



FAKULTA
CHEMICKÉ TECHNOLOGIE
VŠCHT PRAHA

Studentská Vědecká Konference

2021

2. 12. 2021

SBORNÍK ANOTACÍ

Fakulta chemické technologie

Organizační tým

FAKULTNÍ KOORDINÁTOR

doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOŘI

[101](#) Ing. Hana Kotoučová, Ph.D.

[105](#) Ing. Miloslav Lhotka, Ph.D.

[106](#) Ing. Jan Šerák, Ph.D.

[107](#) Ing. Tereza Unger Uhlířová, Ph.D.

[108](#) Ing. Eva Bedrnová

[110](#) doc. Ing. Jan Budka, Ph.D., Ing. Bc. Michal Himl, Ph.D.

[111](#) Ing. Iva Paterová, Ph.D.

[112](#) Ing. Lucie Reinišová

[126](#) Ing. Alena Řezníčková, Ph.D.

[143](#) Ing. Jiří Jirát, Ph.D.

[148](#) Ing. Vítězslav Knotek, Ph.D.

Ústav anorganické chemie (101)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Hana Kotoučová, Ph.D.

SEZNAM SEKČÍ

1. [S1 \(B2+B3\)](#)

2. [S2 \(M1+M2\)](#)

S1 (B2+B3)

MÍSTO: LACH_H03 (LABORATOŘ E)

KOMISE

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

Ing. Kateřina Szökölová, Ph.D.

Ing. Vít Jakeš, Ph.D.

Ing. Jindřich Vítek

Ing. Vlastimil Mazánek, Ph.D.

Ing. Tomáš Hartman, Ph.D.

Ing. Tomáš Hlásek, Ph.D.

Ing. Jakub Altšmíd, Ph.D.

PROGRAM

09:30 **zahájení**

09:30 [Oldřich Cicvárek](#) (B3, Ing. Vlastimil Mazánek, Ph.D.)

Příprava a aplikace kompozitních nanomateriálů na bázi sulfidů přechodných kovů.

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

Kompozitní materiály na bázi reaktivního oxidu hořečnatého dopované nanoaditivou

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

Scintilační vlastnosti PbHfO₃ dopovaného vápníkem a bismutem

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

Testování hydrotermálního růstu v přípravě perovskitů

10:45 [Jan Sklenka](#) (B3, doc. Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.)

Recyklace supravodivých kompozitů YBCO a využití jejích produktů

11:00 [Julie Slámová](#) (B2, doc. Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.)

Příprava a studium hořečnatých kompozitních materiálů s přídavkem nanomateriálů na bázi uhlíku

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

Fázová stabilita $\text{Lu}_2\text{Hf}_2\text{O}_7$ se strukturou pyrochloru

Příprava a aplikace kompozitních nanomateriálů na bázi sulfidů přechodných kovů.

Oldřich Cicvárek (B3)

Školitel: Ing. Vlastimil Mazánek, Ph.D.

Sulfidy přechodných kovů mají zajímavé elektrochemické vlastnosti a mohou najít využití jako katalyzátory pro elektrochemický rozklad vody nebo do palivových článků. Avšak jejich nevýhodou může být nižší elektrická vodivost. Toto lze zlepšit depozicí na vodivý substrát, jako je například grafen. Výhodou grafenu je jeho chemická stabilita nebo velký měrný povrch, ale absence zakázaného pásu a nízká absorpce záření limituje aplikační potenciál ve fotoelektrokatalýze. Pro tento účel by se jako substrát mohly využít jiné 2D nanomateriály např. karbidy přechodných kovů neboli MXeny. Nejvíce prozkoumány jsou kompozitní materiály grafenu s MoS_2 a WS_2 . Ukazuje se však, že využití směsných chalkogenidů více kovů může vést k daleko lepším vlastnostem kompozitů. Tato práce navazuje na předchozí výzkum ve skupině a zabývá se přípravou kompozitních materiálů, které se skládají z vodivých substrátů, grafenu nebo MXenu (Ti_3C_2), na které byly deponovány směsné sulfidy obsahující Mn, Fe, Co, Ni, Cu a Zn. Tyto materiály byly charakterizovány z hlediska jejich složení, morfologie a následně i elektrochemických vlastností (rozklad vody a redukce O_2 a N_2).

Kompozitní materiály na bázi reaktivního oxidu hořečnatého dopované nanoaditivy

Ivana Faltysová (B3)

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

V této práci byly připraveny vzorky hořečnatých pojiv na bázi reaktivního oxidu hořečnatého (MOC) - referenčního MOC, MOC dopovaného grafenem a MOC s grafenem a simulanty mimozemských hornin tvořícími plnivo. Fázové složení připravených kompozitních materiálů bylo následně analyzováno rentgenovou difrakční analýzou, chemické složení bylo určeno rentgenovou fluorescenční analýzou a energiově disperzní spektroskopií. Mikrostruktura byla studována pomocí optického mikroskopu a skenovací elektronové mikroskopie. U všech vzorků byla též změřena pevnost v tlaku, pevnost v ohybu a Youngův modul pružnosti. Vysocepevný kompozit MOC/grafen by mohl najít uplatnění ve stavebním průmyslu, zatímco kompozity MOC/grafen se simulanty hornin by mohly v budoucnu sloužit jako základní stavební materiál na Měsíci a Marsu.

Scintilační vlastnosti PbHfO_3 dopovaného vápníkem a bismutem

Herbert Kindl (B3)

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

Od počátku 20. století, kdy E. Rutherford detekoval záření alfa pomocí stínítka se ZnS a položil tak základy jaderné fyziky, byla započata snaha vyvíjet nové scintilující materiály schopné detekovat ionizující záření. Při naší práci byly studovány scintilační vlastnosti dopovaného PbHfO_3 , který byl zvolen pro jeho vysokou hustotu ($10,2 \text{ g/cm}^3$), vysoké efektivní atomové číslo, ale také pro nedostatek informací o jeho scintilačním chování. To má zřejmě původ v nesnadné přípravě oxidu, který má jednak vysokou t.t. a zároveň obsahuje PbO s vysokou tenzí par. V předešlé části výzkumu jsme zjistili, že dopování stronciem nemá téměř žádné výsledky, i přes to že SrHfO_3 je významným scintilátorem. Proto jsme přešli k dopování bismutem, kde je možno sledovat luminiscenci Bi^{3+} a zároveň zachovat těžkou matici, a vápníkem, kde bylo snahou měnit šíři zakázaného pásu. Peroxo-precipitační metodou byly připraveny série $\text{Ca}_x\text{Pb}_{(1-x)}\text{HfO}_3$ a $\text{Bi}_x\text{Pb}_{(1-x)}\text{HfO}_3$. Zatímco vzorky obsahující Ca nevykazují téměř žádné scintilační vlastnosti, vzorky obsahující Bi v koncentracích $x = 0,01$ a $0,2$ mají silné emisní maximum okolo 474 nm . Tyto vzorky jsou v současné době podrobněji opticky charakterizovány (měření fotoluminiscence a kinetiky obou luminiscenčních jevů) a budou připraveny další koncentrace dopantu.

Testování hydrotermálního růstu v přípravě perovskitů

Karin Paurová (B3)

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

Perovskity jsou skupinou materiálů s krystalovou strukturou založenou na struktuře minerálu perovskitu (CaTiO_3) mající buď kubickou nebo velmi blízkou distortovanou strukturu. Tyto materiály nabízí širokou škálu různých kombinací chemického složení a vlastností (např. ferroelektrické a piezoelektrické vlastnosti, supravodivost) pro různorodé uplatnění např. v elektronice, fotovoltice atd. Perovskity lze připravit v různých formách např. reakcí v pevné fázi, CVD povlakováním nebo sol-gel metodou. Tyto metody z hlediska vysokých pracovních teplot nejsou ovšem vhodné pro přípravu multivrstevnatých materiálů s různou tepelnou stálostí. Tento problém lze vyřešit hydrotermální syntézou. Cílem této práce bylo vyzkoušet přípravu částic a tenkých vrstev BaTiO_3 hydrotermálním růstem, při kterém dochází ke krystalizaci látek z vodných roztoků při vysokých tlacích a nízkých teplotách. Jelikož tyto vrstvy budou kombinovány např. s nanodiamantovou strukturou, zaměřili jsme se na fázovou čistotu a krystalinitu bez dalšího vysokoteplotního zpracování.

Recyklace supravodivých kompozitů YBCO a využití jejích produktů

Jan Sklenka (B3)

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

Vysokoteplotní supravodivé disky na bázi směsného oxidu mědi YBCO jsou připravovány jako jednodoménové monokrystaly růstem z taveniny metodou TSMG (top-seeded melt growth). Tyto disky jsou následně podrobeny analýze supravodivých vlastností (levitační síla). Pokud jsou během této analýzy objeveny výraznější odchylky (například z důvodu růstu sekundárních zrn), je nutno tyto disky vyřadit. Cílem této práce je optimalizovat proces recyklace těchto defektních disků chemickou cestou a využít suroviny získané recyklací k úspěšné přípravě nových jednodoménoových monokrystalů. YBCO disky a produkty recyklace byly detailně analyzovány pomocí rentgenové fluorescence (XRF) a rentgenové difrakce (XRD). Vyvinutí této metody a její uvedení do praxe zajistí uzavření výrobního cyklu supravodičů na bázi YBCO a vyřeší problém s ukládáním cenného, avšak nebezpečného odpadu.



Příprava a studium hořčnatých kompozitních materiálů s přidavkem nanomateriálů na bázi uhlíku

Julie Slámová (B2)

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

Tato práce byla zaměřena na přípravu a následnou analýzu kompozitních materiálů dopovaných uhlíkovými nanoaditivami (grafen, oxid grafenu, vícevrstvé uhlíkové nanotrubičky). Jejich základem byla fáze 5 Sorelova cementu (MOC). Pro přípravu byl využit vysoce reaktivní oxid hořčnatý, který sloužil z části také jako plnivo. Celkem byly připraveny dva vzorky kompozitů kombinující grafen a uhlíkové nanotrubičky, dva vzorky kombinující oxid grafenu a oxidované uhlíkové nanotrubičky a jeden referenční vzorek čisté fáze 5 MOC. Po vytvrzení byly výsledné produkty podrobeny analýzám XRD, SEM, TEM, EDS a OM s jejichž pomocí bylo zkoumáno chemické a fázové složení a mikrostruktura. Byly také stanoveny mechanické vlastnosti připravených kompozitů.

Fázová stabilita $\text{Lu}_2\text{Hf}_2\text{O}_7$ se strukturou pyrochloru

Vojtěch Ševčík (B3)

Školitel: Ing. Vít Jakeš, Ph.D.

Směsné oxidy těžkých prvků jsou ve výzkumu stále žádanými materiály pro vývoj scintilátorů užívaných pro detekci tvrdého záření. $\text{Lu}_2\text{Hf}_2\text{O}_7$ patří zatím mezi méně prozkoumané, avšak slibné kandidáty pro další výzkum a využití díky vysokému efektivnímu protonovému číslu a vysoké materiálové hustotě. Cílem této práce byla příprava $\text{Lu}_2\text{Hf}_2\text{O}_7$ ve formě keramické preformy, která se využije při růstu monokrystalu metodou Optical Floating Zone (OFZ). Prekurzor byl připraven reakcí v pevné fázi s vícestupňovým žíháním a z něho byly následně izostaticky za studena vylisovány tyčky, které se poté slinovaly při teplotách 1500–1700 °C. Cílem bylo připravit fázově čistou kompaktní keramiku s maximální objemovou hustotou. Fázové složení bylo analyzováno za pomoci metody XRD a stechiometrie ověřena pomocí XRF. Mikrostruktura byla pozorována pomocí SEM. Stejným postupem pak bude připraven materiál dopovaný Ce^{3+} na němž budou zkoumány již i optické a scintilační vlastnosti.

S2 (M1+M2)

MÍSTO: LACH_A39 (LABORATOŘ D2)

KOMISE

prof. Dr. Ing. David Sedmidubský (předseda)

Ing. Martin Pižl, Ph.D.

Ing. Irena Hoskovcová, CSc.

Ing. Jiří Šturala, Ph.D.

doc. Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.

Ing. Stanislav Staněk, Ph.D.

Ing. Vilém Bartůněk, Ph.D.

Ing. Jan Luxa, Ph.D.

PROGRAM

09:30 **zahájení**

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

Chemické modifikace germananu a jejich využití v elektrochemické detekci plynů

09:45 [Bc. Darya Ivanova](#) (M2, Ing. Vlastimil Mazánek, Ph.D.)

Search for new nanomaterial catalysts for the electrochemical reduction of Nitrogen to Ammonia

10:00 [Bc. Jan Konečný](#) (M2, Ing. Jiří Šturala, Ph.D.)

Fotochemická modifikace germananů karbonyly přechodných kovů

10:15 [Bc. Alice Kulagová](#) (M2, Ing. Hana Kotoučová, Ph.D.)

Elektrochemické vlastnosti flavinů s bráněnou rotací

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

Analýza kokainu a jeho ředicích látek metodou XRPD

11:00 [Bc. Fedor Levchenko](#) (M2, doc. Ing. Kateřina Rubešová, Ph.D.)

Ovlivnění parametrů granátu konstrukčními prvky

11:15 [Bc. Alžběta Martincová](#) (M2, Ing. Štěpán Huber, Ph.D.)

Analýza heroinu a jeho ředících látek metodou XRPD

11:30 [Bc. Petra Šnoblová](#) (M1, Ing. Vilém Bartůněk, Ph.D.)

Adsorpční vlastnosti nanokrystalů oxidu ceričitého

Chemické modifikace germananu a jejich využití v elektrochemické detekci plynů

Bc. Dominik Chmelař (M1)

Školitel: Ing. Vlastimil Mazánek, Ph.D.

Germanan je 2D nanomateriál, podobný grafenu a silicenu. Společně s těmito materiály patří mezi jedny z moderních materiálu nano světa a disponuje vlastnostmi jež mu dávají mnohé využití ve vědě a elektronice. Jednou z těchto vlastností je jeho schopnost na svém povrchu adsorbovat molekuly organických rozpouštědel. Tyto molekuly následně ovlivňují elektrochemické vlastnosti tohoto materiálu, které je možné pozorovat a měřit. Způsobem měření těchto změn je Elektrochemická impedanční spektroskopie. Tato metoda umožňuje zaznamenávat vliv adsorbované látky na fázovém posunu a impedanci materiálu. Různé látky mají různý vliv na tyto vlastnosti, a tak je možné tyto látky pomocí těchto rozdílů identifikovat. Germanan je také možné modifikovat a díky tomu upravit nejen schopnost materiálu sorbovat organická rozpouštědla, ale také umožňuje prodloužit trvanlivost materiálu či jeho selektivitu k různým rozpouštědlům. To vše nám dává možnost upravit materiál jak je třeba, tak aby detekoval požadované organické rozpouštědlo. Germanany v této práci byly syntetizovány ze Zintlových fází, následně modifikovány a nanášeny na prstové elektrody na kterých byla následně měřena elektrochemická impedanční spektroskopie. Výsledky měření byly poté použity k zhodnocení senzorových vlastností materiálu

Search for new nanomaterial catalysts for the electrochemical reduction of Nitrogen to Ammonia

Bc. Darya Ivanova (M2)

Školitel: Ing. Vlastimil Mazánek, Ph.D.

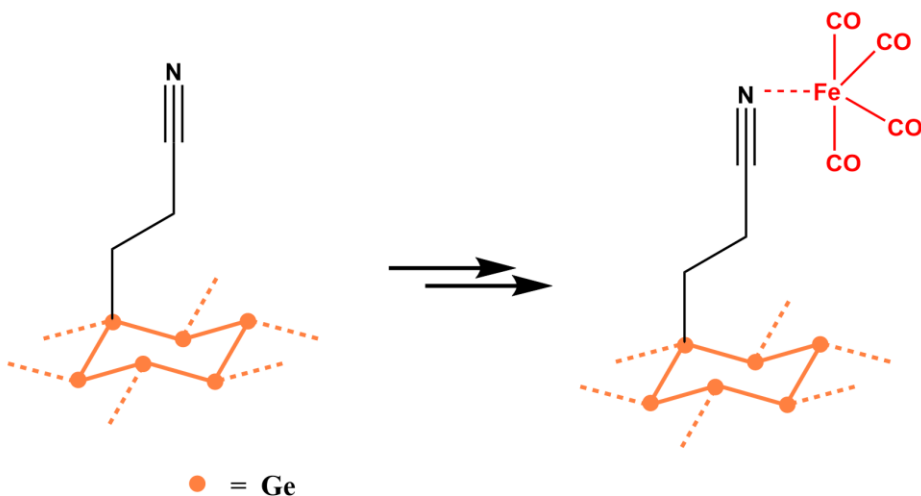
Ammonia occupies a significant place in modern industry due to its various applications in many different fields such as production of ammonium nitrate and urea which are used as fertilizers, and fossil fuels. However, the main means involved in its production is the Haber-Bosch process which is a highly energy-demanding process due to the operating conditions causing increased costs as well as unfavourable environmental consequences. Therefore, as a more beneficial alternative, electrochemical nitrogen reduction reaction (NRR) is being developed but on a smaller scale which aims to optimize the process. One of the limitations of this new method, is the efficiency and selectivity of catalysts. Unfortunately, the NRR competes with an electrochemical hydrogen reduction reaction (HER) which is usually more favourable reaction. Therefore, this work is focused on materials with lower HER electrocatalytic activity based on previous theoretical and experimental studies. Since there are a lot of options in the groups of transition metals, chalcogenides or thiophosphates which have not yet been investigated for NRR, this work focuses on widening the range of possibilities by testing a series of metal thiophosphates for the high yields of ammonia with appropriate faradaic efficiency.

Fotochemická modifikace germananů karbonyly přechodných kovů

Bc. Jan Konečný (M2)

Školitel: Ing. Jiří Šturala, Ph.D.

Díky svým unikátním vlastnostem, jako jsou například velký specifický povrch, katalytické a elektrochemické vlastnosti, jsou vrstevnaté materiály v dnešní době velmi podrobně zkoumané látky. Některé z těchto vlastností se dají výrazně ovlivnit pomocí chemické modifikace původního materiálu tak, aby přesně vyhovovaly zamýšlené aplikaci. Tato práce se zabývá fotochemickou modifikací kyanopropyl germananu pomocí komplexů přechodných kovů, např. $\text{Mn}(\text{Cp})(\text{CO})_3$ nebo $\text{Fe}(\text{CO})_5$. Reaktivita germananu s komplexy se porovnává v závislosti na použitém rozpouštědle a přítomnosti, či absenci UV záření. Při reakci se uvažuje substituce pouze jedné CO skupiny, ale je možné nahradit více než jednu.

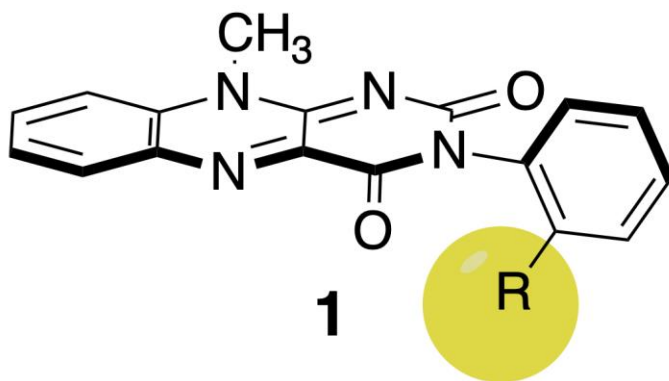


Elektrochemické vlastnosti flavinů s bráněnou rotací

Bc. Alice Kulagová (M2)

Školitel: Ing. Hana Kotoučová, Ph.D.

Jedním ze současných témat katalýzy je využití flavinů či flaviniových solí jako organokatalyzátorů. Inspirací pro katalyzátory fungující *in vitro*, jsou systémy pracující *in vivo*, kde jsou flaviny přenašeči elektronů. Pokud jsou tyto látky opticky čisté, lze je využít pro katalýzu enantioselektivní. Takovým příkladem jsou axiálně chirální flaviny s bráněnou rotací **1**. Objemný substituent R ovlivňuje rotaci kolem sigma vazby mezi atomem dusíku na flavinu a atomem uhlíku na fenylu. Tyto substituenty mohlo být jak částice elektronegativní, tak elektropozitivní. Předmětem mé práce je studium elektrochemických vlastností těchto látek v souvislosti s jejich vypočtenými rotačními bariérami a také studium vlivu těchto substituentů na možnost jejich komplexace s ionty kovů.



Analýza kokainu a jeho ředících látek metodou XRPD

Bc. Tomáš Lazák (M2)

Školitel: Ing. Štěpán Huber, Ph.D.

Moje práce se zabývá kvalitativní analýzou kokainu a jeho ředících látek pomocí metody práškové rentgenové difrakce. V práci jsem analyzoval čistý i pouliční vzorek kokainu, nejčastěji používané ředicí látky, se kterými se kokain při nelegální distribuci ředí. Dále jsem si připravil a změřil směsi kokainu a vybraných ředících látek, které jsem analyzoval pomocí knihovny difraktogramů, kterou jsem sestavil z naměřených difraktogramů čistého kokainu a čistých ředících látek. Prášková rentgenová difrakce není ve forenzní praxi doposud hojně využívána, ačkoliv Úřad OSN pro drogy a kriminalitu tuto metodu jako jednu z možných doporučuje. V budoucnu by tato metoda, pro svoji jednoduchou obsluhu a nenáročnost přípravy vzorku, mohla být ve forenzní praxi více využívána.

