorových svalových buněk – myoblasty a myosatelitní buňky. Dalším sledovaným systémem byly povrchy mikronových a submikronových membrán, přičemž byl sledován také vliv argonového plazmatického výboje na povrchové vlastnosti.



Samoaktivující se antibakteriální povlaky na bázi MOFs na medicínsky významných polymerech

Bc. Alžběta Kociánová (M2)

Školitel: Ing. Roman Elashnikov, Ph.D.

Použití různých podpůrných a pomocných materiálů či zařízení, jakými jsou implantáty a katetry, které se běžně setkávají s tkáněmi a tělesnými tekutinami, je dnes prakticky nedílnou součástí moderní medicíny. Při jejich používání však existuje potenciální riziko bakteriální kolonizace povrchu a následné tvorby biofilmů, což může vést k závažným infekcím a onemocněním. V této prezentaci představuji návrh inteligentního samoaktivujícího se antibakteriálního povlaku naneseném na lékařsky relevantní povrch. Na povrch polypropylenové fólie byla naroubována 3D periodická struktura MOF na bázi mědi. Tato struktura dokáže účinně katalyzovat tvorbu NO radikálů z jeho endogenních donorů a tím inhibovat růst bakterií. NO radikály jsou známé svými antibakteriálními a protizánětlivými vlastnostmi současně působí jako prevence tvorby bakteriálních biofilmů. Na rozdíl od jiných materiálů, které k aktivaci svých antibakteriálních vlastností vyžadují vnější podněty, reaguje navrhovaný povlak na zvýšenou koncentraci GSNO v tělních tekutinách, která je spojena s bakteriálními metabolity. Z těchto důvodů je tento povlak vhodný i pro dlouhodobé užití a samoaktivaci v přítomnosti bakterií.

Příprava mesoporézních křemíkových substrátů a jejich použití jako senzoru pro SERS a elektrochemickou detekci PFOA

Bc. Karolina Kukrálová (M2)

Školitel: Mgr. Elena Miliutina

Monokrystalický křemík s porézní strukturou na úrovni mikrometrů až nanometrů je v současnosti používaným senzorem pro detekci plyných látek a používá se i v elektronice díky svým výjimečným optickým vlastnostem. Nicméně další výzkum tohoto strukturovaného nanomateriálu pokračuje a poukazuje na jeho potenciální využití i v jiných odvětvích. Lze ho využít jako nosič léčiv nebo biosenzor pro detekci biologických nebo organických látek s velkou přesností a s nízkou možnou detekovatelnou koncentrací analytu. V práci jsem se nejprve zaměřila na přípravu a studium porézního křemíku a jeho použití v senzorových technologiích. Bylo připraveno množství vzorků s různou morfologií a velikostí porézní struktury a ty nejlepší byly použity pro stanovení perfluorooktanové kyseliny (PFOA) ve vodě dvěma způsoby. Nejprve pomocí SERS a následně byla provedena i elektrochemická detekce. PFOA je známým kontaminantem a látkou, kterou organismus neumí přirozeně vylučovat. Proto zůstává v krvi a usazuje se v orgánech a může způsobovat zdravotní komplikace.

Materiálové inženýrství II

MÍSTO: B360

KOMISE

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

Ing. Roman Elashnikov, Ph.D.

Ing. Ondřej Kvítek, Ph.D.

Ing. Nikola Slepíčková Kasálková, Ph.D.

Ing. Jana Pryjmaková

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Bc. Rozálie Lahutová](#) (M2, Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.)

Chirální plasmonické hybridní nanostruktury na bázi helicenů

09:15 [Bc. Kamil Severa](#) (M2, prof. Ing. Václav Švorčík, DrSc.)

Aktivace sulfidu tantalu na povrchu plasmon aktivního substrátu

09:30 [Bc. Vera Shilenko](#) (M2, Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.)

Nový design elektrody pro organickou elektrokatalýzu

09:45 [Bc. Jana Střasáková](#) (M2, Ing. Alena Řezníčková, Ph.D.)

Antivirové účinky PEG stabilizovaných zlatých nanočástic

10:00 [Marie Tomanová](#) (B3, prof. Ing. Václav Švorčík, DrSc.)

Kompozitní materiál na bázi antibakteriálního MOFu

10:15 [Bc. Šárka Trhoňová](#) (M1, Ing. Nikola Slepíčková Kasálková, Ph.D.)

Příprava tenkých uhlíkových filmů metodou solvent-casting a spin-coating a jejich charakterizace

10:30 [Bc. Anastasia Vulakh](#) (M2, Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.)

Detekce chiralit farmakologických sloučenin pomocí SERS

10:45 [Bc. Laura Špaková](#) (M1, prof. Ing. Petr Slepíčka, Ph.D.)

Replikace polymerních mikrovzorů a jejich modifikace

Chirální plasmonické hybridní nanostruktury na bázi helicenů

Bc. Rozálie Lahutová (M2)

Školitel: Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.