Ovlivnění parametrů granátu konstrukčními prvky

Bc. Fedor Levchenko (M2)

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

Granáty jsou známými materiály díky své vysoké tvrdosti, odolnosti vůči tepelnému šoku, relativně vysoké hustotě, chemické stabilitě atd. Tyto vlastnosti mají navíc kvůli kubické struktuře izotropní chování. Díky tomu mají v dnešní době syntetické granáty velké uplatnění v optice, zejména po dopování opticky aktivními ionty. Existuje celá řada granátových materiálů, které mají uplatnění v luminiscenčních technikách, např. YAG:Nd, LuAG:Pr anebo GGAG:Ce. Jak už bylo řečeno, struktura takových materiálu se skládá z oxidové matrice a aktivátoru (dopantu), který pak emituje charakteristické záření. V případě scintilačního efektu předchází emisi komplexní proces absorpce a přenosu excitonů, který souvisí se šířkou zakázaného pásu. Je známo, že s měnicí se koncentrací konstrukčních prvků v granátu lze ovlivňovat šířku zakázaného pásu, a tím i vzájemnou polohu energetických hladin dopantu. Takto lze nastavovat kvantový výtěžek a doby dosvitu scintilace, případně vlnovou délku emitovaného světla. Tato práce se zabývá vlivem obsahu konstrukčních prvků na scintilační a luminiscenční parametry granátů se sumárním vzorcem $Gd_3(Ga,Sc,Al)_5O_{12}:Ce$. I když koncentrační vliv Sc/Al, Al/Ga zvlášť na parametry zakázaného pásu granátu byl již studován, vliv více parametrů najednou zatím nebyl publikován.

Analýza heroinu a jeho ředicích látek metodou XRPD

Bc. Alžběta Martincová (M2)

Školitel: Ing. Štěpán Huber, Ph.D.

Hlavním tématem mé práce je rentgenová prášková difrakce, což je analytická metoda, kterou využívám pro kvalitativní analýzu heroinu a jeho směsí s ředicími látkami nejčastěji se vyskytujícími v pouličních vzorcích. Heroin zde vystupuje jako zástupce ilegálních drog. Dále se zaměřuji na různé doposud známé způsoby vyhodnocení kvantitativní analýzy u rentgenové práškové difrakce, které porovnávám jak mezi sebou, tak i s metodou vytvořenou v mé bakalářské práci pro odhad procentuálního zastoupení látek v dané směsi. Mezi těmito metodami se snažím najít rozdíly v přesnosti stanovení kvantity pro různé typy směsí. Rentgenová prášková difrakce doposud není využívána v této oblasti forenzní praxe, avšak je otázka, zda by v budoucnu mohla posloužit jako nezávislá analytická metoda, která by doplňovala analytické metody ve forenzní praxi v současné době užívané.

Adsorpční vlastnosti nanokrystalů oxidu ceričitého

Bc. Petra Šnoblová (M1)

Školitel: Ing. Vilém Bartůněk, Ph.D.

V této práci je věnována pozornost využití hydratovaných nanokrystalů oxidu ceričitého pro účely odstraňování vybraných organických látek z vody. Nanokrystaly byly připraveny precipitační metodou a následně byly charakterizovány pomocí HRTEM a rentgenové difrakce. Bylo vybráno deset organických látek s dobrou rozpustností ve vodě, s aromatickým jádrem a různými funkčními skupinami. K roztokům těchto látek bylo přidáno určité množství hydratovaného oxidu ceričitého a bylo uděláno srovnání s roztokem obsahujícím ekvivalentní množství vysušeného oxidu ceričitého, který byl připraven vysušením hydratovaných nanokrystalů. Absorbance všech vzorků byla měřena v čase pomocí UV-Vis spektroskopie. U osmi vybraných sloučenin, u kterých byl na UV-Vis spektru viditelný pokles absorbance, bylo změřeno i Ramanovo spektrum, ze kterého následně byl určován možný typ sorpce a vazebné centrum.

Ústav anorganické technologie (105)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Miloslav Lhotka, Ph.D.

SEZNAM SEKČÍ

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

Ústav anorganické technologie I

MÍSTO: A44

KOMISE

Doc. Dr. Ing. Vlastimil Fíla (předseda)

Doc. Ing. Tomáš Bystroň, Ph.D.

Ing. Ivona Sedlářová, Ph.D.

Ing. Michal Baudys, Ph.D.

Ing. Jakub Mališ, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Bc. Kirill Iablochkin](#) (M2, doc. Dr. Ing. Vlastimil Fíla)

Membrány pro separaci CO₂ z bioplynu

09:15 [Bc. Jaroslav Kasan](#) (B1, Ing. Milan Bernauer, Ph.D.)

Konverze CO₂ na methan.

09:30 [Bc. Petr Lodňánek](#) (M2, Ing. Ivona Sedlářová, Ph.D.)

Oxidace síranu železnatého vzduchem

09:45 [Bc. Stanislava Mikulášiová](#) (M2, None)

Problém prekročenia obsahu čpavku vo vystripovaných vodách

10:00 [Bc. Filip Stankuš](#) (M2, Ing. Miloslav Lhotka, Ph.D.)

Experimentální studie vybraných termochemických reakcí

11:15 [Bc. Světlana Trundová](#) (M2, doc. Ing. Martin Zlámal, Ph.D.)

Hydrotermální příprava nanostrukturních titanátů

Membrány pro separaci CO₂ z bioplynu

Bc. Kirill Iablochkin (M2)

Školitel: doc. Dr. Ing. Vlastimil Fíla

V současné době membránové separační procesy nachází široké uplatnění v řadě průmyslových aplikací (zpracování vod, petrochemický průmysl, potravinářský průmysl, separace plynů). S vývojem nových materiálů dochází k jejich dalšímu rozvoji. Jednou z významně rozvíjejících se aplikací je membránová separace plynů. V současné době kromě separace vodíku, kyslíku a dusíku je pozornost zaměřena i na separaci CO₂. Jednou z takovýchto aplikací, na kterou je zaměřena i tato práce, je zpracování bioplynu na biomethan, který lze následně použít jak pro výrobu energie, tak i v chemickém průmyslu. Předkládaná práce se zabývá přípravou a charakterizací polymerních membrán na bázi 6FDA-DAM, Matrimidu, PSU a Ultemu. Uvedené membrány byly připraveny metodou lití z roztoků obsahujících 4 - 8 hm. % daného polymeru v N-methyl pyrrolidonu. Charakterizace připravených membrán byla prováděna pomocí permeačních měření v binární směsi CO₂/CH₄ na aparatuře s plynovým chromatografem, vybaveným plamenově ionizačním detektorem a metanizérem.

Konverze CO₂ na methan.

Bc. Jaroslav Kasan (B1)

Školitel: Ing. Milan Bernauer, Ph.D.

Methanizace nebo také Sabatierova reakce je katalytická hydrogenace oxidů uhlíku (CO a CO₂), která nalézá uplatnění v širokém spektru oborů, ve kterých je například potřeba eliminovat stopová množství CO_x, nebo konvertovat jejich přebytek na uhlovodíky. V dnešní době je výzkum methanizace zaměřen také na řešení problémů spojených s globálním oteplováním a efektivnějším využíváním surovin. Výzkum katalyzátorů pro methanizaci CO₂ se především soustředí na studium jeho aktivní (kovové) složky, ale také na strukturu jeho nosiče. Bylo zjištěno, že nejsilnější katalytický vliv na tuto reakci mají kovy skupiny VIIIB a to v následujícím pořadí: Ru > Fe > Ni > Co > Rh > Pd > Pt > Ir. Nejčastěji používanými nosiči jsou alumina nebo zeolitické matrice. Tato práce se zabývá katalytickými testy na souboru zeolitických katalyzátorů s cílem porovnat jejich aktivitu s nejčastěji používaným typem katalyzátoru - Ni-zeolit. Byla sestavena methanizační aparatura a odladěn plynový chromatograf pro analýzu produktů a reaktantů. Pro srovnání byl připraven kontrolní vzorek Ni-ZSM-5 a dále pak série katalyzátorů na různých typech zeolitů (Ferierit, ZSM-5, MCM-22). V rámci práce byl také zkoumán vliv aktivního kovu (Fe, Ni, Mo).

Oxidace síranu železnatého vzduchem

Bc. Petr Lodňánek (M2)

Školitel: Ing. Ivona Sedlářová, Ph.D.

V průmyslu v ČR i ve světě vzniká velké množství odpadních vod s obsahem síranových iontů a iontů železa. Možným postupem pro odstranění železa z těchto roztoků je oxidace železnatých iontů na železitě a jejich následná precipitace ve formě pevné fáze (hydroxidy, oxidy a oxidy-hydroxidy železnatých a železitých iontů v různém poměru). V práci se sleduje oxidace roztoku síranu železnatého vzduchem v izotermním vsádkovém, intenzivně míchaném reaktoru. V průběhu experimentu jsou odebírány vzorky, ve kterých se stanovuje koncentrace železnatých iontů fotometricky, s využitím fenantrolinu. Práce spočívá v pozorování chování popsaného reakčního systému při různém pH.

Problém prekročenia obsahu čpavku vo vystripovaných vodách

Bc. Stanislava Mikulášiová (M2)

Školiteľ: None

Cieľom procesu stripovania kyslých vôd je zbavenie týchto vôd sírovodíka a čpavku ako aj dodržanie limitnej hodnoty obsahu čpavku vo vystripovanej vode. Prekročenie spomínanej hodnoty spôsobuje narušenie technologického režimu na biologickom stupni čističky odpadových vôd. Ako hlavné príčiny vzniku rizikovej situácie boli identifikované nepostačujúce vykúrenie kolóny a neštandardná kvalita suroviny. Pri analýze dát boli k vzorkám s prekročeným limitom obsahu čpavku vo vystripovanej vode, hľadané príčiny pozorovaním režimu na prevádzkach produkujúcich a spracúvajúcich kyslé vody. Ako častá príčina nedostatočného vykúrenia kolóny bol určený nestály tlak pary. Z dôvodu hľadania príčiny neštandardnej suroviny bola vytvorená mapa kyslých vôd. Materiálová bilancia poukázala na pravdepodobné problematické kontinuálne procesy. Ďalšou príčinou môžu byť diskontinuálne procesy, na ktoré vplýva ľudský faktor. Výkyvom v parnej sieti možno pripísať 5% nevyhovujúcich vzoriek, preto sa upriamila pozornosť na riešenie problému neštandardnej kvality suroviny. Jedným z riešení by bolo efektívnejšie prečistenie suroviny pred vstupom do kolóny ako aj odstavenie problematických prúdov, čistenie zariadení počas odstávok, vybudovanie zbernej nádrže na kyslé vody, zlepšenie kooperácie medzi prevádzkami.

Experimentální studie vybraných termochemických reakcí

Bc. Filip Stankuš (M2)

Školitel: Ing. Miloslav Lhotka, Ph.D.

S neustále zvyšující se spotřebou ropy je nutnost její těžbu provádět stále na hůře dostupných místech (např. mořská a oceánská dna). K těžbě ropy se používá jev „nadržení parafínu“, který je značně zkomplikován na místech o nízkých teplotách, jelikož zde může docházet k ucpávání potrubí voskovými usazeninami. Jedním z nejčastěji používaných řešení tohoto problému jsou reakce, při kterých dochází ke generování plynu in-situ za současného vývoje tepla. Do této kategorie je možné zařadit reakci mezi dusitanem sodným a chloridem nebo dusičnanem amonným. Tyto reakce jsou vysoce exotermní a generuje se velké množství plynného dusíku. Za určitých podmínek mohou v reakčním systému probíhat vedlejší reakce, které vedou ke vzniku NO a NO₂. Cílem práce bylo určení optimálních provozních podmínek reakce, aby převážně probíhala s vysokým výtěžkem reakce mezi dusitanem sodným a chloridem amonným a minimalizovala se vedlejší reakce produkující NO_x.

Hydrotermální příprava nanostrukturních titanátů

Bc. Světlana Trundová (M2)

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

Nanostrukturní sloučeniny titanátů nebo oxidu titaničitého připravované z částic TiO_2 v prostředí NaOH našly své uplatnění pro své unikátní strukturní vlastnosti např. v oblasti katalýzy. Mechanismus jejich tvorby je založen na oddělování nanoplátů titanátů z původních částic oxidu titaničitého vlivem vysoce koncentrovaného hydroxidu sodného a jejich následné přeměně, tzv. rolováním do formy nanotrubic či nanotyčí. Tato práce se zabývá syntézou nanostrukturních sloučenin titanu pomocí hydrotermální metody. První částí přípravy nanotrubic TiO_2 byla optimalizace syntézy, proto byl studován vliv několika parametrů, které mají zásadní vliv pro přípravu těchto nanostrukturních sloučenin, tj. koncentrace hydroxidu sodného, teplota reakce a předmíchání směsi TiO_2 s roztokem NaOH před samotnou hydrotermální syntézou. Ověření morfologie částic bylo provedeno pomocí elektronové mikroskopie, prvkové a krystalografické složení bylo analyzováno pomocí XRF a XRD. U vybraných vzorků byla stanovena tepelná stabilita metodou TG/DTA a velikost specifického povrchu metodou BET (N_2). Velikost připravovaných částic byla změřena metodou laserové difrakce.

Ústav anorganické technologie II

MÍSTO: A32

KOMISE

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

Doc. Ing. Martin Zlámal, Ph.D.

Ing. Šárka Paušová, Ph.D.

Ing. Milan Bernauer, Ph.D.

Ing. Martin Prokop, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Bc. Barbora Kuntová](#) (M2, doc. Ing. Tomáš Bystroň, Ph.D.)

Anodická diazidace alkenů

09:15 [Patrik Švejda](#) (B3, doc. Ing. Tomáš Bystroň, Ph.D.)

Elektrochemická redukce fenacylbromidu na borem dopované diamantové elektrodě

09:30 [Bc. Jan Dismas Buriánek](#) (M1, doc. Ing. Tomáš Bystroň, Ph.D.)

Elektrochemická příprava diaryjodoniových solí

09:45 [Bc. Martin Jirásko](#) (M2, doc. Ing. Tomáš Bystroň, Ph.D.)

Optimalizace elektrochemické syntézy derivátů jodbenzenu v průtočném reaktoru

10:00 [Martin Augustin](#) (B3, Ing. Jakub Mališ, Ph.D.)

Vliv extrémních klimatických podmínek na provoz svazku PEM palivových článků

10:15 [Jakub Roubal](#) (B3, Ing. Jakub Mališ, Ph.D.)

Porovnání těsnění pro PEM palivový článek připravených metodou 3D tisku a odléváním

10:30 [Tomáš Jedlička](#) (B3, Ing. Jakub Mališ, Ph.D.)

Porovnání životnosti katalyzátorů na bázi čisté platiny a slitiny Pt-Ce

Anodická diazidace alkenů

Bc. Barbora Kuntová (M2)

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

Přeměna alkenů na diazidy následovaná redukcí představuje elegantní způsob syntézy vicinálních diaminů, jež jsou častým strukturním motivem řady biologicky a farmaceuticky aktivních látek. Zavedené chemické postupy diazidace alkenů využívají stechiometrického množství činidel obsahujících atomy těžkých kovů či nestabilních, toxických látek. Nedávno byla představena robustní metoda diazidace [1] využívající nepřímé anodické oxidace alkenů v roztoku acetonitrilu v přítomnosti azidu v neděleném elektrolyzáru. Její nevýhodou je využití katalytického množství manganatých iontů, které představují mediátor. V první fázi výzkumu byly studovány jednotlivé kroky tohoto procesu pomocí cyklické voltametrie. Při pokusu o zreprodukování tohoto postupu diazidace se ukázalo, že v průběhu elektrolýzy dochází k depozici pasivující vrstvy na povrchu protielektrody, která vede k výraznému poklesu proudu. V dalším kroku byl proto navržen alternativní způsob diazidace založený na anodické oxidaci derivátu jodbenzenu na vhodné pracovní elektrodě. Efektivita obou diazidačních postupů bude dále ověřena a porovnána pomocí potenciostatické vsádkové elektrolýzy.

[1] Sharma, A.; Hartwig, J. Metal-catalysed azidation of tertiary C–H bonds suitable for late-stage functionalization. *Nature* 2015, 517, 600–604.

Elektrochemická redukce fenacylbromidu na borem dopované diamantové elektrodě

Patrik Švejda (B3)

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

Při farmaceutické výrobě dochází často k nutnosti použít oxidační/redukční činidla, která mohou být toxická, či jinak nebezpečná. Se stále rostoucím tlakem na čistotu produktu, finanční přijatelnost tovární produkce a bezpečné a ekologické zpracování reakčního odpadu, dochází k potřebě hledat alternativní cesty pro syntézu, které uspokojí všechny požadavky. Jednou z možností je elektrochemická oxidace/redukce, při které odpadá práce s činidly a následné zpracování zbytků, neboť dochází k přenosu elektronů přímo mezi elektrodou a látkou v roztoku. Ve své práci jsem se zabýval elektrochemickou redukcí látek ze skupiny acetofenonů a 2-bromacetofenonů v bezvodém protickém prostředí NaClO_4 v methanolu na borem dopované diamantové elektrodě. Experimenty byly provedeny v tříelektrodovém uspořádání. V první fázi byl za pomoci cyklické voltametrie zkoumán efekt přidavku H_2SO_4 do roztoku elektrolytu před přidáním a po přidání aktivní látky. Porovnání voltamogramů jasně ukázalo, že protonace karbonylové skupiny má výrazný vliv na potenciál, při kterém dochází k redukcí látky. Získané informace budou dále použity k výběru potenciálů pro provedení potenciostatických vsádkových elektrolýz s cílem charakterizovat vznikající produkty.

Elektrochemická příprava diaryljodoniových solí

Bc. Jan Dismas Buriánek (M1)

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

Diaryljodoniové soli jsou perspektivní oxidační a arylační činidla na bázi trojvazného jódu. Pro aplikaci se připravují tradičními metodami organické syntézy. Předmětem tohoto příspěvku je představení výsledků praktické přípravy a analýzy těchto látek za využití anodické oxidace. Laboratorně byla reprodukována elektrochemická příprava tolyl-fenyl jodoniového kationtu (Peacock, Pletcher, 2001) založená na elektrolýze toluenu a jodbenzenu v nevodném prostředí o složení kyselina octová/acetanhydrid/kyselina sírová na elektrodě ze skelného uhlíku. Pro potvrzení mechanismu byly naměřeny voltamogramy výchozích látek v elektrolytu za využití metod cyklické voltametrie. Kontrola přítomnosti produktu po provedení elektrolýzy byla provedena hmotnostní spektrometrií a nově vyvinutým titračním stanovením diaryljodoniových solí. Jako perspektivní metoda titračního stanovení se ukázala být zpětná potenciometrická jodometrická titrace askorbové kyseliny po redukci diaryljodoniové soli nadbytkem askorbové kyseliny. V závěru příspěvku budou diskutovány možnosti dalšího zkoumání této metody přípravy diaryljodoniových solí a optimalizace titračního stanovení.

Optimalizace elektrochemické syntézy derivátů jodbenzenu v průtočném reaktoru

Bc. Martin Jirásko (M2)

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

Hypervalentní sloučeniny jodu jsou specifická oxidační činidla využívána v řadě oxidačních reakcí, kde se využívají jako netoxické analogy k oxidačním činidlům obsahujících atomy těžkých kovů (Cr, Mo, W). Mezi typické reakce patří například oxidace vicinálních alkoholů na α -hydroxyketony nebo na diketony v závislosti na teplotě. Neustále rostoucí poptávka po těchto sloučeninách ovlivňuje i výzkum bezpečnějšího způsobu výroby, neboť dosavadní výrobní postup vyžaduje manipulaci s nebezpečnými, toxickými a nákladnými látkami. Slibnou alternativou, která je bezpečná i levná, se na základě předchozího výzkumu zdá být elektrochemická syntéza. Pomocí elektrolýzy při konstantním potenciálu jsme byli schopni připravit hypervalentní sloučeniny jodu a následně tento preparativní proces i zoptimalizovat z hlediska složení elektrolytu. Ve snaze vytvořit technologii celého výrobního postupu však vyvstala řada problémů, jež je potřeba postupně řešit. Jmenovitě bych rád zmínil obtížnou separaci produktů elektrolýzy, či transport substrátu z anodového do katodového prostoru přes kation selektivní membránu vedoucí k poklesu výtěžku produktu. Cílem této práce je omezení tohoto děje a optimalizace metody procesu separace produktu z roztoku po elektrolýze.

Vliv extrémních klimatických podmínek na provoz svazku PEM palivových článků

Martin Augustin (B3)

Školitel: Ing. Jakub Mališ, Ph.D.