Detekce opticky aktivních látek je stěžejní, zejména pokud se jedná o látky interagující s organismem. Řada účinných látek v léčivech je chirální a jejich analýza během výroby i distribuce je velmi důležitou součástí farmacie. Mezi standardní techniky rozpoznávání chirálních molekul patří různé analytické metody např. měření cirkulárního dichroismu, kde se ale setkáváme s poměrně nízkou citlivostí, či měření Ramanovy optické aktivity, které je však časově náročné a obtížně reprodukovatelné. Řešením by mohlo být použití enantioselektivních hybridních nanostruktur, pomocí nichž lze díky plasmonové resonanci detekovat chirální analyty i ve velmi nízkých koncentracích. Tato práce se zabývá vytvořením a otestováním nového enantioselektivního detekčního systému s využitím plasmon-aktivních substrátů na bázi helicenů. Nanostrukturovaný chirální helicenový polymer je připravován na vodivých substrátech (ITO sklo) pomocí elektropolymerace. Tato metoda nevyžaduje použití běžných aditiv užívaných v polymerní chemii, ani přítomnost polymerizovatelných funkčních skupin na helicenových monomerech. Navíc je možné na základě změny parametrů elektropolymerace připravit kvalitativně různé vrstvy. V oblasti enantiodiskriminativní SERS analýzy se jedná o zcela ojedinělý přístup.

Aktivace sulfidu tantalu na povrchu plasmon aktivního substrátu

Bc. Kamil Severa (M2)

Školitel: prof. Ing. Václav Švorčík, DrSc.

V rámci celosvětové aspirace k nezávislosti na fosilních palivech se jako nadějnou cestou jeví využití vodíku jako udržitelné alternativy pro skladování obnovitelné energie. Jedním ze základních pilířů přechodu na vodíkovou energetiku je samotná výroba vodíku. Ta je v dnešní době silně vázána na drahé kovy, např. platinu či iridium, jejichž vzácnost značně omezuje jejich průmyslové využití. Sulfid tantalu (TaS_2) se jeví jako perspektivní materiál pro (foto)elektrochemickou výrobu vodíku štěpením vody. Morfologická struktura tohoto materiálu se v průběhu elektrochemické reakce „rozlamuje“, čímž vzniká vyšší poměr povrchu ku objemu a taky větší množství redox-aktivních krajů. Tak se navyšuje počet katalytických míst a tím také úhrnná katalytická aktivita. Tato práce je věnována elektrochemické aktivaci TaS_2 na 3D plazmon-aktivním povrchu. Jako plasmon aktivní substrát byl použita titanová elektroda s vyleptanou strukturou nanotrubičkového oxidu titaničitého a následně elektrochemicky nadeponovou tenkou vrstvou zlata. Bylo prokázáno, že 3D struktura substrátu zrychluje samotnou aktivaci TaS_2 a zajišťuje další možnost foto-elektrochemické katalýzy s výskytem dodatečného fotoproudu.

Nový design elektrody pro organickou elektrokatalýzu

Bc. Vera Shilenko (M2)

Školitel: Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.

V posledních letech přitahuje velkou vědeckou pozornost využití elektrochemie v organické syntéze a to jak z hlediska základního tak i aplikovaného výzkumu. Tento přístup umožňuje regulovat selektivitu a rychlost organických chemických proměn a celkem zjednodušit procesy chemické technologie. Současně vývoj nových přístupů k enantio-selektivní výrobě organických sloučenin má velký význam, zejména pro farmaceutické a biologické aplikace (většina bio-aktivních sloučenin jsou chirální molekuly). V této práci je navržena kombinace organické elektrochemie a enantio-selektivní katalýzy. Základním bodem je zvýšení enantio-selektivity reakce přes správnou volbu katalyzátoru na povrchu redox-aktivní elektrody. Byly připraveny nové elektrody pro elektrochemickou foto-redukci, které dokonce umožnily i využití foto-elektrochemického přístupu. Proběhla optimalizace parametrů elektrod na základě vybrané modelové hydrogenace acetofenonu na 1-phenyletanol s přihlédnutím k potenciálnímu použití navržených elektrod pro redukci složitějších struktur.

Antivirové účinky PEG stabilizovaných zlatých nanočástic

Bc. Jana Střasáková (M2)

Školitel: Ing. Alena Řezníčková, Ph.D.

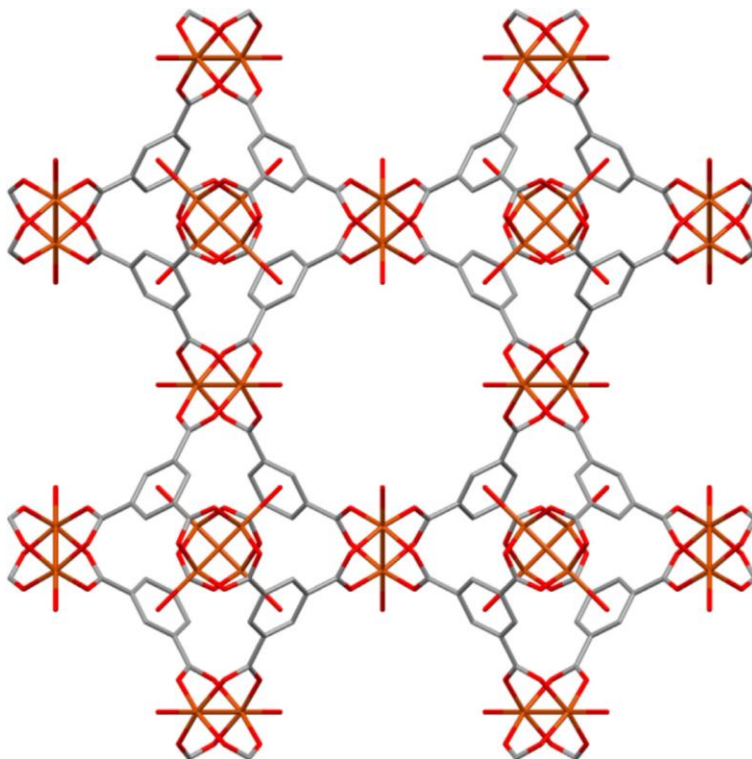
Zlaté nanočástice (AuNP) jsou díky svým fyzikálním a chemickým vlastnostem jedny z nejvyžívanějších kovových nanočástic v lékařství. Aplikují se např. při léčbě rakoviny (detekce nádorových buněk, fototermální a fotodynamická terapie) či k transportu léčiv. Cílem této práce byla příprava stabilních AuNP metodou katodového naprašování Au do různých typů polyethylenglykolu (PEG) a studium antivirového účinku vůči SARS-CoV-2. Jako zachytávací kapalně médium a současně stabilizační činidlo bylo použito PEG a PEG-aminu. Depozicí Au do PEG byly připraveny vysoce stabilní koloidní disperze díky stérickému efektu PEG. Připravené AuNP byly studovány z hlediska časové stability a stability při různých teplotách (4 a 37 °C; sterilizace v autoklávu). Vlastnosti připravených koloidů byly studovány prostřednictvím řady analytických metod (TEM, AAS a UV-Vis spektroskopie). Dále byla sledována viskozita a pH koloidních disperzí AuNP. NP by mohly najít uplatnění např. v cíleném transportu léčiv.

Kompozitní materiál na bázi antibakteriálního MOFu

Marie Tomanová (B3)

Školitel: prof. Ing. Václav Švorčík, DrSc.

Kompozitní materiály na bázi antibakteriálního MOFu, neboli „metal-organické rámcové struktury“ (z angl. metal organic frameworks), jsou vysoce porézní krystalické materiály, které se vyznačují velkým specifickým povrchem. Proto mohou být použity jako rezervoáry a nosiče pro více typů látek a uvolňovat antibakteriální ionty kovů nebo organické linkery. Tato jedinečná vlastnost z nich činí vhodné multifunkční materiály pro biomedicínské aplikace. V kombinaci s jinými materiály mohou být MOFy využity jako platforma pro účinné ničení bakterií prostřednictvím synergického účinku více typů mechanismů. V této práci byl připraven kompozitní materiál na bázi polydimethylsiloxanu (PDMS), obsahujícího různé koncentrace MOFu CuBTC. Byla provedena charakterizace jednotlivých vzorků pomocí infračervené spektroskopie, Ramanovy spektroskopie, Rentgenové strukturní analýzy, skenovací elektronové mikroskopie, analýzy BET a mechanických zkoušek. Výsledný kompozit je předmětem dalšího výzkumu z hlediska jeho využití jako antibakteriálního biomateriálu.



Příprava tenkých uhlíkových filmů metodou solvent-casting a spin-coating a jejich charakterizace

Bc. Šárka Trhoňová (M1)

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

Materiálové inženýrství se v dnešní době zabývá metodami, jak vylepšit povrchové vlastnosti materiálů, ať jde například o smáčivost, biokompatibilitu či tepelnou a elektrickou vodivost. Tyto jevy mají svůj význam i na povrchu objektů, proto je vhodné materiály studovat a testovat ve formě tenkých vrstev. Nanostrukturování je technika, kterou lze modifikovat povrchy materiálů a získávat tenké vrstvy s přesně danými vlastnostmi. Zejména v posledních několika letech se objevilo nové odvětví nanostrukturovacích technik založených na modifikaci povrchů excimerovým laserem. Expozice polymerních substrátů laserovým paprskem může vyvolat tvorbu periodických struktur, které jsou obzvláště výhodné pro adhezi buněk. V rámci této práce byly vyrobeny nanokompozitní tenké vrstvy polystyren/uhlík metodami solvent – casting a spin – coating. Vybrané povrchy byly modifikovány vysokovýkonným excimerovým laserem a tepelným namáháním. U takto připravených filmů byla studována tloušťka, povrchová morfologie, chemické složení, smáčivost a byl vyhodnocován vliv modifikace.

Detekce chiralidy farmakologických sloučenin pomocí SERS

Bc. Anastasia Vulakh (M2)

Školitel: Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.