Jedna z otázek provozu svazku palivových článků je jeho funkce za extrémních teplot. Nad 70°C dochází k vysoušení membrány. Jelikož svazek přeměňuje chemickou energii na elektrickou s přibližně 50% účinností, je nutné odvádět ze svazku značné množství tepla. Pokud je venkovní teplota nad 40 °C může dojít v důsledku nízkého teplotního gradientu k přehřátí svazku. Naopak při teplotách pod bodem mrazu může dojít ke zmrznutí vody vázané v membráně a katalytické vrstvě. V důsledku toho může dojít k trvalému poškození některé z výše uvedených komponent, případně k jejich delaminaci. Za běžného provozu je článek chlazen, při nízkých teplotách však záleží na tom, zda je množství tepla vznikajícího v článku dostatečné. V případě vstupujícího vzduchu nepředstavuje nízká okolní teplota problém, protože v důsledku jeho komprimace dochází k ohřátí a vzduch tak do katodového porostoru přichází vždy s dostatečnou teplotou. Jiná situace je však u vodíku, který bývá skladován za tlaku několika desítek až stovek barů. Při jeho expanzi sice dochází k jistému ohřátí díky Joule-Thompsonovu efektu, avšak při teplotách nižších než -10°C toto ohřátí není dostatečné a to může představovat potenciální problém pro provoz svazku. Cílem práce je navrhnout optimální technologické řešení obou problémů.

Porovnání těsnění pro PEM palivový článek připravených metodou 3D tisku a odléváním

Jakub Roubal (B3)

Školitel: Ing. Jakub Mališ, Ph.D.

PEM palivové články jsou slibnou technologií následujících let. Jejich vstupu do každodenního života běžného člověka brání zejména vysoká cena. Ta je zapříčiněna použitím sofistikovaných komponent, které jsou vyráběny složitými procesy. Jednou z komponent, které značně zvyšují cenu je těsnění, kterému se věnuje předložená práce. Těsnění má zásadní vliv na provozní bezpečnost, účinnost a životnost svazku. Vodík s kyslíkem tvoří hořlavou směs v širokém rozsahu koncentrací. Z tohoto důvodu je nutné, aby nedocházelo k únikům vodíku do okolí. Uniklý vodík již není možné využít a představuje tak ztrátu paliva. Vzhledem k působení redukčního a oxidačního média v kyselém prostředí s přítomností katalyzátoru může docházet ke zvýšené degradaci těsnění, které tak přestane plnit svojí funkci, v tom okamžiku přestává být bezpečné svazek provozovat a je nutné jej buď opravit, nebo vyměnit. S využitím 3D tisku se dají tisknout flexibilní materiály levně a strojově. Hlavní výhodou 3D tisku je minimalizace ztrát materiálu a značná variabilita vyráběných těsnění z hlediska tloušťky vrstev, teplot tisku a stupně plnění. Další možnou alternativou je plnění forem prekurzory těsnících past, které je však omezené tvarovými možnostmi forem.

Porovnání životnosti katalyzátorů na bázi čisté platiny a slitiny Pt-Ce

Tomáš Jedlička (B3)

Školitel: Ing. Jakub Mališ, Ph.D.

V PEM palivových článcích se standartně užívá platinových katalyzátorů. V zájmu zavedení této technologie je nezbytné snížit navážky Pt při zachování výkonových parametrů a životnosti. Jednou z možností, jak dosáhnout zvoleného cíle, je nahradit část Pt v katalyzátoru jiným kovem. Jako slibný kandidát se jeví slitina Pt - Ce, která sice vykazuje vysokou aktivitu, avšak velice rychle degraduje. Byly testovány čisté platinové katalyzátory a katalyzátory na bázi slitiny Pt-Ce v laboratorním kyslíkovo-vodíkovém článku. U obou testovaných katalyzátorů byly naměřeny zátěžové křivky, elektrochemická impedanční spektra a jejich změny v čase. Dále byla sledována změna velikosti katalitických částic a míra jejich shlukování do větších klastrů.

Ústav anorganické technologie III

MÍSTO: A25A

KOMISE

Prof. Dr. Ing. Josef Krýsa (předseda)

Ing. Miloslav Lhotka, Ph.D.

Ing. Jaromír Hnát, Ph.D.

Ing. Roman Kodým, Ph.D.

Ing. Michal Carda

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Bc. Nela Adamová](#) (M1, doc. Ing. Martin Paidar, Ph.D.)

Příprava a charakterizace YSZ elektrolytu

09:15 [Bc. Olívia Čobejová](#) (M1, Ing. Jakub Mališ, Ph.D.)

Porovnanie zliatinových a nezliatinových katalyzátorov pre palivové články typu PEM

09:30 [Bc. Vojtěch Drobný](#) (M1, Ing. Martin Prokop, Ph.D.)

Vliv tloušťky těsnění a komprese cely na výkon PEM elektrolyzéru vody

09:45 [Bc. Kateřina Hradečná](#) (M2, Ing. Jaromír Hnát, Ph.D.)

Niklová pěna jako elektroda pro alkalickou elektrolýzu vody

10:00 [Bc. Jan Křenovský](#) (M2, Ing. Jakub Mališ, Ph.D.)

Odolnost PEM palivového článku vůči opakovanému působení teplot pod bodem mrazu

10:15 [Bc. Jasmína Mičiaková](#) (M2, None)

Príprava trojzložkových katalyzátorov Ni-W-Fe pre zero-gap alkalickú elektrolýzu vody

Příprava a charakterizace YSZ elektrolytu

Bc. Nela Adamová (M1)

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

V poslední době roste zájem o obnovitelné zdroje energie, které nabízejí alternativu k fosilním palivům. Nevýhodou těchto zdrojů je jejich nestálý výkon v čase, a proto je třeba dočasně ukládat přebytečnou energii vhodnou technologií. Perspektivní technologií pro vratnou přeměnu energie jsou vysokoteplotní články s pevnými oxidy (SOC), jejichž hlavní výhodou je schopnost pracovat jako elektrolytický nebo jako palivový článek v rámci jednoho zařízení. Provozní teplota SOC se pohybuje kolem 800 °C, což vede k rychlé kinetice reakcí, ale zvyšuje nároky na použité materiály. Klíčovou součástí SOC je plynotěsný elektrolyt, který je nejběžněji tvořený oxidem zirkoničitým dopovaným oxidem yttritým (YSZ). Oxid yttritý vytváří kyslíkové vakance ve struktuře oxidu zirkoničitého a ovlivňuje tak iontovou vodivost YSZ elektrolytu. Tato práce byla zaměřena na přípravu a charakterizaci YSZ elektrolytu o různém přídavku dopantu Y_2O_3 . Nejprve byl syntetizován YSZ prášek a následně z něj byly připraveny elektrolyty, u kterých byly zkoumány strukturní vlastnosti spektroskopickými metodami a iontová vodivost pomocí elektrochemické impedanční spektroskopie. Získané výsledky nám umožňují lépe popsat vliv složení elektrolytu a strukturních vlastností na celkovou iontovou vodivost elektrolytu.

Porovnanie zliatinových a nezliatinových katalyzátorov pre palivové články typu PEM

Bc. Olívia Čobejová (M1)

Školiteľ: Ing. Jakub Mališ, Ph.D.

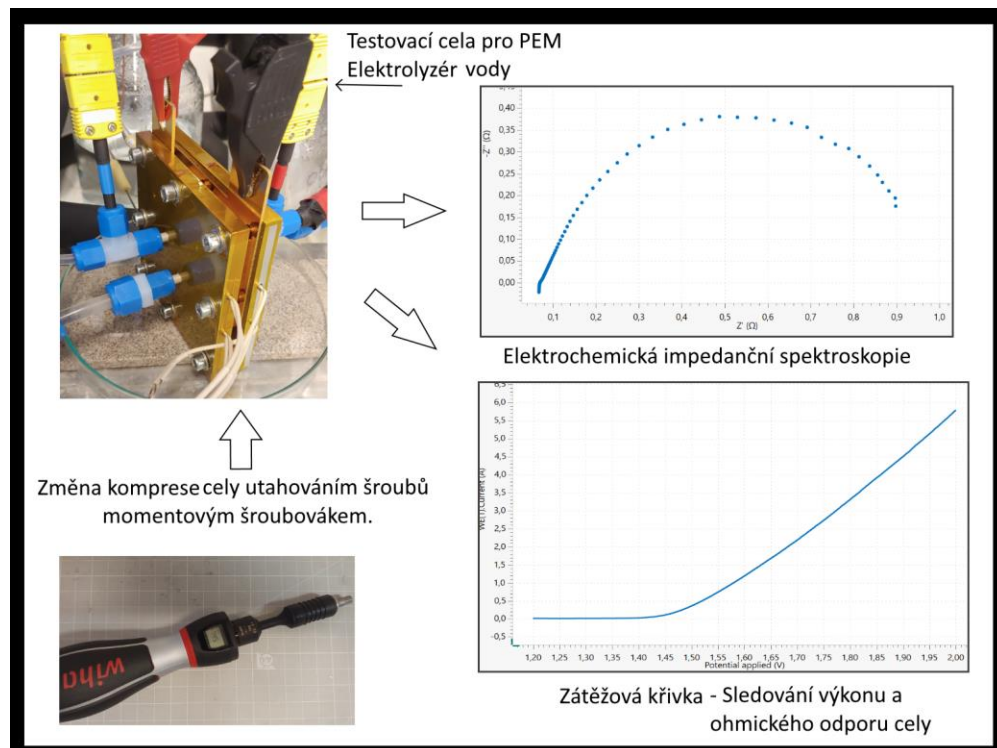
Palivové články typu PEM sú v dnešnej dobe považované za neoddeliteľnú súčasť energetickej budúcnosti. Jedným z problémov sprevádzajúcich ich vývoj je katalýza. Katalyzátor umožňuje rozpad vodíka na protóny a elektróny a ich nasledujúce reakcie s kyslíkom za vzniku vody. Membránový elektrolyt je pre protóny priepustný, pre elektróny tvorí bariéru. Elektróny sú nútené putovať na anódovú stranu skrz vonkajší obvod, kde sa ich tok prejavuje ako elektrický prúd. Elektródové reakcie vyžadujú kovy s vysokou aktivitou. Ako jediný vyhovujúci katalytický kov sa javí čistá platina. Jej vysoká cena a nízke surovinové rezervy majú za príčinu potrebu hľadania schodnejších alternatív. Nádej riešeniu problému dávajú zliatinové katalyzátory. Testované boli štyri typy katalyzátorov: katalyzátor z čistej platiny s obsahom 40% Pt nanosený metódou CCM na obe strany, katalyzátor zo zliatiny platiny a kobaltu s pomerom Pt:Co 3:1 nanosený metódou CCM na obe strany a katalyzátor zo zliatiny platiny a céru so 100 µg a 150 µg platiny nanosený metódou magnetronového naprašovania na anódovú stranu s katódovou stranou opatrenou katalyzátorom z čistej platiny s obsahom 40% Pt. Katalyzátory boli charakterizované z hľadiska chovania pri dlhodobej prevádzke, výkonových maxím a vplyvov zmien štruktúry.

Vliv tloušťky těsnění a komprese cely na výkon PEM elektrolyzáru vody

Bc. Vojtěch Drobný (M1)

Školitel: Ing. Martin Prokop, Ph.D.

Elektrolyzátor vody s polymerní membránou je progresivní technologií pro výrobu H_2 v rámci vodíkové ekonomiky. Vyniká především svojí kompaktností a vysokými proudovými hustotami, naproti tomu nevýhodou je vyšší cena. Cella se skládá z kation-selektivní membrány, anody s IrO_2 katalyzátorem a katody s Pt katalyzátorem na uhlíkovém nosiči. Ohmický odpor cely je klíčovým parametrem pro výkon elektrolyzáru. Odpor je ovlivněn zejména kontaktem elektrod s membránou, což souvisí s kompresí komponent v cele. Cílem této práce je ověřit vliv momentu stlačení cely na výkon elektrolyzáru. K charakterizaci byla využita elektrochemická impedanční spektroskopie a měření polarizačních křivek.



Niklová pěna jako elektroda pro alkalickou elektrolýzu vody

Bc. Kateřina Hradečná (M2)

Školitel: Ing. Jaromír Hnát, Ph.D.

Alkalická elektrolýza vody (AWE) představuje jednu z technologií uvažovanou pro konverzi a uskladnění elektrické energie. Vlastní elektrochemické reakce vývoje vodíku a kyslíku probíhají na elektrodách, které tak tvoří klíčovou součást alkalického elektrolýzérů, rozhodující o účinnosti celého procesu. V průmyslové AWE jsou často využívány ploché Ni elektrody. Využití 3D elektrody přináší výhodu většího měrného povrchu, a tedy navýšení počtu aktivních center. Tato změna vede v konečném důsledku ke zlepšení charakteristik AWE. K zapojení většího povrchu je také nutné zajistit dostatečný iontový kontakt v objemu porézní elektrody. Toho může být dosaženo zvolením vhodných pracovních podmínek AWE. Cílem této práce je charakterizace elektrochemických vlastností porézní Ni elektrody pro AWE za různých koncentrací roztoku KOH a teplot. Za tímto účelem byla studována kinetika reakce vývoje kyslíku a vodíku pomocí metod elektrochemické impedanční spektroskopie a provedením Tafelovy analýzy polarizačních křivek. Vedlejší cíl představuje ověření možnosti navýšení elektrochemických vlastností Ni pěny pomocí jednoduché předúpravy. Na základě získaných výsledků však pozitivní vliv zvolených možností předúpravy Ni porézní elektrody nebyl prokázán.

Odolnost PEM palivového článku vůči opakovanému působení teplot pod bodem mrazu

Bc. Jan Křenovský (M2)

Školitel: Ing. Jakub Mališ, Ph.D.

Aplikace technologie palivových článků v dopravě otevírá zcela nové otázky, které jsou u komerčních technologií takřka opomíjeny. Jednou z takovýchto oblastí je problematika studených startů, tj. startování vozidel za teplot pod bodem mrazu. V tomto případě je nutno rozlišovat krátkodobou a dlouhodobou odstávku vozidla, na základě čehož rozlišujeme metody studených startů. Podobně diferencujeme osobní a nákladní vozidla. U osobních vozů je preferovanější rychlost startu ve srovnání s těžkou technikou, kde dbáme na šetrnost postupu. Bod tuhnutí vody vázané ve struktuře membrány se pohybuje v rozmezí $-10\text{ }^{\circ}\text{C}$ až $-48\text{ }^{\circ}\text{C}$ v závislosti na podmínkách. Překročením saturačního limitu, který je 15 molekul vody na 1 sulfonovou skupinu dochází k tvorbě krystalů. Tomuto jevu lze zabránit snížením poměru molekul vody na jednu sulfonovou skupinu pod číslo 5. Při tvorbě krystalů ledu může dojít k poškození membrány, zejména jejímu proděravění, případně k delaminaci jednotlivých vrstev MEA, což vede k podstatnému snížení výkonu a zkrácení její životnosti. Cílem této práce je porovnání vlivu nízkých teplot na MEA s obsahem vody nad a pod saturačním limitem. Na základě těchto poznatků mohou být zvoleny optimální podmínky skladování MEA při nízkých teplotách a jejich uvedení do provozu.

Príprava trojzložkových katalyzátorov Ni-W-Fe pre zero-gap alkalickú elektrolýzu vody

Bc. Jasmína Mičiaková (M2)

Školiteľ: None

V súčasnej dobe sú primárnym zdrojom energie fosílna palivá. V dôsledku ich postupného vyčerpávania je snaha o hľadanie alternatív. Riešením je koncept vodíkovej ekonomiky s vodíkom ako ekologicky nosičom energie. Používanie vodíka nespôsobuje produkciu skleníkových plynov a predstavuje riešenie dekarbonizácie priemyselných procesov, kde je nutné znižovanie emisií CO₂. Alkalická elektrolýza je jeden zo spôsobov výroby vodíka, ktorá je zahrnutá v koncepte vodíkovej ekonomiky. Na urýchlenie kinetiky deja a zníženie energetických nákladov procesu sa využívajú katalyzátory. Cieľom práce bola príprava a optimalizácia podmienok prípravy trojzložkových katalyzátora na báze niklu elektrodepozíciou a štúdium katalytických vlastností pripravených katalyzátorov, ktoré sa testovali v zero-gap elektrolýze pre alkalickú elektrolýzu vody a morfológia vzoriek bola skúmaná pomocou SEM. Optimalizovali sa parametre elektrodepozície: prúdová hustota, rýchlosť miešania elektrolytu a anóda.

Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství (106)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Jan Šerák, Ph.D.

SEZNAM SEKČÍ

1. [Kovové materiály I.](#)
2. [Kovové materiály II.](#)
3. [Kovové materiály III.](#)
4. [Kovové materiály - restaurování](#)

Kovové materiály I.

MÍSTO: ONLINE

KOMISE

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

Ing. Petr Dvořák, Ph.D

Ing. Jiří Kubásek, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Bc. Diana Benediktová](#) (M2, doc. Ing. Pavel Novák, Ph.D.)

Vlastnosti slitin hliníku s prvky z hlubokomořských konkrecí

09:06 [Petr Hrbáček](#) (M2, Ing. Tomáš Prošek, Ph.D.)

Vliv stárnutí organických povlaků na propustnost vody

09:11 [Bc. Evdokim Kolesnichenko](#) (M1, doc. Ing. Pavel Novák, Ph.D.)

Tepelné zpracování hliníkové slitiny získané zpracováním hlubokomořských konkrecí

09:16 [Bc. Adéla Lukášová](#) (M2, doc. Ing. Jaroslav Fojt, Ph.D.)

Oxidy molybdenu pro detekci změn pH

09:21 [Bc. Michal Mišurák](#) (M2, prof. Dr. Ing. Dalibor Vojtěch)

Vývoj nové metody 3D tisku galvanickým procesem

09:26 [Bc. František Růžička](#) (M1, Ing. Filip Průša, Ph.D.)

Vliv podmínek přípravy na vlastnosti nového druhu slitin s vysokou entropií

09:31 [Bc. Hana Thürllová](#) (M2, Ing. Filip Průša, Ph.D.)

In-situ příprava karbidů ve slitině CoCrFeNiMn s vysokou entropií

Vlastnosti slitin hliníku s prvky z hlubokomořských konkrecí

Bc. Diana Benediktová (M2)

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

Byly zkoumány slitiny hliníku s prvky z hlubokomořských konkrecí. Nejprve byla provedena aluminotermická redukce hlubokomořských konkrecí pro přípravu manganové slitiny. Poté byly práškovou metalurgií (mechanickým legováním a slinováním v plazmatu) připraveny slitiny hliníku s 2 hm. %, 6 hm. %, 10 hm. % a 20 hm. % konkrecí. Pro homogenizaci struktury byly kompaktní vzorky podrobeny tepelnému zpracování po dobu 1 h, 3 h a 5 h při 600 °C. Dostatečná homogenizace struktury byla pozorována na optickém mikroskopu po pěti hodinách u všech slitin kromě slitiny s 20 hm. % konkrecí. Zároveň u všech vzorků byla po každém žíhání měřena tvrdost se zatížením HV 5 a byla tak získána závislost tvrdosti na čase žíhání. Dále byly posuzovány tribologické vlastnosti a bylo zjištěno, že se nejedná o otěruvzdorné materiály, neboť byly naměřeny vyšší hodnoty míry opotřebení. S rostoucím množstvím konkrecí stoupala tvrdost i otěruvzdornost materiálu.

Vliv stárnutí organických povlaků na propustnost vody

Petr Hrbáček (M2)

Školitel: Ing. Tomáš Prošek, Ph.D.

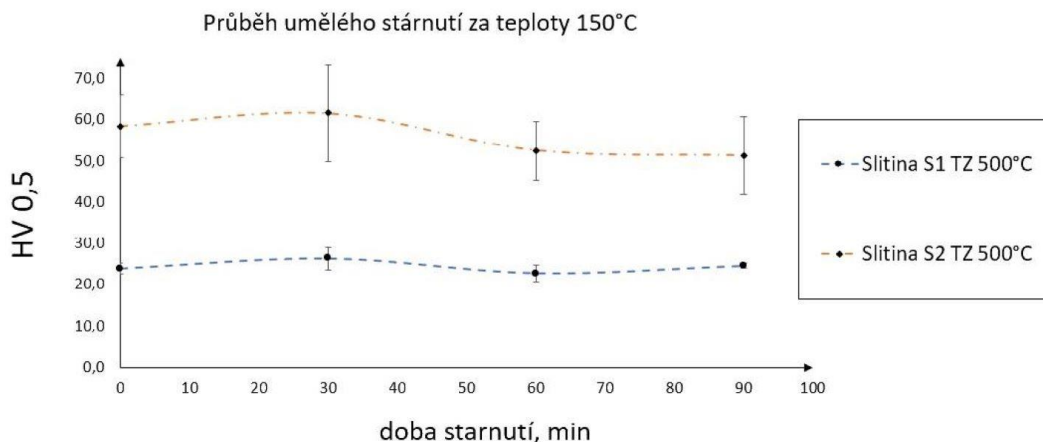
Aplikace organického povlaku je velmi častým způsobem protikorozní ochrany kovových materiálů v prostředí atmosféry. Povlaky tvoří bariéru mezi kovem a korozivním prostředím, zabraňují vzniku vrstvy elektrolytu na povrchu kovu a eliminují přístup vody, kyslíku a agresivních iontů ke kovu. V atmosféře dochází časem ke stárnutí povlaku, tj. zhoršení ochranných vlastností vlivem působení zejména UV záření, vlhkosti, proměnlivé teploty prostředí a chemických škodlivin např. chloridů. V této práci se zabývám studiem degradace vzorků organických povlaků vlivem faktorů, které poškozují povlak při expozici v atmosféře. Vystavení vzorku atmosférickým podmínkám bylo simulováno zrychlenými zkouškami stárnutí v testovacích komorách, které trvaly přesně jeden měsíc. Stav a ochranné vlastnosti jednotlivých vzorků po zrychleném stárnutí byly popsány a hodnoceny pomocí měření propustnosti povlaků miskovou metodou a pomocí elektrochemické impedanční spektroskopie (EIS).

Tepelné zpracování hliníkové slitiny získané zpracováním hlubokomořských konkrecí

Bc. Evdokim Kolesnichenko (M1)

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

Tato práce je zaměřená na hledání vhodných podmínek tepelného zpracování 2 typů slitin hliníku, které byly připraveny aluminotermickou redukcí polymetalické hlubokomořské konkrece, smísením produktu s hliníkem, odlitím a extruzí za tepla. První druh slitiny obsahoval podstatně nižší množství příměsi konkrece než druhý typ slitiny, což mělo významný vliv na fázové složení, mikrotvrdost a chování při tepelném zpracování daných slitin. Tepelné zpracování zahrnovalo 3 kroky, a to rozpouštěcí žhání, rychle ochlazení a umělé stárnutí. Podmínky tepelného zpracování byly voleny vždy podle předešlého pokusu a porovnávala se mikrotvrdost slitin před a po tepelném zpracování. Podle mikrotvrdosti právě i byly hodnoceny zvolené podmínky tepelného zpracování.



Prvek	Al	Mn	Na	Ca	Si	P	S	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Mo
Obsah prvků [hm.%) v S1	98,703	0,306	-	-	0,710	0,011	0,017	0,069	-	0,034	0,034	0,009	-
Obsah prvků [hm.%) v S2	92,255	4,226	0,063	0,042	1,353	0,026	0,028	1,24	0,05	0,37	0,284	0,006	0,016

Oxidy molybdenu pro detekci změn pH

Bc. Adéla Lukášová (M2)

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

Povrch implantátu je ideálním místem k uchycení bakterií, na které tělo pacienta následně reaguje imunitní odezvou a vznikem zánětu. I přes nasazenou léčbu může mikrobiální infekce vést až k nutnosti reoperace nebo selhání implantátu. Včasná detekce bakteriální aktivity by mohla přispět ke snížení finančních nákladů a zároveň i k nižší zdravotní zátěži pacienta. Biologická aktivita mikrobů a vzniklý zánět v okolí implantátu je doprovázen změnou pH v okolní tkáni, která by se dala využít k včasné detekci infekce s využitím senzorů přítomných přímo na povrchu implantátu. Jednou z možných variant senzorů mohou být směsné oxidy titanu a molybdenu. V rámci práce byly zkoumány odezvy čistého molybdenu a β -slitiny titanu s 30 hm. % molybdenu. Elektrochemická odezva byla měřena od hodnoty pH 7,6 do 6,5 a zpět ve fyziologickém roztoku (9 g/l NaCl) s přídavkem 5,9 g organického pufru TES. Byla sledována závislost samovolného korozního potenciálu, polarizačního odporu a Mott-Schottkyho křivek na pH. V případě čistého molybdenu se nepodařilo dosáhnout stability povrchu. Naopak stabilní povrch β -slitiny titanu s molybdenem se na základě elektrochemické odezvy jeví jako perspektivní pro další výzkum.

Vývoj nové metody 3D tisku galvanickým procesem

Bc. Michal Mišurák (M2)

Školitel: prof. Dr. Ing. Dalibor Vojtěch

Elektrochemický 3D tisk je relativně nová forma aditivní výroby, která vytváří kovové struktury elektrochemickou redukcí kovových iontů z roztoku na vodivý substrát. Výhodou této technologie je schopnost tisknout struktury z různých materiálů bez tepelných pnutí, bez použití ochranné atmosféry a laserové optiky. V této práci bude zkoumán vliv parametrů 3D tisku na rychlost depozice a morfologii vzniklých struktur.

Vliv podmínek přípravy na vlastnosti nového druhu slitin s vysokou entropií

Bc. František Růžička (M1)

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 nebo odolnost proti zvýšeným teplotám. Tyto vlastnosti lze dále upravovat tvorbou kompozitů. Metodou mechanického legování byly připraveny práškové slitiny CoCrFeNiMn a CoCrFeNiAl₁₀, ze kterých byla připravena kompozitní slitina s rozdílnou dobou její homogenizace. Kompozitní směsi byly dále zkompaktizovány metodou slinování v plazmatu. Mikrostruktura a vlastnosti vzniklých kompaktních vzorků byly studovány s cílem porovnat vliv podmínek vzájemné homogenizace výchozích slitin při tvorbě kompozitního materiálu.

In-situ příprava karbidů ve slitině CoCrFeNiMn s vysokou entropií

Bc. Hana Thürllová (M2)

Školitel: Ing. Filip Průša, Ph.D.

Slitiny s vysokou entropií se vyznačují specifickou strukturou, tvořenou víceprvkovými tuhými roztoky, díky které mají tyto slitiny velmi dobré mechanické vlastnosti. Slitina CoCrFeNiMn patří mezi intenzivně studované materiály, u kterých je obecně možné dosahovat, v závislosti na zvolené metodě přípravy, poměrně širokého rozsahu mechanických vlastností při zachování dostatečné plasticity. Dalšího zvýšení mechanických vlastností je možné dosáhnout například vyztužením tvrdými částicemi, jako jsou karbidy. Metodami práškové metalurgie byla připravena slitina CoCrFeNiMn s vysokou entropií, ve které byly následně in-situ připraveny karbidy ze tří různých prekurzorů – mechanicky obrobeného grafitu, globulárního grafenu a destičkového grafenu. U připravených slitin bylo popsáno fázové složení a byla pozorována jejich mikrostruktura. Dále bylo provedeno srovnání jejich mechanických a tribologických vlastností. Na základě získaných dat byla určena forma uhlíku, která poskytuje nejlepší vyztužující efekt.

Kovové materiály II.

MÍSTO: ONLINE

KOMISE

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

Ing. Hong Vu, Ph.D.

Ing. Filip Průša, Ph.D.

PROGRAM

09:00 zahájení

10:00 [Bc. Anna Boukalová](#) (M1, Ing. Jiří Kubásek, Ph.D.)

Vlastnosti slitin zinku připravených postupy klasické a práškové metalurgie

10:06 [Bc. Tomáš Kročil](#) (M1, doc. Ing. Jan Stoulil, Ph.D.)

Polovodivé chování korozních produktů slitin Zn-Mg

10:11 [Bc. Matouš Orlíček](#) (M2, doc. Ing. Alena Michalcová, Ph.D.)

Mikrostruktura a vlastnosti rychle ztuhlé slitiny vyrobené z redukovaných hlubokomořských konkrecí

10:16 [Bc. Radovan Papež](#) (M2, doc. Ing. Alena Michalcová, Ph.D.)

Analýza mikrostruktury maraging ocelí pomocí TEM

10:21 [Bc. Eva Stránělová](#) (M1, doc. Ing. Alena Michalcová, Ph.D.)

Příprava slitin CoCrMo s různým obsahem C a jejich tribologické vlastnosti

10:26 [Anna Teichmanová](#) (M2, doc. Ing. Alena Michalcová, Ph.D.)

Inovativní metoda přípravy intermetalických povlaků na titan

10:31 [Bc. Jakub Vlášek](#) (M2, doc. Ing. Pavel Novák, Ph.D.)

Hliníkové slitiny legované hlubokomořskými konkrecemi připravené litím a metodami rychlého tuhnutí.

Vlastnosti slitin zinku připravených postupy klasické a práškové metalurgie

Bc. Anna Boukalová (M1)

Školitel: Ing. Jiří Kubásek, Ph.D.

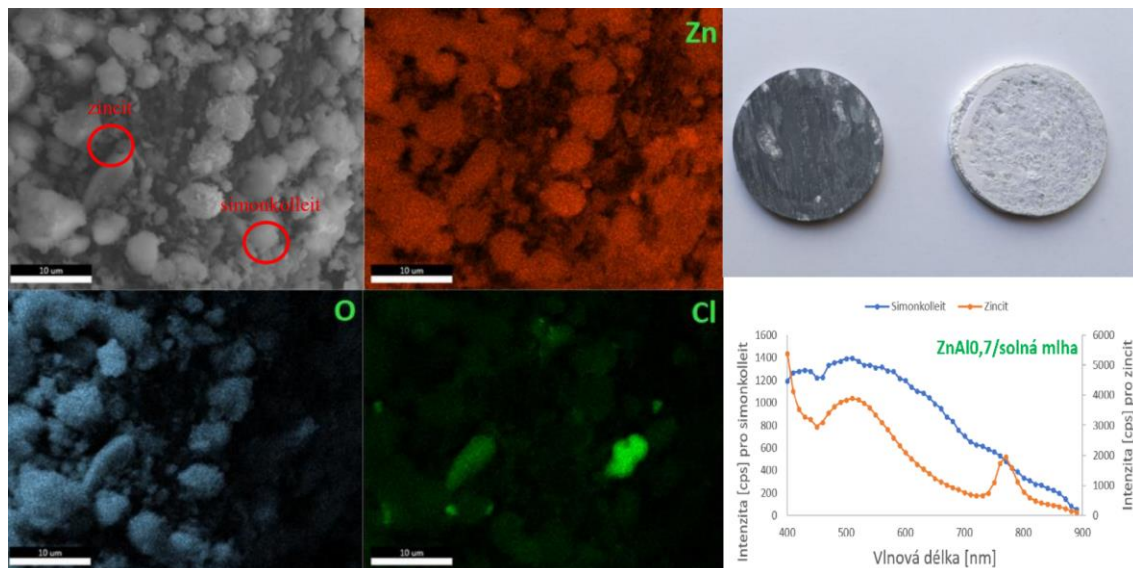
Zinek je v současné době pro svou biokompatibilitu a vhodnou míru korozní rychlosti uvažován pro výrobu biodegradovatelných materiálů. Jeho mechanické vlastnosti však pro aplikace v lidském těle nejsou dostačující. Tyto nedostatky lze upravit jeho vhodným legováním a/nebo použitím různých technologií zpracování. V této práci bylo připraveno 5 vzorků slitiny Zn-0,8Mg-0,2Sr (hm. %) práškovou metalurgií. Byla pozorována jejich mikrostruktura a mechanické vlastnosti v závislosti na různých podmínkách jejich přípravy (teplota, působící síla a čas). Mikrostruktura zkoumaných vzorků i vstupního prášku byla velmi jemnozrnná. Po zpracování výchozího prášku sintrací v plazmatu lze pozorovat přeměnu fáze MgZn_2 ve stabilní fázi $\text{Mg}_2\text{Zn}_{11}$. Různé podmínky sintrace v plazmatu jako tlak nebo teplota procesu mírně ovlivňují mechanické vlastnosti připravených materiálů. Vzorek 300C-10min-25kN vykazoval ze všech studovaných materiálů nejlepší mechanické vlastnosti.

Polovodivé chování korozních produktů slitin Zn-Mg

Bc. Tomáš Kročil (M1)

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

Odolnost zinkových povlaků vůči korozi lze zlepšit využitím slitin zinku. Na tomto poli se nejlépe osvědčilo legování Al a Mg. V porovnání se zinkovým povlakem dochází na zmíněných slitinách ke vzniku kompaktnějších korozních produktů s menší rozpustností, která vede k lepší korozní odolnosti. Složení těchto korozních produktů silně závisí na okolním prostředí a době expozice. Tato bakalářská práce pojednává o přípravě zinkových povlaků a popisuje korozní děje, které na nich probíhají. Praktická část se věnuje přípravě korozních produktů slitin Zn-Al-Mg. Pro tento účel byly zvoleny pevné vzorky slitin ZnMg6 a ZnAl0,7. Největší pozornost byla kladena na rozbor složení a elektrochemických vlastností vzniklých korozních produktů. K tomuto účelu byla použita Mott-Schottkyho metoda, metoda XRD, SEM-EDS a katodoluminiscence.



Mikrostruktura a vlastnosti rychle ztuhlé slitiny vyrobené z redukovaných hlubokomořských konkrecí

Bc. Matouš Orlíček (M2)

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

Tato práce popisuje vlastnosti slitiny připravené aluminotermickou redukcí hlubokomořských konkrecí, která byla následně zpracovaná rychlým tuhnutím metodou melt spinning. Pro práci byla využita slitina redukovaná s 20 % hm. přebytkem Al vůči stechiometrii. Při zpracování materiálu metodou melt spinning došlo ke změně chemického složení materiálu, a to konkrétně ke snížení obsahu Al a S, které lze vysvětlit částečnou oxidací během tavení v trysce při melt spinningu. V rychle ztuhlé slitině lze tedy zároveň pozorovat menší nárůst obsahu Cu a Fe. Pomocí rentgenové difrakce bylo změřeno fázové složení redukované slitiny a pásků vyrobených metodou melt spinning. Mikrostruktura materiálů byla pozorována pomocí světelné mikroskopie i pomocí skenovací a transmisní elektronové mikroskopie. Stabilita materiálu za zvýšených teplot byla studována pomocí termické analýzy a dále izotermickým žíháním v inertní atmosféře, aby nedocházelo k oxidaci vzorku.

Analýza mikrostruktury maraging ocelí pomocí TEM

Bc. Radovan Papež (M2)

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

Maraging ocele jsou typem vysokopevnostních ocelí s nízkým obsahem uhlíku, u kterých nedochází ke zpevnění pomocí karbidů jako u běžných ocelí, nýbrž jsou precipitačně zpevněny pomocí intermetalických sloučenin legujících prvků, které se v oceli nacházejí ve vyšším obsahu (Ni, Co, Mo). Tyto ocele jsou žádané pro jejich výborné mechanické vlastnosti jako vysoká tvrdost, dobrá svařitelnost, tažnost a nacházejí uplatnění např. v leteckém průmyslu. V této práci byly použity oceli připravené pomocí 3D tisku, metodou SPS a ocel, která byla přetavena a znovu tepelně zpracována, u kterých byl zkoumán vliv tepelného zpracování dvou rozdílných režimů na mikrostrukturu. Následně pomocí transmisního elektronového mikroskopu (TEM) byla zkoumána velikost precipitátů. Vyhodnocené velikosti precipitátů byly porovnány s naměřenými hodnotami mechanických vlastností.

Příprava slitin CoCrMo s různým obsahem C a jejich tribologické vlastnosti

Bc. Eva Stránělová (M1)

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

Medicína spolu s materiálovým inženýrstvím jsou vědní obory, ve kterých nestále probíhá intenzivní vývoj. Práce je zaměřená na porovnání mechanických vlastností slitiny CoCrMo s různým obsahem uhlíku využívané okrajově pro biomateriálovou instrumentaci, především ale v kloubních náhradách. Jedna z důležitých vlastností endoprotézy je její otěruvzdornost. Jejím zlepšením může dojít k prodloužení životnosti implantátu. Tribologické vlastnosti byly vylepšovány ve slitině připravené práškovou metalurgií. Slitina byla připravena mechanickým legováním z čistých kovů a následně slinuta v plazmatu. Tento proces umožňuje dosáhnout vysoké chemické čistoty slitiny. V dnešní době se běžně do slitiny CoCrMo přidává 0,25 hm. % uhlíku. Cílem práce bylo zjistit, zda jiný obsah uhlíku ve slitině vykazuje lepší tribologické vlastnosti. Byly připraveny tři materiály s různým obsahem uhlíku. Naměřené hodnoty mikrotvrdosti pro jednotlivé materiály byly velmi blízké, z čehož lze usuzovat podobnost i ostatních mechanických vlastností. Potvrdilo se také, že nekonvenčním výrobním postupem lze dosáhnout vysoké tvrdosti materiálu. Tribologické testy ukázaly, že aktuálně používané množství uhlíku ve slitině je nejlepší možné, neboť slitiny s vyšším i nižším obsahem uhlíku vykazují větší povrchové opotřebení.

Inovativní metoda přípravy intermetalických povlaků na titan

Anna Teichmanová (M2)

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

Titan je velice využívaným materiálem pro jeho příznivý poměr mezi pevností, hustotou a odolností vůči korozi v důsledku tvorby pasivní vrstvy ve formě oxidů. Za zvýšených teplot ovšem vznikají méně stabilní oxidy a je potřeba titan chránit jiným způsobem. Tato práce se zabývá přípravou a charakterizací intermetalických povlaků na bázi Ti-Al, které vynikají právě korozní odolností za zvýšených teplot a svými mechanickými vlastnostmi v kombinaci s nízkou hustotou. K přípravě těchto intermetalik bylo využito mechanické legování, následné nanesení prášku na substrát a slinování v plazmatu. Vzorky byly poté charakterizovány metalografickými metodami v příčném řezu. Tato metoda umožňuje připravit inovativní povlaky, které nelze připravit běžnými metodami povlakování – povlak je velmi dobře spojen s podkladovým titanem, je jemnozrnný a bez pórů.

Hliníkové slitiny legované hlubokomořskými konkrecemi připravené litím a metodami rychlého tuhnutí.

Bc. Jakub Vlášek (M2)

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

Hlubokomořské konkrece jsou polymetalické rudy s vysokým obsahem manganu, křemíku, železa, mědi a niklu. Práce se zabývá slitinami hliníku s aluminotermicky zredukovanými konkrecemi v různých poměrech. Slitiny byly atmosfericky odlity a následně byla analyzována mikrostruktura a mikrotvrdost jednotlivých fází. Následuje zpracování slitin metodou melt spinning.

Kovové materiály III.

MÍSTO: ONLINE

KOMISE

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

Ing. Jaroslav Bystrianský, CSc.

Ing. Eva Kristianová

PROGRAM

09:00 zahájení

09:00 [Bc. Tomáš Basl](#) (M1, doc. Ing. Jan Stoulil, Ph.D.)

Vliv bakteriálních extremofilů na bodovou korozi korozivzdorné oceli

09:06 [Bc. Petra Havlíková](#) (M2, Ing. Jiří Kubásek, Ph.D.)

Slitiny zinku legované lithiem a manganem zamýšlené pro aplikace v medicíně.

09:11 [Bc. Jan Pokorný](#) (M1, Ing. Jiří Kubásek, Ph.D.)

Příprava a charakterizace biodegradovatelných slitin zinku s hořčíkem a stříbrem

09:16 [Bc. Jan Riedl](#) (M1, Ing. Filip Průša, Ph.D.)

Vliv tepelného zpracování na vlastnosti slitin s vysokou entropií

09:21 [Bc. Michael Sovadina](#) (M2, Ing. Filip Průša, Ph.D.)

Zvýšení žáruvzdornosti v žárupevných slitinách s vysokou entropií

09:26 [Bc. Cyril Šimon](#) (M2, Ing. Jan Šerák, Ph.D.)

Vlastnosti slitin MgZrCa

Vliv bakteriálních extremofilů na bodovou korozi korozivzdorné oceli

Bc. Tomáš Basl (M1)

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

Výroba elektrické energie z jaderných zdrojů s sebou nese i nutnost ukládání vyhořelého jaderného paliva. Nejbezpečnějším a nejekonomičtějším způsobem je jeho uskladnění v hlubinném úložišti radioaktivního odpadu. Odpad bude uložen v kovových kontejnerech obklopených bentonitem a okolní horninou. V této práci je zkoumána odolnost potenciálního materiálu kontejneru (korozivzdorná ocel AISI 316L, EN 1.4404) v předpokládaném prostředí hlubinného úložiště vůči bodové korozi. Nejvýznamnějšími iniciátory koroze jsou v tomto prostředí mikroorganismy, které produkují agresivní látky zejména thiosířany. Tato práce zkoumá odolnost materiálu proti bodové korozi v prostředí simulujícím vliv mikroorganismů metodou potenciodynamických křivek (PTDA), zjištěním korozní rychlosti metodou hmotnostního úbytku a vizuální kontrolou povrchu pomocí stereomikroskopu. Měření PTDA potvrdilo, že ocel AISI 316L je poměrně dobře odolná proti bodové korozi v předpokládaných podmínkách hlubinného úložiště. Zkouška korozní rychlosti metodou hmotnostního úbytku prokázala nízké korozní rychlosti. Vizuální zkouška odhalila iniciaci bodové koroze pouze na nejvyšší testované teplotě 50°C.

Slitiny zinku legované lithiem a manganem zamýšlené pro aplikace v medicíně.

Bc. Petra Havlíková (M2)

Školitel: Ing. Jiří Kubásek, Ph.D.