Z důvodu toho, že organismus je soustavou chirálních komponentů, chirální vlastnosti farmaceutických sloučenin jsou významné pro určení jejich farmakologických účinků. V posledních letech vzrostl zájem o enantioselektivní detekci opticky aktivních látek pro kontrolu kvality farmaceutických sloučenin. Několik pravidelně používaných analytických přístupů k enantioselektivní detekci jsou však založeny na technicky náročných postupech. Tato práce se zaměřuje na enantioselektivní detekci léčiv prostřednictvím povrchově-zesílené Ramanové spektroskopie s použitím hybridních struktur typu AuNPs@MOF. Byly připraveny plazmon-aktivní Au nanocastice, na povrch kterých byly naroubovány filmy chirálního metal organic framework (HMOF) L- nebo D-ZnAlaCl, které byly použity jako struktury pro enantioselektivní diskriminaci chirálního analytu. Byla provedena optimalizace metody navázání MOFu na povrch zlatých nanočástic a ověřena schopnost připravených nanostruktur k enantioselektivní detekci izomerů farmaceutické sloučeniny pomocí SERS.

Replikace polymerních mikrovzorů a jejich modifikace

Bc. Laura Špaková (M1)

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

Tkanivové inženýrství je společně s vývojem nových biomateriálů důležitým odvětvím reparativní medicíny. Jeho cílem je náhrada a regenerace orgánů či tkání, které v těle pacienta neplní svou funkci. Polymérní biomateriály, které jsou zároveň bioresorbovatelné, jsou v současnosti intenzivně zkoumány právě pro svoje vlastnosti, které umožňují jejich použití v medicíně a tkanivovém inženýrství. Mezi tyto materiály patří například kyselina polymlečná, jejíž klíčové vlastnosti jsou právě bioresorbovatelnost a biokompatibilita. Cílem této práce byla replikace mikrostruktur typu včelích plástů na povrch PLLA fólie metodami „hot embossing“ a „solvent casting“ a jejich následná plazmatická modifikace. Na připravených vzorcích byla studována morfológie a drsnost povrchu pomocí laserové konfokální mikroskopie, mikroskopie atomárních sil a skenovací elektronové mikroskopie. Prvková analýza povrchu byla provedena rentgenovou fotoelektronovou spektroskopií a energiovo disperznou spektroskopií. Zmáčavost povrchu byla studována měřením kontaktního úhlu. Na základě výsledků vyjmenovaných analýz byl vyhodnocen vliv replikace a plazmatické modifikace. S cílem ověřit vhodnost použití replikovaných mikrostruktur v tkanivovém inženýrství byly provedeny testy cytokompatibility.

Ústav informatiky a chemie (143)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Petr Čech, Ph.D.

SEZNAM SEKČÍ

1. [Bioinformatika a chemická informatika](#)

Bioinformatika a chemická informatika

MÍSTO: B1322

KOMISE

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

Ing. Petr Čech, Ph.D.

Mgr. Michal Kolář, Ph.D.

doc. Ing. Filip Lankaš, Ph.D.

Mgr. Jan Pačes, Ph.D.

Ing. Janka Puterová, Ph.D.

Ing. David Příhoda

PROGRAM

14:00 **zahájení**

14:00 [Bc. Lucie Červenková](#) (M2, Mgr. Jan Pačes, Ph.D.)

Analysis of single-cell CRISPR screens with multiomic readout

14:15 [Bc. Dominika Maurencová](#) (M2, prof. Mgr. Daniel Svozil, Ph.D.)

Computer prediction of synthetic pathway length

14:30 [Vojtěch Melichar BSc \(Hons\)](#) (M1, None)

Compartmentalized mathematical models for disease spreading and controls during an epidemic

14:45 [Ing. Ekaterina Simonova](#) (M2, Mgr. Jan Pačes, Ph.D.)

The application of Deep Learning for cancer subtype identification

15:00 [Bc. Pavlína Slavníková](#) (M1, doc. Dr. Ing. Ivan Raich)

MD study of hyaluronic building blocks

15:15 [Bc. Kateřina Večerková](#) (M2, Mgr. Jan Pačes, Ph.D.)

Missing genes in different vertebrate taxa

15:30 [Bc. Martina Zoubková](#) (M2, doc. Ing. Filip Lankaš, Ph.D.)

Sequence-dependent effect of methylation on DNA structure and elasticity

Analysis of single-cell CRISPR screens with multiomic readout

Bc. Lucie Červenková (M2)

Školitel: Mgr. Jan Pačes, Ph.D.

Melanoma phenotype switching is a process in which melanocytic cells are transformed into mesenchymal-like cell type. Existing evidence suggests that this process is mediated by *SOX10* decrease which is likely to prelude the acquisition of tumor's therapy-resistance. Aim of this thesis is to study chromatin accessibility and transcriptomic responses in individual cells to transcription factor (TF) perturbations. It is achieved by utilizing modified CROP-seq (Datlinger et al., 2017) with multiomic readout on MM087 and MCF7 cell lines. *SOX10*, *MITF* and *TFAP2A* were selected as target TFs for the CRISPR-dCas9 system due to their role in melanoma phenotype switching. It is hereby shown that we were able to separate the two cell lines based on heterogeneity of their transcriptomic and epigenomic profile. Obtained results also suggest that MM087 cells with dCas9-*MITF*-KRAB gRNAs show significant *SOX10* downregulation as the effect of *MITF* knock-down. Taken together, these analyses reveal gene expression and chromatin accessibility responses to regulatory perturbations in cancer cells and provide useful information for future gene regulatory networks reconstruction.