Slitiny na bázi zinku se dostávají v posledních letech do popředí díky přijatelné korozní rychlosti v lidském těle. Zinečnaté ionty mají antibakteriální a osteogenní účinky, kterých se při biodegradaci využívá. Zinek má nízkou pevnost, a proto se uvažují především jeho slitiny. Slitiny obsahující jako hlavní legující prvek Li vykazují vysokou pevnost blížící se pevnosti korozivzdorných ocelí. V rámci této práce jsou studovány slitiny Zn-Li-Mn, přičemž Li je přidáváno s cílem zvýšit mez pevnosti a mez kluzu materiálu a Mn z důvodu zvýšení tažnosti. Připravované slitiny se jeví jako velmi perspektivní pro aplikace v oblasti kovových bioabsorbovatelných materiálů.

Příprava a charakterizace biodegradovatelných slitin zinku s hořčíkem a stříbrem

Bc. Jan Pokorný (M1)

Školitel: Ing. Jiří Kubásek, Ph.D.

Slitiny zinku jsou v poslední době uvažovány jako biologicky odbouratelné biomateriály z důvodu přijatelné biokompatibility a vhodného chování při degradaci. Předpokládané použití těchto materiálů je pro stenty nebo fixační zařízení. Takové materiály jsou postupně odbourávány a nahrazeny novou tkání. Cílem této práce bylo zkoumání slitin Zn-Ag a Zn-Mg-Ag připravených technikami práškové metalurgie zahrnující mechanické legování a sintraci v plazmatu (SPS). Hořčík byl vybrán jako legující prvek, protože zlepšuje mechanické vlastnosti a biokompatibilitu a stříbro má antibakteriální účinky. Byla zkoumána mikrostruktura a mechanické vlastnosti připravených materiálů. Výsledky ukázaly významný vliv podmínek mechanického legování na fázové složení připravených prášků. Následně byly úspěšně připraveny pomocí SPS materiály s nízkou pórovitostí a homogenní mikrostrukturou.

Vliv tepelného zpracování na vlastnosti slitin s vysokou entropií

Bc. Jan Riedl (M1)

Školitel: Ing. Filip Průša, Ph.D.

Slitiny s vysokou entropií jsou novým typem slitin, jejichž výzkum započal v roce 2004. Spojením různých podmínek vznikla skupina slitin, které lze definovat jako vysoko-entropické. Mezi tyto podmínky např. patří složení slitiny z pěti a více prvků s obsahy v rozmezí 5 – 35 at. % a hodnota směšovací entropie vyšší jak 1,5 R. U tohoto typu slitin je z důvodu vysoké směšovací entropie upřednostněn vznik převážně tuhých roztoků narozdíl od intermetalických fází. Unikátní mechanické vlastnosti těchto slitin jsou způsobeny např. distorzí krystalové mřížky a koktejlovým efektem, kdy výsledné vlastnosti slitin nejsou pouhým poměrovým součtem vlastností jednotlivých prvků. Mezi tyto vlastnosti patří např. vysoká tvrdost nebo pevnost při zachování dobré plasticity. Vlastnosti těchto slitin je možné modifikovat pomocí tepelného zpracování, kdy jsme schopni docílit precipitace nových fází. Cílem této práce bylo připravit slitiny CoCrFeNiAl_x ($x = 10 - 30$ at.%) pomocí mechanického legování a slinování v plazmatu. V závislosti na měnícím se množství hliníku ve slitině byla pozorována změna mikrostruktury, chemického a fázového složení. Poté byla provedena optimalizace tepelného zpracování. Cílem tepelného zpracování bylo zlepšit mechanické vlastnosti vůči vlastnostem před tepelným zpracováním.

Zvýšení žáruvzdornosti v žárupevných slitinách s vysokou entropií

Bc. Michael Sovadina (M2)

Školitel: Ing. Filip Průša, Ph.D.

Slitiny s vysokou entropií jsou převážně ekvatomární sloučeniny, které se většinou skládají z 5 a více prvků, tvořící tuhé roztoky. Slitiny s vysokou entropií dosahují obvykle velmi vysokých pevností, které si v některých případech zachovávají i za zvýšených teplot, jedná se tedy o žárupevné materiály. Z dostupné literatury je zřejmé, že nejvyšší pevnosti při laboratorních teplotách vykazují slitiny připravené práškovou metalurgií. Slitiny MoNbTaVW ovšem při vysokých teplotách zcela selhávají z důvodu vzniku oxidických produktů nechránící materiál. Ve snaze o zvýšení žáruvzdornosti a plasticity byla provedena ve slitině MoNbTaVW substituce wolframu hliníkem za vzniku slitin MoNbTaVAl, MoNbTaVAl10W10 a MoNbTaVW. Substituce wolframu pomocí hliníku byla zvolena z důvodu snížení koncentrace valenční elektronů ($VEC < 4,5$), která u těchto slitin může vést k podstatnému nárůstu plasticity, snížení hustoty materiálu a v neposlední řadě ke zvýšení odolnosti proti oxidaci vlivem tvorby ochranné vrstvy oxidů Al. Byl zjištěn optimální čas mechanického legování připravovaných slitin. Dále byla vyhodnocena jejich mikrostruktura a jejich odolnost proti oxidaci v rámci vystavení teplotě 800 °C.

Vlastnosti slitin MgZrCa

Bc. Cyril Šimon (M2)

Školitel: Ing. Jan Šerák, Ph.D.

Práce se zabývá hořčíkovými slitinami MgZrCa. Celkem bylo studováno 5 slitin tohoto typu s různými obsahy legujících prvků. Dále byl připraven vzorek Mg, který v této práci slouží jako srovnávací. Na všech zmíněných vzorcích byla studována mikrostruktura a chemické složení. Z mechanických zkoušek byla pro tuto práci vybrána zkouška jednoosým tlakem a zkouška tvrdosti.

Kovové materiály - restaurování

MÍSTO: ONLINE

KOMISE

doc. Ing. Pavel Novák, Ph.D. (předseda)

Ing. Šárka Msallamová, Ph.D.

Světlana Spiwoková, Ph.Dr.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

10:00 [Bc. David Dušek](#) (M1, Ing. Tereza Boháčková, Ph.D.)

Restaurování železné pokladnice

10:06 [Olga Hrubá](#) (B4, None)

Restaurování jataganu

10:11 [Jan Jeníček](#) (B4, None)

Restaurování procesní lucerny

10:16 [Štěpán Metelka](#) (B3, Ing. Tereza Boháčková, Ph.D.)

Dveřní zámek

10:21 [Jáchym Paleček](#) (B3, Ing. Šárka Msallamová, Ph.D.)

Restaurování biskupské zinkové rakve

10:26 [Eliška Trakalová](#) (B2, Ing. Tereza Boháčková, Ph.D.)

Restaurování relikviáře

Restaurování železné pokladnice

Bc. David Dušek (M1)

Školitel: Ing. Tereza Boháčková, Ph.D.

Tématem práce bylo restaurování a konzervace železné truhlice z první poloviny 17. století z majetku Uměleckoprůmyslového muzea v Praze. Uvedenému období odpovídá tvarem i mechanismem, jak vyplynulo z rešerše o vývoji truhlového nábytku a zámkových mechanismů od starověku do baroka. Je vyrobena z desek a pásů železného plechu. Ke spodní straně víka je přišroubována zámková deska s německým typem zámku, který však nebyl plně funkční. Během restaurátorského zásahu byl mechanismus zprovozněn a k zámku byl vyroben chybějící klíč. Z běžných bezpečnostních truhel té doby se restaurovaná truhla vymyká poměrně luxusní zlacenou a malovanou výzdobou, která se dochovala jen částečně a byla přemalována. Při restaurátorském zásahu byl nepůvodní nátěr odstraněn, truhla byla očištěna od prachu, mastnoty a nesoudržných korozních produktů. Vnitřek truhly byl ošetřen tanátem, zámkový mechanismus byl ošetřen mikrokrytalickým voskem a netuhnoucí vazelínou, vnější pohledové strany byly konzervovány směsí včelího a karnaubského vosku. Doporučený režim byl stanoven pro uchování předmětu v depozitáři, i jeho vystavování v expozici muzea.



Restaurování jataganu

Olga Hrubá (B4)

Školitel: None

Restaurování jataganu: Práce se zabývá částečným restaurováním a konzervací jataganu z 19. století a jeho dochované pochvy. Dotýká se historie vývoje jataganů v Osmanské říši. V práci je popsán postup konzervace jednotlivých materiálů, ze kterých jsou části jataganu a jeho pochvy vyrobeny. Všechny části předmětu a jejich konkrétní poškození jsou zde podrobně rozebrány. Druhá část práce se zabývá podrobně postupem konzervování předmětu, a jak se postupovalo mechanickou cestou při čištění jednotlivých částí. Pokračuje vysvětlením opravy mechanického poškození a následného zakonzervování všech částí předmětu. Na závěr doporučuje podmínky uložení předmětu, a jak by mělo být s předmětem v expozici či v depozitáři zacházeno.

Restaurování procesní lucerny

Jan Jeníček (B4)

Školitel: None

Tato procesní (pohřební) lucerna je jednou z páru a byla vyrobena mezi 2. polovinou 19. století a před 20. léty 20. století. Má tvar kónického šestibokého hranolu, sestávající z částí, jež jsou vyrobeny z ocelového cínovaného plechu. Na lucerně jsou dále ozdoby a křížek lité ze zinkové slitiny; všechny kovové prvky jsou spojeny pájením naměkko a to cínovo-olověnou pájkou. Lucerna je pak kryta 3 modrými a 3 bezbarvými, hvězdami zdobenými skly. Při restaurování došlo k zajištění rozpadajících se ozdob a nahrazení jejich chybějících fragmentů asmitem (olověnou kompozicí). Dále byla obnovena funkčnost lucerny, a to tím, že byl zrekonstruován kouřovod a dvířka, také byla doplněna dvě rozbitá skla. Předmět byl na závěr zakonzervován použitím alkydového nátěru s bariérovým účinkem a ozdoby a křížek byly navíc natřeny práškovým bronzem, čímž byla obnovena estetická stránka lucerny.



Dveřní zámek

Štěpán Metelka (B3)

Školitel: Ing. Tereza Boháčková, Ph.D.

Předmětem této práce bylo restaurování a konzervování dveřního zámku, jenž je majetkem Městského muzea Lomnice nad Popelkou. Při průzkumu bylo zjištěno, že se jedná o zámek německého typu, slohově inspirovaný zámky barokními. Zámek byl přijat s druhotným nátěrem a korozním napadením podložního plechu a mechanických částí. Záměrem bylo zámek uvést do podoby umožňující expoziční účely a zároveň dbát na zachování jeho umělecko – historické hodnoty. Při restaurátorském zásahu byl odstraněn druhotný nátěr a některé korozní produkty, s ohledem na zachování původní povrchové úpravy brynýrováním. Následovala lokální pasivace zbylých korozních produktů pomocí lihového roztoku taninu a pasivace celého předmětu pomocí lihového roztoku dekananu sodného. Na závěr byl předmět zakonzervován pomocí mikrokrystalického vosku.

Restaurování biskupské zinkové rakve

Jáchym Paleček (B3)

Školitel: Ing. Šárka Msallamová, Ph.D.

Práce pojednává o restaurování biskupské rakve vyrobené z litých zinko-olověných plechů s členitým figurálním i ornamentálním dekorem. Předmět byl vyroben pro biskupa Petra Františka Krejčího červenci roku 1870. Kromě drobných mechanických poškození došlo ke koroznímu poškození vlivem dekompozice organismu a vlivem atmosféry. Předmět byl opětovně zaplavován vodou a tím došlo k vyplavování polutantů vzniklých dekompozicí. Materiálový průzkum se zabýval analýzami kor. prod. a metalografií. Metalografický průzkum odhalil mezikrystalovou korozi cíno-olověné pájky a odlévaného zinko-olověného dekoru. Cílem restaurátorského zásahu bylo uvedení předmětu do stabilizovaného stavu a minimalizace vlivů podněcující degradaci materiálu s ohledem na přání vlastníka zachovat předmět co nejvíce původní. Zásah započal očištěním předmětu od prachových částic a zeminy tlakovou vodou, vyvíječem páry a silonovými kartáči. Následovalo mechanické odstraňování korozních produktů. Dále došlo ke slepení uvolněného pájeného spoje a laminování trhlin v dekoru pomocí dvousložkového epoxidu. Po tanátování ocelových částí byl povrch sjednocen ocelovou vatou. Konzervace byla v pohledových částech provedena voskem Revax30 s damarou v terpentýnu (3:2), v nepohledových částech a v dutinách injektáží vosku Revax30.



Restaurování relikviáře

Eliška Trakalová (B2)

Školitel: Ing. Tereza Boháčková, Ph.D.

Práce popisuje restaurátorský zásah na novobarokním relikviáři ve tvaru sluncové monstrance, což je ozdobná prosklená schránka na noze, která slouží k ukazování a k uchovávání svatých ostatků. Na noze je ze spodní strany uzavíratelných dvířek rytý nápis, uvnitř nohy listina a za zasklenou schránkou se nachází pečeť pražského arcibiskupa. Většina částí předmětu je vyrobena z mědi, povrch je stříbřený a zlacený, několik částí je mosazných a železných. Další zastoupené materiály jsou sklo a textil. V původním stavu předmět vykazoval znečištění, korozní napadení a mechanické poškození. Při restaurátorském zásahu došlo k odstranění většiny korozních produktů při zachování povrchových úprav stříbření a zlacení, vyrovnaní deformací v maximální možné míře a případně doplnění chybějících částí. U listiny, relikvie a pečete nedošlo k žádnému zásahu, ponechaly se v původním stavu, nebyli výrazně poškozeny ani znehodnoceny.



Ústav skla a keramiky (107)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Tereza Unger Uhlířová, Ph.D.

SEZNAM SEKČÍ

1. [ANM I](#)

2. [ANM II](#)

ANM I

MÍSTO: CHODBA ÚSK - PŘÍZEMÍ

KOMISE

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

doc. Dr. Ing. Martin Havlík Míka

Ing. Diana Horkavcová, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

[Bc. Richard Bursa](#) (M1, doc. Dr. Ing. Martin Havlík Míka)

Možnosti využití luminiscenčních skel v medicíně

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

Testování vnitřního povrchu obalových skel pro farmacii

[Bc. Lucie Kotrbová](#) (M2, Ing. Tereza Unger Uhlířová, Ph.D.)

Tepelná vodivost keramiky na bázi korundu a oxidu ceričitého

[Bc. Nikola Lehovcová](#) (M1, Ing. Diana Horkavcová, Ph.D.)

Testování adheze a bioaktivity titaničitých sol-gel povlaků

[Adéla Macečková](#) (B3, doc. Dr. Ing. Martin Havlík Míka)

Laserově aktivní materiály pro nanomedicínu

[Bc. Lukáš Mauermann](#) (M1, Ing. Martina Šídlová, Ph.D.)

Vliv přídavku různých typů minerálních příměsí na alkalicko-křemičitou reakci v betonu

[Bc. Tereza Přivrácká](#) (M1, doc. Dr. Ing. Dana Rohanová)

Proč je nutná revize ISO normy pro in vitro testy v SBF?

[Bc. Eliška Sedláčková](#) (M1, Ing. Diana Horkavcová, Ph.D.)

In vitro testování bioaktivních materiálů

Možnosti využití luminiscenčních skel v medicíně

Bc. Richard Bursa (M1)

Školitel: doc. Dr. Ing. Martin Havlík Míka

Skla vykazující luminiscenci jsou v dnešní době podrobně zkoumána a vyvíjena. V kombinaci s electro-spinningem pro přípravu nanovláken mohou mít velké uplatnění v medicíně nejen při fotodynamické terapii, například inkorporováním vláken s luminiscenčními částicemi do textilního materiálu pro léčbu rakoviny kůže, akné, ekzémů a dalších kožních onemocnění. Cílem této práce bylo připravit sklo dopované oxidy europia a germania, které se po rozemletí na submikronové částice použije s nosným polymerem pro electro-spinning za účelem vytvoření nanovláken se skelnými částicemi. Byly měřeny luminiscenční vlastnosti těchto nanovláken a jejich mikroskopická struktura.

Testování vnitřního povrchu obalových skel pro farmacii

Bc. Lilit Iritsyan (M2)

Školitel: prof. Ing. Aleš Helebrant, CSc.

Vnitřní povrchy skel pro farmacii musí vykazovat dostatečnou chemickou odolnost, aby nedocházelo k přechodu složek skla do náplně, a tím k jejímu znehodnocení (změna pH, chemické reakce). Chemická odolnost povrchů skel se proto testuje podle platné legislativy (ČSN ISO 4802-1, Evropský lékopis) zkouškou proti destilované vodě (121 °C, 1 h) a ve výluzích se stanovuje koncentrace alkálií, která nesmí překročit uvedené limitní hodnoty. Problematické nadlimitní výluhy alkálií vykazují často lékovky malých objemů s vysokým S/V. Proto byla v předložené práci sledována kinetika modelového loužení těchto lékovek do destilované vody za zvýšené teploty (80 °C) dlouhodobými testy (1-72 h). Porovnáním výsledků stanovení koncentrací složek skla ve výluzích (AAS) a měřením koncentračních profilů složek skla v povrchu (ESCA) před a po modelovém loužení, a dále po odleptání povrchové vrstvy směsí HF a HCl bylo zjištěno, že zejména koncentrace Na je na vnitřním povrchu neloužených lékovek snížena, v podpovrchových vrstvách je naopak zvýšená. Po modelovém loužení dochází k poklesu Na v povrchu přibližně do hloubky 70 nm, což svědčí o inkongruentním rozpouštění skla s rychlou difúzí Na⁺ zejména na počátku loužení.

Tepelná vodivost keramiky na bázi korundu a oxidu ceričitého

Bc. Lucie Kotrbová (M2)

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

Ceričitá keramika má využití v oblasti palivových článků či katalyzátorů. Tepelná vodivost a mechanické vlastnosti hrají důležitou roli při těchto aplikacích. Přídavek korundu k ceričité keramice zvyšuje tepelnou vodivost a elastické moduly. Obě tyto vlastnosti lze navíc řízeně snížit parciálním slinováním nebo zvýšit až na maximální hodnoty pevných fází metodou SPS (spark plasma sintering). Tato práce se zabývá tepelnou vodivostí a elastickými vlastnostmi keramiky na bázi korundu a oxidu ceričitého. V modelovací části je provedena simulace tepelné vodivosti a Youngova modulu na počítačem generovaných mikrostrukturách parciálně slinuté kompozitní keramiky $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-CeO}_2$ s 5, 25, 50, a 75 hm.% CeO_2 , včetně čistých koncových členů Al_2O_3 a CeO_2 s velikosti zrn 150 a 50 nm. Korelace numerických výsledků pro relativní vodivost a relativní Youngův modul jsou srovnány s jejich predikcí pomocí analytického vztahu. Keramické vzorky připravené uniaxiálním lisováním a konvenčním slinováním v rozmezí teplot 1000-1300°C a metodou SPS při teplotách 1000 a 1300 °C jsou charakterizovány objemovou hmotností a pórovitostí. Pro vybrané vzorky jsou simulační predikce tepelné vodivosti a Youngova modulu srovnány s hodnotami naměřenými metodou laser flash a ultrazvukovou metodou.

Testování adheze a bioaktivity titaničitých sol-gel povlaků

Bc. Nikola Lehovcová (M1)

Školitel: Ing. Diana Horkavcová, Ph.D.

Biomateriály jsou materiály určené k interakci s biologickými systémy, jejichž využití v současné době umožňuje náhradu či doplnění funkcí poškozených tkání. Veliký důraz je kladen na jejich vyhovující fyzikální i chemické vlastnosti a biokompatibilitu. Důležitými vlastnostmi, kterými musí biomateriál pro medicínské využití disponovat, jsou bioaktivita, která je podmíněna chemickou interakcí biomateriálu s živou tkání za současné precipitace hydroxyapatitu, a antibakteriální účinek. Optimalizace povrchu kovových biomateriálů lze docílit povrchovými modifikacemi, kdy je z hlediska životnosti a účinnosti povlaku důležitá jeho přilnavost k substrátu. V práci bylo metodou sol-gel připraveno 6 typů solů s rozdílnými koncentracemi AgNO_3 , bioaktivního skelného materiálu a jejich kombinací. Následovalo nanesení syntetizovaných směsných solů na mechanicky upravený titanový substrát technikou *dip-coating*, sušení a výpal vzorků. Povlaky byly charakterizovány optickou a elektronovou mikroskopií. Adheze povlaků k substrátu byla testována *tape* testem. Testování bioaktivity probíhalo *in vitro* za statických podmínek v simulované tělní tekutině po dobu 21 dní. Na závěr byl proveden 24 hodinový antibakteriální test povlaků vůči gramnegativní bakterii *Escherichia coli*.