Computer prediction of synthetic pathway length

Bc. Dominika Maurencová (M2)

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

In the laboratory synthesis of a given compound, it is necessary to identify all available starting compounds and possible reaction pathways. The number of synthesis steps is an important parameter in drug design. It tells about the availability of the given substance, and it can also be used as a molecular complexity measure. This diploma thesis will deal with the prediction of the length of the synthetic pathway using machine learning methods. The aim of the work is to create suitable balanced data and with their help to implement a machine learning model to predict of the length of the synthetic pathway.

Compartmentalized mathematical models for disease spreading and controls during an epidemic

Vojtěch Melichar BSc (Hons) (M1)

Školitel: None

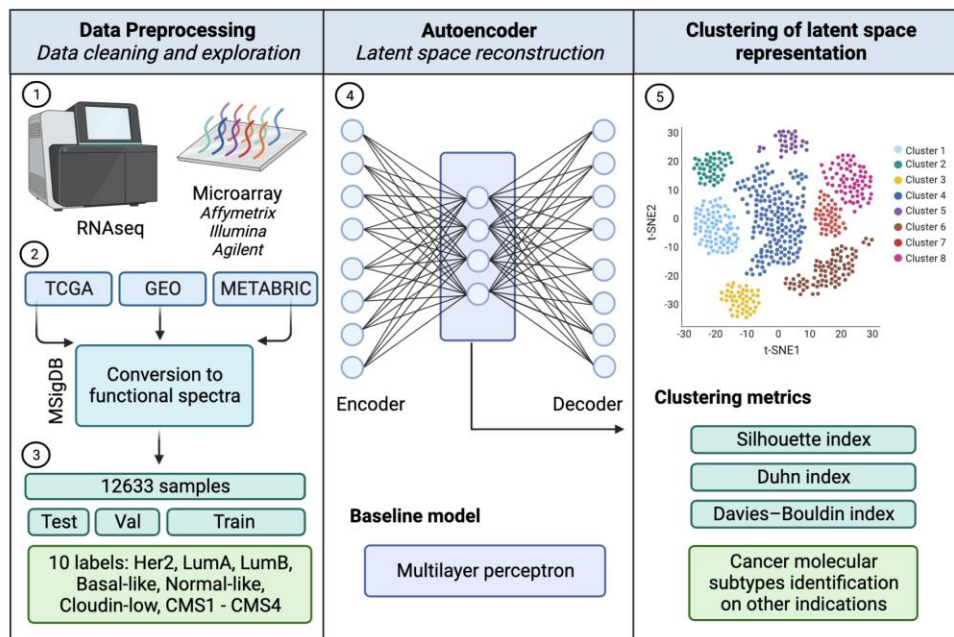
Mathematical models play an important role in predicting the progression and dynamics of disease spreading. Those predictions may serve to support policy decisions such as designing restrictions to stop or limit the spread. In recent years, mathematical models were commonly used in the fight against the pandemic of the SARS-CoV-2. Here, we limit our discussion to compartmentalised models that track the time evolution of several compartments (e.g. infected and susceptible) of the population. In this project, the aim is to explore the dynamics of the spread using several standard models. We study the behaviour of those models over a range of parameter values and assess how these parameters are linked to restrictions that can be put in place. The analysis proves that blocking the transmission by social distancing will have a significant effect on the rate of propagation through the population. Compartmentalised models, however, do not consider the spatial aspect of spreading. Therefore, the models are extended to include mobility as a diffusive process. From those, it can be concluded that decreasing the rate of movement of infected individuals will reduce the speed of propagation. The analysis is performed using standard classical techniques and *in silico* using Python code.

The application of Deep Learning for cancer subtype identification

Ing. Ekaterina Simonova (M2)

Školitel: Mgr. Jan Pačes, Ph.D.

Human cancer is a heterogeneous disease initiated by random somatic mutations and driven by multiple genomic alterations. Cancer subtype classification has the potential to significantly improve disease prognosis and move closer toward personalized cancer treatment and prevention. The assumption behind molecular subtyping is that patients of similar gene expression patterns are likely to have similar responses to therapies and clinical outcomes due to the tumor microenvironment. Thus, molecular subtyping can reveal information valuable for a range of cancer studies from cancer initiation and tumor biology to prognosis and personalized medicine. Molecular subtyping was widely described in breast and colorectal cancer, however, it was not broadly explored in other indications. In this work, molecular subtypes are explored via deep learning models, specifically variational autoencoder latent space. The analysis is performed on a range of publicly available datasets such as Gene Expression Omnibus (GEO), The Cancer Genome Atlas (TCGA) and the Molecular Taxonomy of Breast Cancer International Consortium (METABRIC).



MD study of hyaluronic building blocks

Bc. Pavlína Slavníková (M1)

Školitel: doc. Dr. Ing. Ivan Raich

As a highly significant biomacromolecule, hyaluronic acid is present in all animal tissues as well as in body fluids. Its versatility and uniqueness are increasingly appreciated, especially in the field of medicine, while highly effective water binding is the key property. A detailed description of the dynamic behavior of HA surrounded by water molecules should make a great contribution to the development of already-established applications, as well as create inspiration for entirely new ways of use. Therefore, the Amber software package was utilized in conjunction with the GLYCAM06 force field to carry out molecular dynamics simulations of the disaccharide and tetrasaccharide building blocks of hyaluronan in water. Trajectories were subsequently analysed to describe the conformational dynamics of individual structures. Glycosidic bonds dihedral angles, ring puckering conformations, torsions of exocyclic groups, and emerging intermolecular and intramolecular hydrogen bonds were all investigated.

Missing genes in different vertebrate taxa

Bc. Kateřina Večerková (M2)

Školitel: Mgr. Jan Pačes, Ph.D.

Recently many avian genes that were believed to be missing from avian genomes were found. These "missing" genes were mainly found in regions with high GC%. The reason a gene can be "hidden" can be twofold. It can either be truly absent (a mutation caused this gene to become a pseudogene), or the GC content causes technical obstacles to finding this gene at the sequencing level (polymerase slippage) or at the assembly level (overlapping long repetitive stretches). A similar problem could be in turtle genomes, which also have higher GC% compared to other vertebrates. The main goal of my work is to explore whether there are also hidden genes in turtle genomes. The way I approach this problem is through synteny analysis - blocks of co-occurring loci. Consider a block of genes labeled A, B and C. Gene B is absent from a turtle genome, but genes A and C are present. Genes A and C have orthologs in other vertebrate taxa. We can compare the sequence between A and C with the sequences of B orthologs from other vertebrates. Either we can find a match - the gene is present but not yet annotated, or we can find a partial match with a gap - the gene is present but there is an assembly problem, or we end up not finding a match and have to try to find the gene sequence in the raw reads.

Sequence-dependent effect of methylation on DNA structure and elasticity

Bc. Martina Zoubková (M2)

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

DNA methylation plays a key role in many biological processes, such as gene expression, immune responses, organism development, and aging. It mostly occurs in CpG dinucleotide steps where cytosine is replaced by 5-methylcytosine. Despite intense research, the effect of methylation on DNA structure and mechanical deformability is poorly understood. This work focuses on structural properties of methylated and unmethylated DNA depending on the context of bases around the CpG dinucleotides. Ten short sequences containing CpG in all tetranucleotide contexts, five methylated and five unmethylated controls, have been designed and their molecular dynamics (MD) simulated using AMBER software. So far, some of the MD trajectories have been processed by 3DNA software package to obtain time series of local base pair-step parameters (shift, slide, rise, tilt, roll and twist), which were further analysed. Results suggest that there are changes to the local structure due to distinct context-dependent populations of BI/BII backbone substates. However, it is not possible to entirely rule out the impact of sequence context on the conformation of the individual substates, and a deeper analysis is to be conducted.

Ústav chemické technologie restaurování památek (148)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Vítězslav Knotek, Ph.D.

SEZNAM SEKČÍ

1. [Ústav chemické technologie restaurování památek](#)

Ústav chemické technologie restaurování památek

MÍSTO: CHODBA G

KOMISE

doc. Dr. Ing. Michal Ďurovič (předseda)

Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.

Ing. Šárka Msallamová, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Viktorie Antošová](#) (B3, Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.)

Konzervování sítě na vlasy

09:15 [Laura Fedičová](#) (M1, None)

Testovanie stability albumínovej fotografie voči hydrogélom

09:30 [Bc. Olga Hrubá](#) (M1, Ing. Šárka Msallamová, Ph.D.)

Monstrance

09:45 [Katerina Lagazzi](#) (B3, Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.)

Restaurování škapulíře abatyše Anny Scholastiky Baulerové z Hohenburku

10:00 [Štěpán Metelka](#) (B4, Ing. Šárka Msallamová, Ph.D.)

Průzkum a restaurování relikviáře

10:15 [Anna Procházková](#) (B3, Ing. Klára Drábková, Ph.D.)

Restaurování škapulíře s křížkem

10:30 [Yuliya Ryabyts](#) (B3, Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.)

Konzervování škapulíře a textilního fragmentu s mědirytem

10:45 [Ľudmila Uhrinová](#) (B3, Ing. Klára Drábková, Ph.D.)

Rukavice abatiše Aloisie Terezie Widmanovej

Konzervování sítky na vlasy

Viktorie Antošová (B3)

Školitel: Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.

Restaurování Sítky na vlasy V rámci předmětu Semestrální práce II byla v akademickém roce 2021/2022 restaurována sítka na vlasy z let 1735-1766 z hrobového nálezu v Bazilice sv. Jiří na Pražském hradě, odkryté během archeologického průzkumu doktora Ivana Borkovského v 60. letech 20. století. Restaurování proběhlo v dílnách Pražského hradu. Nejprve byl proveden uměleckohistorický a textilně technologický průzkum předmětu. Poté bylo přistoupeno k samotnému restaurování předmětu. Předmět byl mechanicky očištěn pomocí štětečku a vysavače s regulovaným odtahem. Následovalo čištění mokrým způsobem na odsávacím stole a vyrovnání předmětu. Dále proběhla konsolidace předmětu technikou podlepování. Zkřehlé hnědé stuhly byly lepeny pomocí polyamidového adheziva Lascaux na netkanou polyesterovou textilií Hollytex, čímž došlo ke zpevnění sítky a k obnovení původního trojrozměrného tvaru. Dále byl šicími technikami konsolidován spodní okraj centrální ornamentální textilie. Po zásahu byl předmět adjustován do krabice z nekyselého kartónu KLUG s vhodnou vycpávkou z nebělené bavlny vyplněnou 100% polyesterovým vatelínem.