Laserově aktivní materiály pro nanomedicínu

Adéla Macečková (B3)

Školitel: doc. Dr. Ing. Martin Havlík Míka

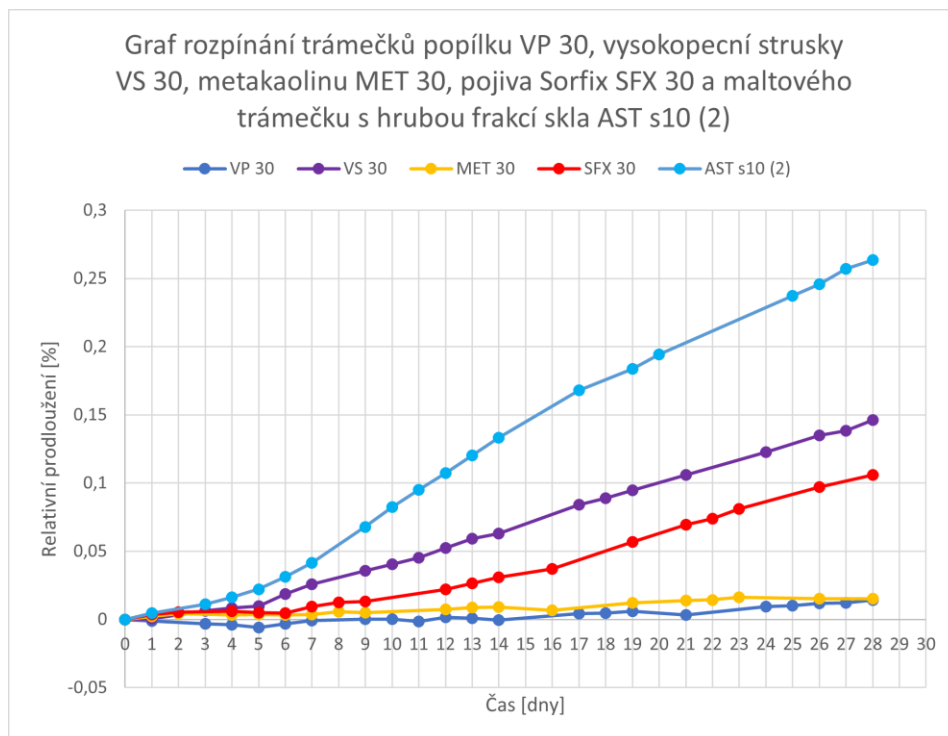
Bylo navrženo a utaveno 16 skel v soustavě $\text{Na}_2\text{O}-\text{CaO}-\text{P}_2\text{O}_5-\text{SiO}_2$, u nichž byl obsah CaO postupně nahrazován oxidy MgO nebo SrO. U skel bylo určeno jejich chemické složení metodou rtg. fluorescence a změřena jejich hydrolytická odolnost. Z těchto údajů byla vytvořena databáze skel zahrnující jejich složení a odolnost. Statistickým zpracováním za použití regresní analýzy byly vypočteny koeficienty vlivu těchto dvojmocných kationtů na odolnost. Na jejich základě je diskutován vliv dvojmocných oxidů na hydrolytickou odolnost připravených skel.

Vliv přidavku různých typů minerálních příměsí na alkalicko-křemičitou reakci v betonu

Bc. Lukáš Mauermann (M1)

Školitel: Ing. Martina Šídlová, Ph.D.

Práce se zabývá alkalicko-křemičitou reakcí (ASR) v betonech a maltovinách, která je jednou z možných příčin poruch betonových konstrukcí. Cílem bylo zkoumat vliv jednotlivých minerálních příměsí na ASR. Výsledky byly vyhodnoceny pomocí urychlené dilatační zkoušky ASTM 1260. Na počátku práce bylo nutné vyřešit otázku málo reaktivního kameniva, které neumožňovalo jednoznačně vyhodnotit, do jaké míry mají přidané příměsi vliv na ASR. Tento problém byl vyřešen přidáním skleněných střepů za část kameniva, čímž se podařilo reaktivitu zvýšit. Navíc byl studován vliv různého množství a různých frakcí skla na ASR. Hlavní experiment s minerálními příměsemi prokázal kladný efekt při eliminaci ASR u všech vyzkoušených příměsí. Největší efekt na eliminaci ASR měl vysokoteplotní popílek spolu s metakaolinem, dále pak pojivo Sorfis a nejméně účinná byla vysokopecní struska.



Proč je nutná revize ISO normy pro *in vitro* testy v SBF?

Bc. Tereza Přivrácká (M1)

Školitel: doc. Dr. Ing. Dana Rohanová

Standardizovaný roztok simulované tělní tekutiny (SBF) dle ISO normy 23317:2014 se využívá pro testování bioaktivity (indikované schopností tvorby apatitu (HAp)) skelných, sklokeramických a keramických materiálů. V předchozích studiích na sklokeramickém scaffoldu bylo prokázáno, že pufr TRIS aktivně vstupuje do interakce materiál - SBF. Cílem této práce bylo detailněji pochopit mechanismus tvorby HAp vrstvy na vzorcích bioskla (45S5). Během statického testu byly celistvé vzorky exponovány ve standardním SBF s pufr TRIS, a i v dalších roztocích bez pufru, po dobu jeden až 14 dní. Po expozici byly ve výluzích stanoveny koncentrace Na^+ , Ca^{2+} , $(\text{PO}_4)^{3-}$ a Si a měřeno pH. Dále byla sledována změna hmotnosti, provedena analýza XRD a nově vzniklá vrstva byla pozorována pomocí SEM/EDS. Výsledky potvrdily, že pufr TRIS ovlivňuje výsledky *in vitro* testů falešně pozitivně.

In vitro testování bioaktivních materiálů

Bc. Eliška Sedláčková (M1)

Školitel: Ing. Diana Horkavcová, Ph.D.

Biomateriály jsou látky přírodní nebo syntetické, které mají schopnost posilovat nebo nahrazovat funkce živé tkáně. Mezi nejpoužívanější bioaktivní materiály patří biosklo a syntetický hydroxyapatit. Důležitou vlastností implantátů je biokompatibilita – snášenlivost materiálu v živém organismu. Při implantaci bioaktivního materiálu dochází na jeho povrchu k precipitaci nové vrstvy tzv. kostního hydroxyapatitu. Tato vrstva je schopná vytvořit pevnou vazbu s přirozenou tkání. Při testování bioaktivity implantátů se používá standardizovaný *in vitro* test, při kterém je testovaný materiál v kontaktu s tzv. simulovanou tělní tekutinou obsahující pufr TRIS. Tato práce se zabývá sledováním 7-denní interakce bioaktivního skla se simulovanou tělní tekutinou SBF s a bez TRISu. Před a po statickém *in vitro* testu byla analyzována hmotnost a změna charakteru materiálů pomocí BET, OM, SEM/EDS, XRD a XRF. Byly odebírané výluhy roztoků pro stanovení koncentrace iontů Ca^{2+} a $(\text{PO}_4)^{3-}$ a bylo měřeno pH. Po expozici v pufrovaném roztoku SBF+T se na povrchu materiálu vytvořila nová krystalická vrstva kostního hydroxyapatitu. V případě materiálu po interakci s SBF bez pufru se na povrchu vytvořily postupně tři amorfnní vrstvy s obsahem Si, Ca a P elementů s různou tloušťkou.

ANM II

MÍSTO: CHODBA ÚSK - SUTERÉN

KOMISE

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

Ing. Martina Šídlová, Ph.D.

Ing. Jan Macháček, Ph.D.

PROGRAM

09:00 zahájení

[Bc. Olga Averchenko](#) (M2, Ing. Eva Gregorová, CSc.)

Keramika na bázi korundu a hydroxyapatitu

[Bc. Hana Burianová](#) (M2, Ing. Eva Gregorová, CSc.)

Mechanické vlastnosti zirkoničité keramiky s obsahem 3 mol. % a 8 mol. % Y_2O_3

[Bc. Tomáš Doležal](#) (M1, Ing. Martina Šídlová, Ph.D.)

Srovnání reaktivit různých typů minerálních příměsí

[Bc. Tatiana Gabošová](#) (M2, Ing. Tereza Unger Uhlířová, Ph.D.)

Reológia hydroxyapatitových suspenzí

[John Khawand](#) (B3, Ing. Richard Pokorný, Ph.D.)

Conversion kinetics of waste glass melting

[Bc. Jana Králíková](#) (M2, doc. Ing. Alexandra Kloužková, CSc.)

Vliv kalslitu na vlastnosti leucitového kompozitu

[Jan Kunc](#) (B3, Ing. Richard Pokorný, Ph.D.)

Effect of feed composition on the production of acetonitrile and other off-gases during vitrification of nuclear waste

[Bc. Dominik Navara](#) (M1, Ing. Jan Macháček, Ph.D.)

Příprava skafoldů z bioaktivního skla 45S5 pomocí stereolitografického 3D tisku

[Bc. Karolína Šůsová](#) (M2, Ing. Richard Pokorný, Ph.D.)

Vliv složení kmene na tavení při vitrifikaci jaderného odpadu

Keramika na bázi korundu a hydroxyapatitu

Bc. Olga Averchenko (M2)

Školitel: Ing. Eva Gregorová, CSc.

Korundová keramika je bioinertní, tvrdá, pevná a otěruvzdorná, zatímco hydroxyapatit, resp. fosforečnan vápenatý (TCP), je bioaktivní a je svým složením blízko kostnímu minerálu, který tvoří společně s kolagenem hlavní část pevné kostní tkáně. Kompozitní keramika na bázi korundu s přídavkem hydroxyapatitu kombinuje do jisté míry vlastnosti všech přítomných fází. Korund zlepšuje mechanické vlastnosti hydroxyapatitu, resp. TCP, zatímco poslední zmíněné napomáhají tvorbě pevné vazby implantátu s kostí. Předkládaná práce se zabývá přípravou kompozitu na bázi korundu (A) a hydroxyapatitu (HAP). Byly připraveny tři lisovací směsi v hmotnostních poměrech 90A10HAP, 80A20HAP a 70A30HAP. Jako lisovací přísada bylo použito 5 hm.% PEG. Vzorky ve tvaru tablet o průměru 35 mm byly zhotoveny na laboratorním uniaxiálním lisu tlakem 50 MPa a vypáleny na teploty 1100, 1200 a 1300 °C s rychlostí ohřevu 2 °C/min a dobou výdrže 2 h na maximální teplotě. Takto připravené vzorky byly charakterizovány pomocí rentgenové fázové analýzy, Archimédových kritérií hutnosti (objemová hmotnost, zdánlivá pórovitost) a lineárním smrštěním. V závěru práce bylo provedeno měření elastických vlastností připravených kompozitů (Youngova a smykového modulu) a byla určena hodnota jejich Poissonova čísla

Mechanické vlastnosti zirkoničité keramiky s obsahem 3 mol. % a 8 mol. % Y_2O_3

Bc. Hana Burianová (M2)

Školitel: Ing. Eva Gregorová, CSc.

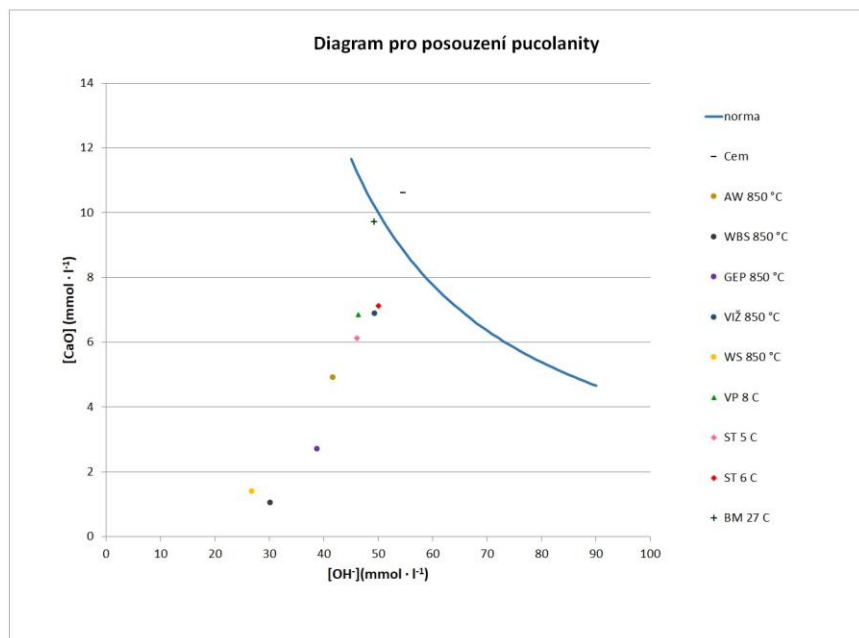
Cílem této práce bylo připravit, charakterizovat a vzájemně porovnat zirkoničitou keramiku stabilizovanou 8 a 3 mol.% Y_2O_3 . Pro přípravu vzorků byly použity komerční prášky TZ-8YSB a TZ-3YB-E od firmy Tosoh. Vzorky ve tvaru trámečků (pro prášek TZ-8YSB také tablet) byly připraveny na laboratorním hydraulickém lisu tlakem 50 MPa. Vzorky s obsahem 8 mol.% Y_2O_3 byly připraveny při teplotách výpalu v rozsahu 1100-1500 °C, u vzorků se 3 mol.% Y_2O_3 byly použity pouze 3 teploty výpalu: 1200, 1300 a 1400°C. Všechny vzorky byly charakterizovány Archimedovou metodou (objemová hmotnost, zdánlivá a skutečná pórovitost) a smrštěním. Metodou impulsní excitace byly změřeny Youngovy moduly při pokojové teplotě, byla vyjádřena jejich závislost na skutečné pórovitosti a bylo provedeno srovnání s teoretickými předpověďmi. U vzorků vypálených na teploty 1200, 1300 a 1400 °C byla stanovena pevnost v ohybu a získané hodnoty byly zpracovány pomocí Weibullový statistiky.

Srovnání reaktivit různých typů minerálních příměsí

Bc. Tomáš Doležal (M1)

Školitel: Ing. Martina Šídlová, Ph.D.

Udržitelnost a nová ekologizační opatření přinášejí v rámci Evropské unie nové výzvy do stavebnictví. Snižování emisí CO_2 nutí trh k hledání nových cest a využití nových materiálů jakožto příměsí do cementu či betonu. Jedním z takových materiálů by mohly být bezesporu méně kvalitní jíly. Dalšími materiály, které se na trhu začínají objevovat jsou popílký z biomasy, resp. ze spalování biomasy, které však ve srovnání s klasickými popílký mají zcela odlišné složení a vlastnosti. Nesmíme však zapomínat ani na potenciální využití elektrárenských strusek. V této práci byla porovnána pucolánová aktivita, respektive reaktivita různých typů minerálních příměsí, a to jak těch klasických, tak těch nových. Reaktivita příměsí byla zjišťována prostřednictvím Frattiniho testu a testu elektrické vodivosti. Osmidenním Frattiniho testem byla prokázána pucolánová aktivita všech surovin kromě jednoho vzorku popílku z biomasy. Zkrácený jednodenní Frattiniho test ukázal na rozdílnou reaktivitu látek po jednom dni hydratace. Kvantitativní shoda mezi výsledky jednodenního Frattiniho testu a testu elektrické vodivosti však nebyla jednoznačně prokázána. Dále bylo potvrzeno, že pucolánová aktivita dodaných látek je současně určena velikostí jejich zrn.



Reológia hydroxyapatitových suspenzií

Bc. Tatiana Gabošová (M2)

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

Hydroxyapatit sa využíva pri výrobe bioaktívnej keramiky pre jeho schopnosť podporovať rast kostných buniek a jeho nerozpustnosť vo vodnom prostredí. Práca sa zameriavala na meranie reologických vlastností hydroxyapatitových suspenzií a ich popis vhodnými matematickými modelmi. Reologické merania prebiehali na reometri Haake Mars III v rôznych konfiguráciách (doska-doska, kužeľ-doska, valec-valec). Najskôr bol sledovaný vplyv prípravy (doba miešania a vplyv ultrazvuku) pre východiskovú suspenziu (30 hm.% HA, 0,7 hm.% Dolapix CE64). Veľkosť častíc (rozdruženie aglomerátov) bolo sledované pomocou laserovej difrakcie. V práci boli skúmané 3 stekucovadlá: Dolapix CE64, TRIS a Darvan C-N a určila sa optimálna koncentrácia stekucovadla: 0,7 hm.% Dolapix CE64 a Darvan C-N; 0,9 hm.% TRIS. Najnižšie absolútne hodnoty viskozít boli namerané pre Dolapix CE64. Pre stekucovadlá Dolapix CE64 a Darvan C-N sa zostrojili krivky závislosti šmykového napätia od rýchlosti deformácie, ktoré sa fitovali Herschel-Bulkley modelom. Krivka závislosti viskozity od obsahu HA (obj.%) sa fitovala pomocou Kriegerovej rovnice. Z Kriegerovej rovnice bol určený kritický obsah tuhej fázy pre jednotlivé stekucovadlá.

Conversion kinetics of waste glass melting

John Khawand (B3)

Školitel: Ing. Richard Pokorný, Ph.D.

The aim of our work is to develop a mathematical model of the cold cap for different Low Activity Waste (LAW) and High-Level Waste (HLW) melter feeds that will be treated at the Waste Treatment and Immobilization Plant at the Hanford Site in Washington State, USA. By batching these feeds and using multiple techniques such as X-Ray Diffraction (XRD), Thermal Gravimetric Analysis (TGA), Evolved Gas Analysis (EGA), and Feed Expansion Tests (FET), we were able to describe the influence of the feed's thermal history on several conversion processes such as the gas-evolving reactions, silica dissolution, or primary foam formation and collapse. The measured data were used to develop a kinetic model for the silica dissolution that can track the conversion degree inside the cold cap and thus determine its bottom temperature. The melting rates predicted by the cold cap model corroborate the measurements in pilot-scale melters. Using our model, we also show that changes in melter operating conditions, such as melter operating temperature or the rate of bubbling, influence the melting rate to a lesser degree than what one would expect without consideration of batch conversion kinetics.

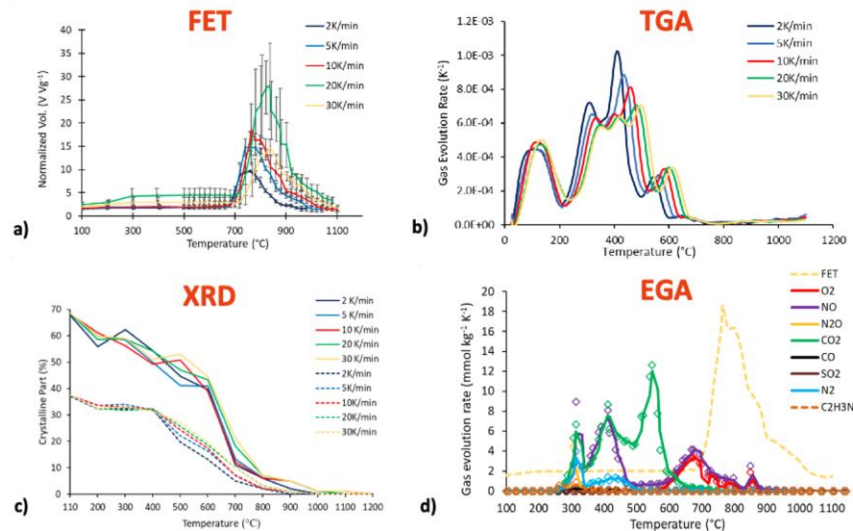


Fig. LAW AP-105 characterization as a function of temperature and heating rate: a) the feed normalized volume, b) normalized gas evolution rate measured by thermo-gravimetry, c) the fraction of total crystal phase (solid lines) and fraction of undissolved silica (dashed lines), and d) evolution of individual gases measured by evolved gas analysis (10 K/min heating rate)

Vliv kalsilitu na vlastnosti leucitového kompozitu

Bc. Jana Králíková (M2)

Školitel: doc.Ing. Alexandra Kloužková, CSc.

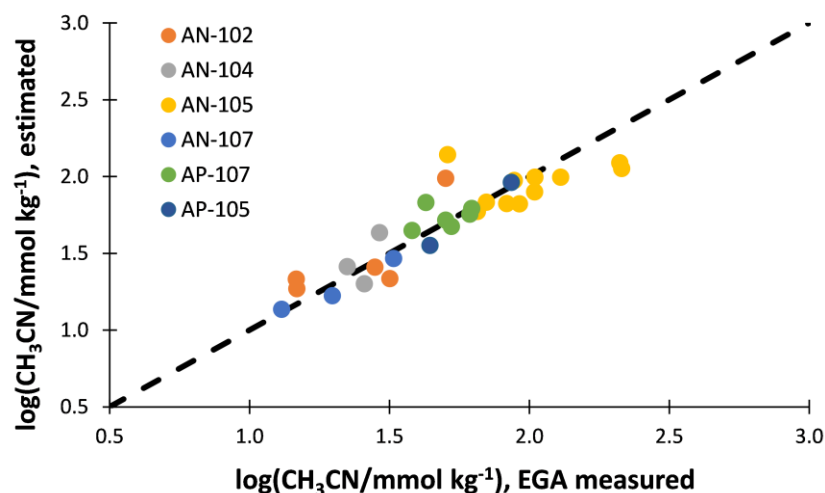
Leucitový kompozit je častým keramickým materiálem využívaným ve stomatologii. Používá se při přípravě korunek i faset. Vedle vysokoteplotních syntéz, energeticky a časově náročných, se leucit připravuje i nízkoteplotně. Zde je častou příměsí metastabilní fáze kalsilit. Cílem této práce je sledovat vliv kalsilitu na vlastnosti výsledného leucitového kompozitu. Vstupními surovinami pro přípravu leucitového prekursoru byly práškový hliník, amorfni oxid křemičitý a roztok hydroxidu draselného. Syntéza amorfniho prekursoru probíhala v hydrotermálních podmínkách a konečný produkt - tetragonální leucit byl získán jeho kalcinací. Množství příměsi kalsilitu v produktu bylo řízeno molaritou vstupního roztoku KOH (2,5M, 3M a 4M). Vzorky kompozitu byly připraveny smícháním kalcinovaného prekursoru (40 hmot. %) se skelnou matricí a následným lisováním a výpalem. Byly hodnoceny především mikrotvrdost, koeficient teplotní roztažnosti, povrchová struktura a morfologie vzorků.