Testovanie stability albumínovej fotografie voči hydrogélom

Laura Fedičová (M1)

Školiteľ: None

Práca sa venuje testovaniu stability albumínovej fotografie voči hydrogélom, kde bola zvolená ako gélová matica xantánová guma. Je o nej k dispozícii veľa údajov z potravinárskeho priemyslu, v skúmaní použitia vodných gélov v kontexte ochrany kultúrneho dedičstva je ešte naďalej neprebádaná. Aplikácia gélov prebehla na novovytvorených modelových vzorkách, ale aj na historických albumínových vzorkách z referenčnej zbierky katedry reštaurovania VŠVU v Bratislave. Objektívne spracovanie dát prebiehalo pred a po aplikácii gélov na vzorky. Dôraz sa kládol na pozorovanie farebnej nemennosti, rozsahu krakeláže spojového materiálu, pozostatkov rezíduí z xantánových gélov na povrchu. Preto sme ako metódy použili obrazovú analýzu sprostredkovanú makrofotografiami z optického mikroskopu, ktoré boli spracované v počítačovom programe Fiji/ImageJ2, pozorovanie historických fotografií UV -svetlom. Taktiež kolorimetriu na objektívne spracovanie farebného vnemu a FTIR spektroskopiu pre identifikáciu hlavných zložiek povlakových materiálov, prípadných rezíduí. Nazbierané spracované dáta preukázali vysoký potenciál xantánových gélov, ktoré by v budúcnosti mohli slúžiť ako médium pre čistenie albumínových fotografií citlivých na vlhkosť a čistenie vodou.

Monstrance

Bc. Olga Hrubá (M1)

Školitel: Ing. Šárka Msallamová, Ph.D.

Práce se zabývala restaurováním monstrance. V uměleckohistorickém průzkumu byl řešen historický vývoj monstrancí a technologie pozlacování. Pomocí nedestruktivních a destruktivních metod bylo určeno materiálové složení a technologie výroby předmětu. Na základě výsledků těchto metod byl vytvořen restaurátorský záměr. Restaurování předmětu se zaměřilo na odstranění korozních produktů, opravu mechanického poškození a výrobu chybějících částí. Na závěr byly vytvořeny doporučené podmínky pro uložení předmětu.

Restaurování škapulíře abatyše Anny Scholastiky Baulerové z Hohenburku

Katerina Lagazzi (B3)

Školitel: Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.

Restaurování škapulíře abatyše Anny Scholastiky Baulerové z Hohenburku v rámci předmětu Semestrální práce II byl restaurován škapulíř z hrobové výbavy svatojiřské abatyše Anny Scholastiky Baulerové z Hohenburku pocházející z její krypty v Bazilice sv. Jiří na Pražském hradě, odkryté během archeologického průzkumu doktora Ivana Borkovského v 60. letech 20. století. Restaurování proběhlo v dílnách Pražského hradu. Byl proveden uměleckohistorický a textilně technologický průzkum předmětu. Konzervování textilní části proběhlo vyčištěním kapsy škapulíře (mechanické čištění) a vypráním stuh škapulíře destilovanou vodou na odsávacím stole. Kovové devocionálie, které bylo možné ze škapulíře vyjmout, byly konzervovány samostatně. Byly čištěny mechanicky a následně byly lepeny a dotmeleny. Restaurátorský zásah na textilní části škapulíře zahrnoval vyrovnání předmětu a rekonstrukci uvolněné lemové výšivky na koncích stuh, která byla podložena na novou dobarvenou hedvábnou textilií zapořitou do vhodného tvaru. Po zásahu byl předmět adjustován do krabice z nekyselého kartónu KLUG s tvarovaným lůžkem z polyethylenové pěny překryté moltonem. Pro kovové devocionálie bylo zhotoveno vyndavací tvarované lůžko z polyethylenové pěny (bez textilního potahu) s melinexovým víkem.

Průzkum a restaurování relikviáře

Štěpán Metelka (B4)

Školitel: Ing. Šárka Msallamová, Ph.D.

Předmětem této práce bylo restaurování a konzervování relikviáře z 18. století. Při průzkumu bylo zjištěno, že relikviář pravděpodobně sloužil jako uctívání předmět v kostele Nanebevzetí Panny Marie v Duchcově do doby, než byl kostel 9. května 1945 vypálen a poničen sovětskými vojsky. Relikviář byl vyroben z pozlacené a postříbřené mosazi. Vypálení kostela pravděpodobně vedlo k poničení zlacení a stříbření, jakožto i k tvorbě černé krusty sazí. Kombinace sazí a korozních produktů zaujímala většinu povrchu předmětu. Záměrem bylo relikviář uvést do podoby umožňující expoziční účely a zároveň dbát na zachování jeho umělecko-historické hodnoty. Saze a korozní produkty byly odstraněny kombinací chemického a mechanického čištění. Bylo také nutné co nejvíce omezit možnost budoucího korozního děje. Z toho důvodu byla provedena závěrečná konzervace akrylátovým lakem. V neposlední řadě byl stanoven ochranný režim památky.



Restaurování škapulíře s křížkem

Anna Procházková (B3)

Školitel: Ing. Klára Drábková, Ph.D.

Restaurování škapulíře s křížkem Škapulíř nalezený při vykopávkách v Kostele Panny Marie Vítězné byl restaurován v rámci předmětu Semestrální práce II studijního programu konzervování – restaurování uměleckořemeslných děl z textilních materiálů. Práce byly prováděny v konzervátorských dílnách Správy Pražského hradu. Součástí práce byl uměleckohistorický a textilně technologický průzkum. Škapulíř byl nejprve mechanicky očištěn štětci s hrubším vlasem a skalpelem. Uvolněné nečistoty byly odsáty přes sítku muzejním vysavačem s regulovatelným odtahem. Vzhledem k našitému křížku s kovovým krucifixem nebylo možné celý škapulíř čistit mokrou cestou, proto k mokrému čištění došlo pouze u stuhových závěsů. Dřevěný křížek s kovovým krucifixem byl čištěn suchou cestou. Korozní produkty byly snímány převážně skalpelem, tak aby nedošlo k porušení nití, kterými byl kříž přišit ke škapulíři. Trhliny na předmětu byly zajištěny záplatami z hedvábné krepelíny šitou skeletáží. Velký důraz byl kladen na adjustaci škapulíře, která se skládá z krabice z kartonu s alkalickou rezervou KLUG a tvarovaným lůžkem z polyethylenové pěny.

Konzervování škapulíře a textilního fragmentu s mědirytem

Yuliya Ryabyts (B3)

Školitel: Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.

V rámci Semestrální práce II byl konzervován škapulíř a textilní fragment s mědirytem v Restaurátorských dílnách Správy Pražského hradu pod vedením Mgr. Pavlína Koubové. Předměty byly nalezeny v bazilice sv. Jiří na Pražském hradě během archeologického výzkumu od roku 1959, jedná se o součást pohřební výbavy z hrobu abatyše. Byl proveden uměleckohistorický a textilně-technologický průzkum, dále následovalo samotné konzervování předmětů. Škapulíř a fragment s mědirytem byly mechanicky čištěny pod mikroskopem pomocí pinzet a štětečků, poté vysávány přes sítku pomocí restaurátorského vysavače s regulovatelným odtahem. Podle výsledků zkoušky stálobarevnosti bylo rozhodnuto čistit předměty mokrou cestou v lázni s přídavkem Hostaponu T ($c = 2 \text{ g/l}$) a jemným tupováním mořskou houbou. Následně byly předměty propláchnuty demineralizovanou vodou a ponořeny do 4% roztoku glycerinu. Konsolidace byla provedená kombinací šité opravy a podlepování polyamidovým práškem Lascaux 5350 (u fragmentu s mědirytem – celoplošné podlepování, u škapulíře – lokálně pomocí záplat). Pro konzervované předměty byly vyrobeny krabice z kartonu KLUG. Dno krabice bylo změkčeno Moltonem a bylo vytvořeno lůžko z polyethylenové pěny.

Rukavice abatiše Aloisie Terezie Widmanovej

Ľudmila Uhrinová (B3)

Školiteľ: Ing. Klára Drábková, Ph.D.

Predmetom mojej reštaurátorskej práce boli pletené rukavice Aloisie Terezie Widmanovej, objavené pri archeologických vykopávkach v bazilike sv. Jiří na Pražskom hrade. Odobrané textilné vzorky boli analyzované pomocou optickej mikroskopie, kovové vzorky boli analyzované pomocou elektrónového rastrovacieho mikroskopu s EDS analyzátorom. Bolo zistené, že základná pletenina rukavíc je zhotovená z hodvábu a jej ornamentálny výplet z pozláteného strieborného dracúna s hodvábnou dušou. Čistenie rukavíc započalo suchým čistením pomocou pinziet, ďalej boli nečistoty odsaté pomocou múzejného vysávača s regulovateľným odsávaním cez sieťku. Následne boli rukavice vyprané v kúpeli s prídavkom Hostaponu T (2 g/l), ktorý bol odstránený násobným preplachovaním demineralizovanou vodou. Následne boli rukavice vložené do 4 % glycerínového kúpeľa, ktorý zmäkčil textíliu. Rukavice boli sušené voľne na vzduchu, vystužené melinexovou fóliou. Kovové výplety boli digitálne zakreslené, upravené a zakreslené do technického nákresu. Pre uloženie rukavíc bola vytvorená škatuľa z lepenky s alkalickou rezervou, na jej dne sa nachádzajú zarážky zabraňujúce posúvaniu rukavíc pri manipulácii. Ďalej bola pre rukavice zhotovená vypchávka z polyetylénovej peny potiahnutá polyetylénovou netkanou textíliou.