Effect of feed composition on the production of acetonitrile and other off-gases during vitrification of nuclear waste

Jan Kunc (B3)

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. Those trace components of the off-gas are by-products of reactions between nitrates and organics in the feed, such as acetonitrile. 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. We measured the gas evolution for a wide range of low-activity waste melter feeds using laboratory evolved gas analysis (EGA). The gaseous emissions are affected by the content of organic carbon and nitrogen in the feed and by the feed redox state. We show that while the gas evolution can be estimated directly from the feed composition using regression analysis, there can be significant differences in the off-gas composition between a pilot-scale melter operation and a laboratory EGA setup. This work has a potential to provide a tool that can enable fast optimization of feed composition with respect to the gaseous emissions and significantly reduce the amount of expensive experimental testing.



Příprava skafoldů z bioaktivního skla 45S5 pomocí stereolitografického 3D tisku

Bc. Dominik Navara (M1)

Školitel: Ing. Jan Macháček, Ph.D.

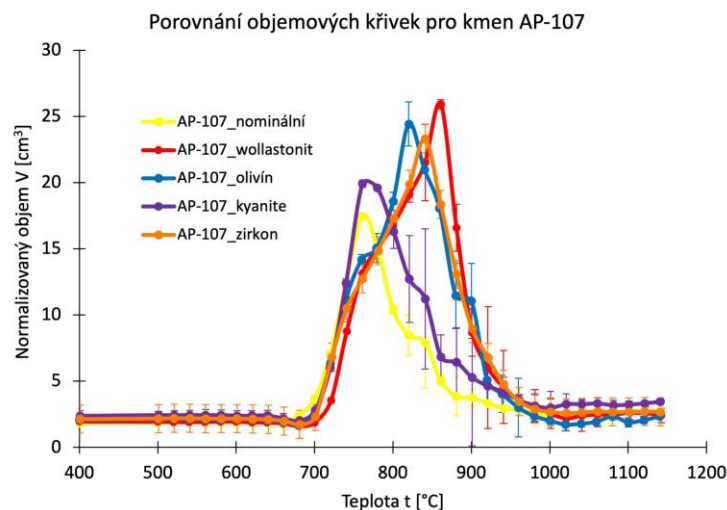
Práce se zabývá přípravou fotocitlivé suspenze s obsahem kalcinovaných částic bioaktivního skla 45S5 ke stereolitografickému 3D tisku skafoldů. Pojednává o problematice skafoldů vyrobených 3D tiskem ze suspenzí s nekalcinovanými částicemi bioskla 45S5. Byla připravena suspenze s kalcinovanými částicemi bioskla 45S5 a byla zkoumána reologie, distribuce velikosti částic a změna v zaoblení částic. Výsledky byly porovnány s připravenou suspenzí dopovanou nekalcinovanými částicemi bioskla. Bylo dosaženo podobné distribuce velikosti částic, ale suspenze s kalcinovanými částicemi bioskla vykazovala horší reologické chování, z důvodu vyloučení pyrolytického uhlíku (kontaminace) na povrchu bioskla, který mění povrchové vlastnosti částic bioskla.

Vliv složení kmene na tavení při vitrifikaci jaderného odpadu

Bc. Karolína Šůsová (M2)

Školitel: Ing. Richard Pokorný, Ph.D.

Jeden ze způsobů, jak imobilizovat vyprodukovaný jaderný odpad, je smíchat ho se sklotvornými přísadami a vitrifikovat ho v elektrické tavicí peci. Přeměna sklářského kmene na sklo probíhá ve vrstvě kmene, tzv. „cold-capu“, a naším cílem je pochopit všechny důležité probíhající děje a zefektivnit celý proces přeměny. Jednou z možností, jak ovlivnit rychlost tavení, je optimalizovat složení sklářského kmene. Pro zkoumání vlivu složení sklářského kmene na tavení při vitrifikaci jaderného odpadu byl vybrán kmen „AP-107“, u kterého jsme měnili složení sklotvorných přísad. V laboratoři byl nejprve připraven kmen AP-107 podle původního neoptimalizovaného složení, kdy se v simulovaném odpadním kmeni používají snadno dostupné minerály: olivín Mg_2SiO_4 , wollastonit CaSiO_3 , zirkon ZrSiO_4 a kyanit Al_2SiO_5 . U přípravy modifikovaných kmenů jsme se rozhodli minerály nahradit oxidy MgO , CaO , ZrO_2 a hydroxidem $\text{Al}(\text{OH})_3$, a postupně testovat vliv jednotlivých původních minerálů. Proces přeměny kmene na sklo byl zaznamenán za pomoci vysokoteplotní pozorovací aparatury. Z procesu tavení jsme pomocí metody FET získali objemové křivky v závislosti na teplotě. Výsledky naznačují, že volba minerálů či oxidů může mít významný vliv na proces přeměny, a tedy i na rychlost tavení při vitrifikaci.



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. Michal Šimek, Ph.D

Ing. Eva Bedrnová

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 [Tereza Škardová](#) (B3, prof. Ing. František Kovanda, CSc.)

Vliv delaminace Mg-Al hydrotalcitu ve formamidu na složení hydroxidových vrstev

08:45 [Nina Osipova](#) (B3, Ing. Václav Eigner, Ph.D.)

Příprava solí farmaceutických substancí pomocí srážecích reakcí

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

Odpadní stavební kaly jako potenciální aditiva do zemědělských půd

09:15 [František Fňukal](#) (B3, doc. Dr. Ing. Michal Hušák)

Program pro verifikaci krystalové struktury DFT metodou – CheckCif-DFT

09:30 [Bc. Simona Šajbanová](#) (M2, doc. Dr. Ing. Michal Hušák)

Možnosti rozlišování solí a kokrystalů pomocí DFT výpočtu

09:45 [Bc. Kateřina Maxová](#) (M1, doc. Ing. Barbora Doušová, CSc.)

Optimální podmínky přípravy zeolitového sorbentu modifikací manganem

10:00 [Bc. Dominika Koubová](#) (M2, Ing. Jan Čejka, Ph.D.)

Vliv derivátů kyseliny benzoové na krystalizaci API

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

Charakterizace solí trospia a exotrospia

Vliv delaminace Mg-Al hydrotalcitu ve formamidu na složení hydroxidových vrstev

Tereza Škardová (B3)

Školitel: prof. Ing. František Kovanda, CSc.

Syntetický Mg-Al hydrotalcit se často využívá jako hostitelská struktura pro interkalaci léčiv. Interkalaci léčiv nerozpustných ve vodě lze provést metodou obnovení vrstevnaté struktury z koloidní disperze delaminovaného produktu, která se přidá k roztoku léčiva v organickém rozpouštědle. Cílem práce bylo ověřit stabilitu hydroxidových vrstev po delaminaci Mg-Al hydrotalcitu ve formamidu. Prekurzor Mg-Al-NO₃ s molárním poměrem Mg/Al = 2 byl připraven koprecipitační reakcí dusičnanů Mg a Al hydroxidem sodným a hydrotermálně zpracován po dobu 1 a 4 týdnů. Koloidní disperze byla připravena delaminací vzorků ve formamidu po dobu 1, 2 a 3 hodin. Po přidání koloidní disperze do roztoku uhličitanu sodného vznikl Mg-Al-CO₃ hydrotalcit. XRD potvrdila zlepšení krystalinity prekursoru po hydrotermálním zpracování a zároveň postupné zhoršování krystalinity vzniklého produktu Mg-Al-CO₃ s rostoucí dobou kontaktu prekursoru s formamidem. Delší doba přípravy koloidní disperze vedla ke snížení molárního poměru Mg/Al v připravených produktech a malým změnám mezirovinné vzdálenosti d_{110} , které lze vysvětlit zmenšením průměrné vzdálenosti mezi kationty v hydroxidových vrstvách. Během interakce s formamidem tedy zřejmě dochází k vyluhování části Mg²⁺ kationtů z hydroxidových vrstev do kapalné fáze.

Příprava solí farmaceutických substancí pomocí srážecích reakcí

Nina Osipova (B3)

Školitel: Ing. Václav Eigner, Ph.D.

Tématem této práce je příprava solí farmaceutických substancí pomocí srážecích reakcí. Cílem této práce je výměna bromidového aniontu v isothiuroniových solích za jiné anionty pomocí srážecích reakcí se stříbrnými solemi organických kyselin a analýza připravených látek. Isothiuroniové soli představují ve farmaceutickém průmyslu perspektivní skupinu látek s možným využitím jako léčiva proti leukémii^[1]. Hlavní zvolenou metodou analýzy připravených látek byla RTG monokrystalová difrakce, doplněná RTG difrakční analýzou prášku a ^1H NMR. V rámci práce byly dosud vytvořeny tři výchozí isothiuroniové soli, které byly charakterizovány pomocí ^1H NMR. Jejich monokrystaly byly připraveny pomalým odpařením rozpouštědla a po změření RTG monokrystalová difrakce byly vytvořeny příslušné strukturní modely. Dále byly započaty výměnné reakce, které byly provedeny v pevné fázi a v roztoku.^[1]

Ferreira, M.; Assunção, L. S.; Silva, A. H.; Filippin-Monteiro, F. B.; Creczynski-Pasa, T. B.; Marcus, M. S. Allylic isothiuronium salts: The discovery of a novel class of thiourea analogues with antitumor activity. *Eur. J. Med. Chem.* 2017, 129, 151–158.

Odpadní stavební kaly jako potenciální aditiva do zemědělských půd

Milan Angelis (B3)

Školitel: doc. Ing. Barbora Doušová, CSc.

Práce se zabývá zkoumáním využití odpadních stavebních kalů z výroby betonu a umělého kamene jako aditiv do zemědělských půd pro zlepšení jejich vodního režimu, a případné zvýšení obsahu látek významných pro růst rostlin. V první části práce byly provedeny výluhové testy a stanoveny obsahy vybraných iontů (NH_4^+ , PO_4^{3-} , Ca^{2+} , Al^{3+}) ve výluzích metodou Atomové absorpční spektrometrie a UV-Vis spektrofotometrie. Pro experimenty zaměřené na vodní režim půd byly použity dva rozdílné typy standardních půd od německé firmy Lufa. Nasákavost a retence vody byla měřena u samostatných kalů a půd, a dále u směsí kalu a půdy v poměru 5 a 20 % hmotn. Jako referenční materiál k odpadním kalům byl vybrán komerční klinoptilolit od firmy Zeocem, který je znám svou schopností hydratace.

Program pro verifikaci krystalové struktury DFT metodou – CheckCif-DFT

František Fňukal (B3)

Školitel: doc. Dr. Ing. Michal Hušák

Předmětem práce je vývoj softwaru pro verifikaci experimentálně stanovených řešení krystalických struktur. Verifikace je založena na srovnání s výsledky kvantově mechanického výpočtu. Tím můžeme do značné míry detekovat chyby těchto řešení a potvrdit tak jejich správnost (včetně řešení na základě dat pocházejících z práškové analýzy). Dalším účelem je možnost ohodnotit strukturu z hlediska mřížkové energie, tedy určit její stabilitu. Posouzení hodnoty mřížkové energie má význam při predikci krystalové struktury. Program CheckCif-DFT vnitřně využívá kvantově-mechanický program Quantum Espresso. Ten operuje na bázi *ab initio* metody DFT (density functional theory). Cílem programu CheckCif-DFT je poskytnout krystalografům rozhraní, které nevyžaduje zevrubnou znalost v oblasti kvantové mechaniky a dovoluje výpočty provést na základě předem zvolených konfigurací. Program zpracuje data z CIF souboru do vstupu pro kvantově-mechanický výpočet a výpočet provede. Ve finální fázi program srovná vstupní a upřesněnou strukturu pomocí výpočtu RMSCD. CheckCif-DFT je tedy volně dostupnou alternativou k nákladným komerčním programům (BIOVIA Materials Studio, Amsterdam Modeling Suite).

Možnosti rozlišování solí a kokrystalů pomocí DFT výpočtu

Bc. Simona Šajbanová (M2)

Školitel: doc. Dr. Ing. Michal Hušák

Práce se zabývá možností rozlišení soli a kokrystalu pomocí výpočtu založeného na teorii elektronové hustoty (DFT = density functional theory). DFT geometrická optimalizace umožňuje stanovit pozici kritického vodíku u vybraných látek. Tato informace je mimo jiné požadována při registraci a patentování léčiva. Navržený postup pro ověření platnosti metody zahrnuje tyto kroky: 1) Výběr struktur z kritické oblasti $\Delta pK_a <-1,4>$, a to pouze ty u nichž byla pozice vodíků potvrzena z diferenční Fourierovy mapy 2) Modifikace struktury – umělé přesunutí vodíku do špatné pozice pomocí programu BIOVIA Material Studio 2020(3) Provedení výpočtu geometrické optimalizace na superpočítači Salomon v Ostravě 4) Analýza výsledku výpočtu Tímto způsobem byl proveden výpočet na celkem 173 solích a 96 kokrystalech. Závěr naší prozatímní práce jsou tato pravidla: Pokud startovní model soli dospěje do kokrystalu, jedná se o kokrystal. Pokud startovní model soli i kokrystalu vyjdou jako sůl, a délka experimentální H-vazby je delší než 2.613 Å, je struktura s vysokou pravděpodobností experimentálně špatně vyřešená a jedná se o sůl. Funkcionál PBE není zcela spolehlivý pro rozlišení soli a kokrystalu, pro kratší délky H-vazby je lepší použít funkcionály rSCAN nebo PBE0.

Optimální podmínky přípravy zeolitového sorbentu modifikací manganem

Bc. Kateřina Maxová (M1)

Školitel: doc. Ing. Barbora Doušová, CSc.

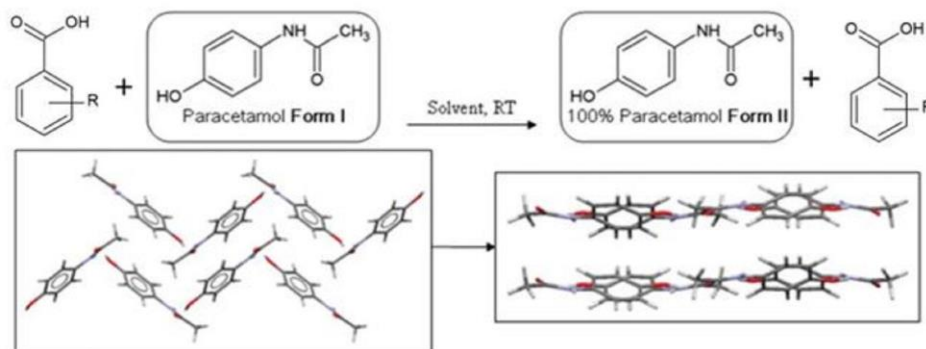
Práce se zabývá optimalizací podmínek vybraného způsobu modifikace přírodního zeolitu manganem pro získání selektivního sorbentu pro dekontaminační technologie. Cílem bylo získat stabilní materiál s maximálním množstvím povrchově vázaného manganu při co nejnižším surovinovém a energetickém zatížení. Pro experimenty byl použit slovenský přírodní zeolit draselného typu. Připravený zeolit s nejvyšším obsahem manganu byl testován na adsorpci vybraných kationtů (Cd^{2+} , Ni^{2+} , Pb^{2+}) a aniontů (AsO_4^{3-} , AsO_2^-) z vodných roztoků o koncentraci 0,5 mmol/l. Obsah zachyceného manganu byl stanoven pomocí RTG fluorescenční spektrometrie a zbytkové koncentrace kationtů a aniontů v roztocích byly analyzovány UV-Vis spektrofotometrií a Atomovou absorpční spektrometrií.

Vliv derivátů kyseliny benzoové na krystalizaci API

Bc. Dominika Koubová (M2)

Školitel: Ing. Jan Čejka, Ph.D.

Deriváty kyseliny benzoové mají vliv na krystalizaci některých aktivních farmaceutických substancí. Z literatury vyplývá, že u paracetamolu se podařilo díky přidání halogenderivátů kyseliny benzoové poskytnout podmínky pro spolehlivou výrobu metastabilní formy II se 100% výtěžkem a stabilitou delší než 1 rok. Naopak kokrystaly vznikají z vícekomponentního systému sulfamethazinu s 4-brombenzoovou kyselinou. Práce je proto zaměřena na zkoumání vlivu derivátů kyseliny benzoové na krystalizační proces známých léčiv. Výsledné krystalické produkty budou analyzovány pomocí metody rentgenové difrakce monokrystalu. Obrázek 1: Přeměna paracetamolu z formy I na formu II za přítomnosti derivátu kyseliny benzoové.

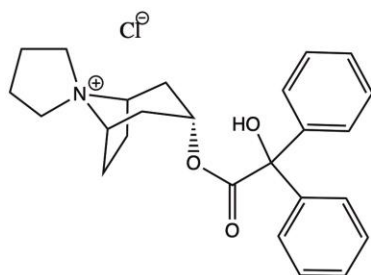


Charakterizace solí trospia a exotropia

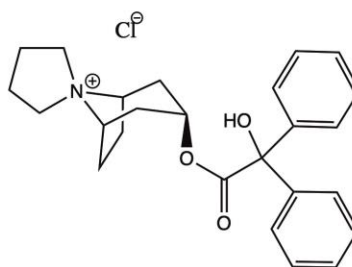
Bc. Adriana Dombrovská (M1)

Školitel: Ing. Jan Čejka, Ph.D.

Příprava farmaceutických solí je jedním z nejpoužívanějších způsobů modifikace rozpustnosti léčivých látek. Výchozí látkou byla sůl trospium chlorid, což je farmaceutická sůl používaná v léčivých přípravcích určených k léčbě syndromu hyperaktivního močového měchýře. Druhou výchozí látkou byl exotropium chlorid, což je epimer trospium chloridu, u něhož ale nejsou prostudovány farmaceutické účinky. V literatuře byla doposud popsána struktura pěti solí trospia a šesti exotropia. Cílem této práce bylo připravit tyto známé formy ve větším množství, tím ověřit reprodukovatelnost přípravy, dále také příprava nových forem a charakterizace získaných produktů. Byly připraveny a následně charakterizovány tři známé soli trospia a dvě nové, z derivátů exotropia čtyři již popsané soli a jedna nová. Byl optimalizován postup pro získání čistých solí. Charakterizace všech solí probíhala metodami rentgenové difrakce a termické analýzy.

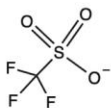


Trospium chlorid



Exotropium chlorid

Použité protiionty:



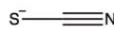
Triflát



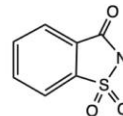
Tetrafluoroborát



Hexafluorofosfát



Thiokyanát



Sacharinát

Ústav organické chemie (110)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.

Ing. Bc. Michal Himl, Ph.D.

SEZNAM SEKČÍ

1. [Organická chemie bakalářská I](#)
2. [Organická chemie bakalářská II](#)
3. [Organická chemie magisterská I](#)
4. [Organická chemie magisterská II](#)
5. [Organická chemie magisterská III](#)
6. [Organická chemie magisterská IV](#)

Organická chemie bakalářská I

MÍSTO: MSTEAMS

KOMISE

prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc (předseda)

Ing. Eva Svobodová, Ph.D. – organizační tajemník

doc. Ing. Igor Linhart, CSc.

Ing. Martin Krupička, Ph.D.

Ing. Kvetoslava Schlenc Bajžíková, Ph.D. (CaymanPharma)

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

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:15 [František Vávra](#) (B3, Ing. Eva Svobodová, Ph.D.)

Syntéza isoalloxazinu a isoalloxaziniové soli s elektronakceptorní skupinou a jejich využití ve fotokatalýze

09:30 [Viktor Káčerik](#) (B3, prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.)

Nepriama nukleofilná substitúcia stéricky bránených nitroarénov

09:45 [Adam Nógell](#) (B3, prof. Ing. Martin Fusek, CSc.)

Syntéza fosforamidátové prolékové formy obsahující siderofor

10:00 [Jakub Schimmer](#) (B2, Ing. Petra Ménová, Ph.D.)

Mannose-based antagonists of DC-SIGN

10:15 [Scarlet Stefanie Vraník](#) (B3, doc. Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D.)

Príprava enantiomerne čistých amínov s využitím reaktivity fosforamidátov

10:45 [Vojtěch Urban](#) (B3, Ing. Bc. Michal Himl, Ph.D.)

Syntéza methylkarbamoyl-derivátů aminokyselin pro toxikologický výzkum proteinových aduktů odvozených od N,N-dimethylformamidu

11:00 [Marie Rozmušová](#) (B2, Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.)

Modifikované flavinové kofaktory pro studium mechanismu účinku flavoenzymů

11:15 [Margarita Faizulina](#) (B3, Ing. Petr Kovaříček, Ph.D.)

Funkcionalizace povrchu pro superrezoluční mikroskopii

11:30 [Anna Nožičková](#) (B3, doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.)

Příprava prekurzorů pro studium intramolekulárního přesmyku na calix[4]arenu

11:45 [Sámer Melhem](#) (B3, Ing. Markéta Rybáčková, Ph.D.)

Příprava rozšířených derivátů triptycenu

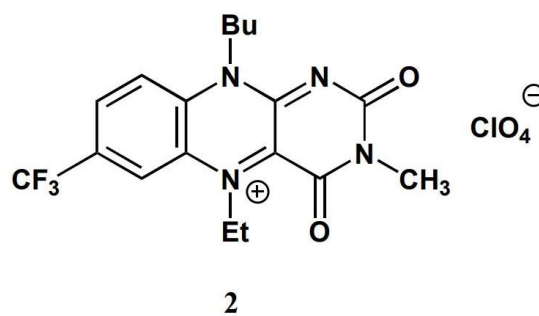
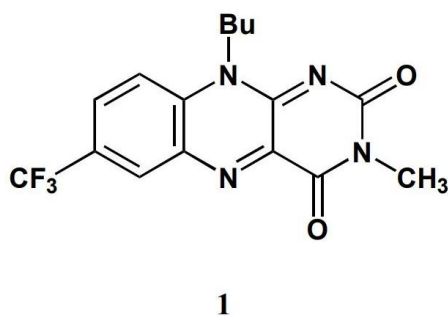
Syntéza isoalloxazinu a isoalloxaziniové soli s elektronakceptorní skupinou a jejich využití ve fotokatalýze

František Vávra (B3)

Školitel: Ing. Eva Svobodová, Ph.D.

Deriváty alloxazinu a isoalloxazinu (flaviny) jsou intenzivně zkoumány jako fotokatalyzátory v organických redoxních systémech, kde mohou představovat vhodnější alternativu ke klasickým oxidačním a redukčním činidlům. Katalyticky aktivní forma flavinu je generována excitací viditelným světlem. Připravil jsem elektronově chudý 10-butyl-3-methyl-7-trifluormethylisoalloxazin 1 a jeho kvarterní flaviniovou sůl 2. Látky jsem charakterizoval a otestoval jako katalyzátory oxidací vybraných substrátů kyslíkem. Flavin 1 poskytl při těchto reakcích slibné výsledky.^[1] Flaviniová sůl 2 se ukazuje jako problematická z hlediska stability. Za reakčních podmínek se rozkládá.

[1] <https://doi.org/10.1002/ejoc.201901628>

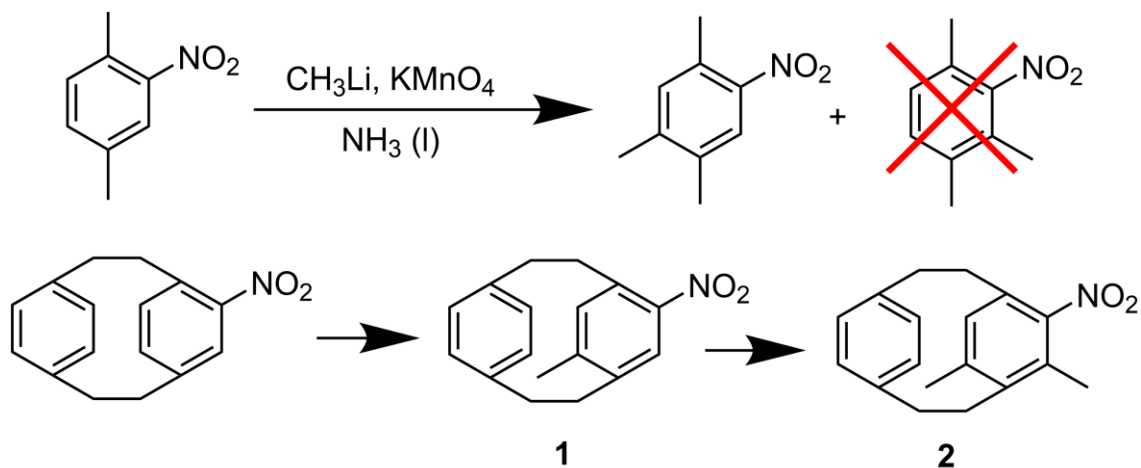


Nepriama nukleofilná substitúcia stéricky bránených nitroarénov

Viktor Káčerik (B3)

Školiteľ: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Planárne chirálny 4-amino[2.2]paracyklofan môže slúžiť ako prekursor difluórsilikátov , NHC ligandov a fluórimidazoliových solí. Stabilita NHC ligandov je však výrazne znížená prítomnosťou ortho-vodíku v paracyklofanovom motive. Cieľom tejto práce je syntéza a ortho-alkylácia prekursoru týchto paracyklofanov, 4-nitro[2.2]paracyklofanu s využitím nepriamej (vicarious) nukleofilnej substitúcie. V prvom kroku reakcia prebehla prednostne do polohy 8 (1) paracyklofanového skeletu, a opakovanou alkyláciou bolo dosiahnuté žiadanej modifikácie do polohy 5 (2) .



Syntéza fosforamidátové prolékové formy obsahující siderofor

Adam Nógell (B3)

Školitel: prof. Ing. Martin Fusek, CSc.

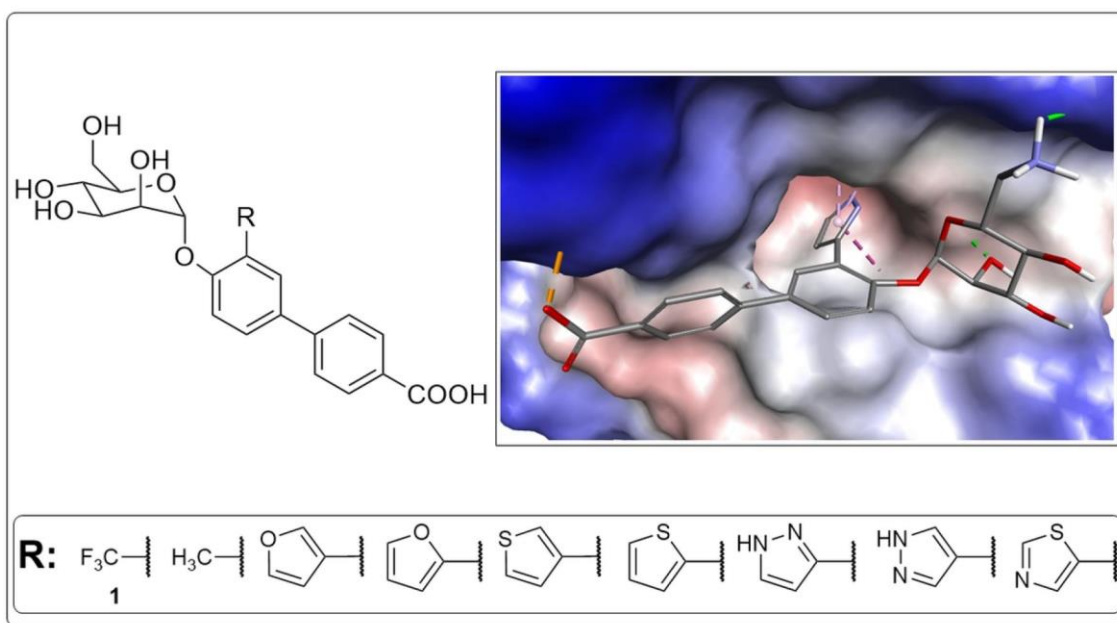
Železo sa vyskytuje v bunkách cicavcov za fyziologických podmienok prevažne v nerozpustnej forme viazané na proteíny, ako je transferín a laktoferín. Baktérie produkujú malé molekuly nazývané siderofóry, ktoré umožňujú baktériám získavať dostatočné množstvo iónov železa pre vlastné prežitie v prostredí s nedostatkom železa. Bolo ukázané, že pripojenie siderofóru k antibakteriálnej zlúčenine výrazne zvyšuje prestup tohto liečiva do bakteriálnej bunky. Prezentácia bude pojednávať o proliečivách, siderofóroch a taktiež o príprave aduktov siderofórov pre ich následnú aplikáciu vo vývoji nových antibakteriálnych látok.

Mannose-based antagonists of DC-SIGN

Jakub Schimmer (B2)

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). DC-SIGN has a significant affinity for mannose but due to the shallowness of the respective binding site, it is necessary to modify the compound to improve its affinity for the receptor. A recent study identified biphenyl mannoside **1** as a promising DC-SIGN inhibitor with ten times higher affinity than mannose and an interesting binding mode employing secondary binding sites. Computational analysis revealed additional binding pocket within the binding site which could be exploited to further improve the binding affinity of biphenyl mannosides. Therefore, our goal is to introduce five-membered heterocyclic rings in position 2 of the biphenyl. Apart from studying the full mannosides mentioned above, a structure–affinity relationship study will be executed with mannosides bearing only substructures of the aryl-biphenyl moiety in order to evaluate their role. Therefore, my goal is to synthesize a library of mannosides and evaluate which structural features are necessary to improve their affinity for DC-SIGN.

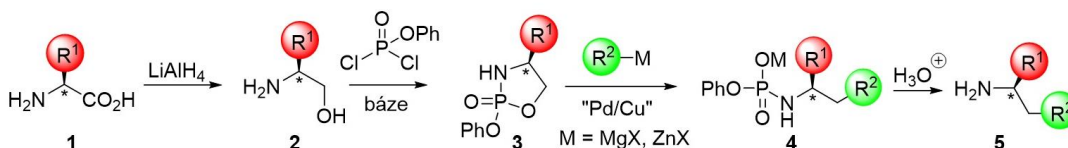


Príprava enantiomerne čistých amínov s využitím reaktivity fosforamidátov

Scarlet Stefanie Vraník (B3)

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

Pomyselným svätým grálom organickej syntézy je príprava zlúčenín so stereogennými centrami. Tieto opticky čisté látky sa využívajú napríklad vo farmaceutickom priemysle. Typickým zástupcom chirálnych látok sú amíny a ich deriváty, ktoré majú vysoké zastúpenie v liečivách a aj prírodných látkach. Preto je cieľom práce vypracovať stereoselektívnu prípravu chirálnych amínov **5** z komerčne dostupných prírodných aminokyselín **1**. Navrhnutý postup prípravy chirálnych amínov vychádza z enantiomérov aminokyselín **1**, ktoré sa redukciami prevedú na aminoalkoholy **2**. Reakciou aminoalkoholu **2** s fenyl-dichlorfosfátom vzniká cyklický fosforamidát **3**, ktorý obsahuje aktivovanú väzbu C-O. Príprava chirálnych amínov **5** bude dokončená reakciou cyklických fosforamidátov s aktivovanou C-O väzbou **3** s organokovovými činidlami, a následnou hydrolýzou fosforamidickej väzby. Predpokladá sa, že takto docielime vznik amínu so zachovanou konfiguráciou pôvodnej aminokyseliny.

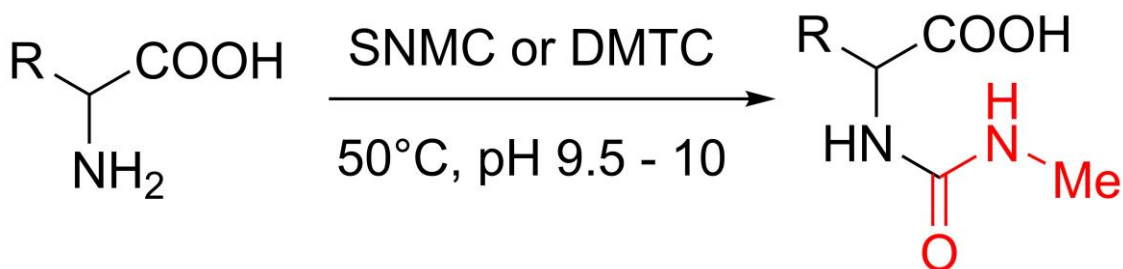


Syntéza methylkarbamoyl-derivátů aminokyselin pro toxikologický výzkum proteinových aduktů odvozených od *N,N*-dimethylformamidu

Vojtěch Urban (B3)

Školitel: Ing. Bc. Michal Himl, Ph.D.

N,N-Dimethylformamid (DMF) je důležité průmyslové rozpouštědlo používané zejména při výrobě plastů, které se snadno vstřebává do organismu vdechováním nebo při kontaktu s pokožkou. DMF je pak z části metabolicky aktivován na methylisokyanát (MIC), elektrofilní metabolit schopný vázat se na nukleofilní centra v proteinech a v nukleových kyselinách. Pro toxikologické studie tvorby a štěpení aduktů odvozených od DMF s krevními proteiny jsou proto potřebné *N*-methylkarbamoylované aminokyseliny jako analytické standardy. Cílem této práce bylo vypracovat syntetickou metodu využívající *N*-sukcinimidyl-*N*-methylkarbamát (SNMC) nebo *N,S*-dimethylthiokarbamat (DMTC) jako methylkarbamoylační činidla namísto vysoce nebezpečného MIC. Reakcí těchto látek s příslušnými aminokyselinami, konkrétně s valinem, N_α -chráněným lysinem, N_α -acetyllysinem, leucinem, prolinem a methioninem v boraxovém pufru, byly získány odpovídající *N*-methylkarbamoyl deriváty v uspokojivých výtěžcích. V prezentaci bude diskutována volba reakčních podmínek a metody zpracování jednotlivých karbamoylovaných aminokyselin.

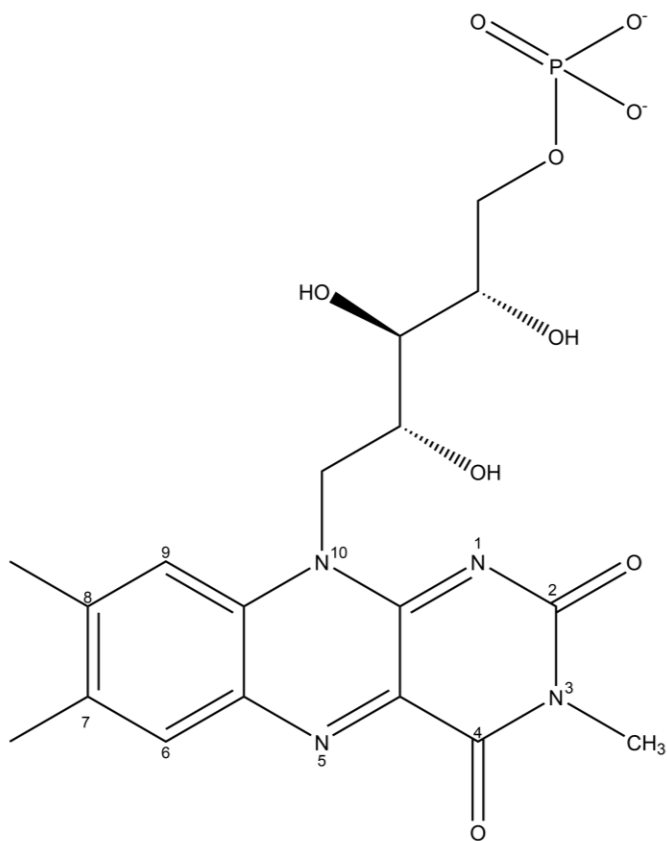


Modifikované flavinové kofaktory pro studium mechanismu účinku flavoenzymů

Marie Rozmušová (B2)

Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.

Deriváty izoalloxazinu (flaviny) jsou biologicky významné látky. Flavinmononukleotid (FMN) je významným kofaktorem oxidoreduktáz. Je schopený jedoelektronové a dvoelektronové redukce, což z něj dělá důležitou součást biochemických procesů. Cílem této práce je připravit flavinmononukleotid methylovaný v poloze 3 za účelem zabránění případné enolizaci. Získaná sloučenina bude následně využita k testování mechanismu působení enzymů. Výchozí látkou byl komerčně dostupný riboflavin, který byl nejprve acetylován, aby se ochránila volné hydroxylové skupiny. Následně byla provedena methylace a odstranění chránicích acetylových skupin.



Funkcionalizace povrchu pro superrezoluční mikroskopii

Margarita Faizulina (B3)

Školitel: Ing. Petr Kovaříček, Ph.D.

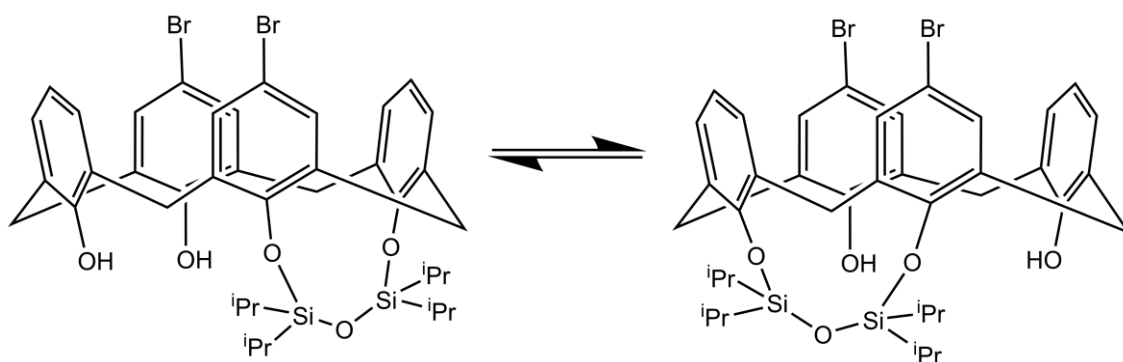
Cílem práce je funkcionalizace povrchu skla pro ukotvení modelu fosfolipidové membrány. Vybrané funkční skupiny jsou navázány přes silanolové nebo fosfonatové kotvy. Tyto nesou deriváty pro reverzibilní vazbu membránových struktur s možností fotochemické modulace. Práce se soustřeďuje na reverzibilní kondenzaci amin-karbonyl a “photocaging” přes ortho-nitrobenzylový fragment, připravená mikroskopická sklíčka jsou studována super-rezoluční fluorescenční mikroskopií.

Příprava prekurzorů pro studium intramolekulárního přesmyku na calix[4]arenu

Anna Nožičková (B3)

Školitel: doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.

Calixareny jsou makrocyclické molekuly, jejichž deriváty tvoří důležitou součást supramolekulární chemie. Vedle klasických calixarenů, ve kterých jsou fenolová jádra spojena methylenovou spojkou, a thiacalixarenů, propojených atomy síry, byl připraven calix[4]aren, ve kterém byly nahrazeny sírou dva protější methylenové můstky. Na tomto, tzv. smíšeném calixarenu, byl pozorován přesmyk disiloxanového můstku, spojujícího dvě vedlejší jádra. Cílem této práce je ověřit, zda k podobnému přesmyku dochází i na obyčejném calixarenu. Abychom byli schopni přesmyk rozpoznat, je nutné připravit calix[4]areny s dvěma substituenty navázanými na horním okraji v distální nebo v proximální poloze, na které bude následně navázán disiloxanový můstek. Tato práce se proto zabývá syntézou *p*-dibromcalix[4]arenů a její optimalizací.

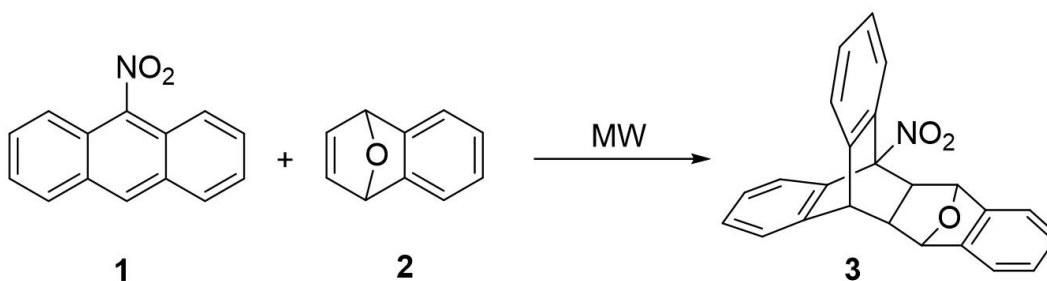


Příprava rozšířených derivátů triptycenu

Sámer Melhem (B3)

Školitel: Ing. Markéta Rybáčková, Ph.D.

Díky unikátní struktuře triptycenu nacházejí jeho deriváty uplatnění např. jako molekulární stroje nebo také v chemii polymerů, materiálové chemii, medicíně a v neposlední řadě také v katalýze. Substituované triptyceny mohou být chirální a nalézt tak využití jako enantioselektivní katalyzátory. Ve své práci se zabývám optimalizací Dielskovy-Alderovy reakce 9-nitroanthracenu (1) s 1,4-epoxy-1,4-dihydronaftalenem (2), která je klíčovým krokem syntézy rozšířených triptycenů. Podle publikovaných postupů jsem nejprve reakcí anthracenu s kyselinou dusičnou připravil nitroanthracen 1 a reakcí 1,2-dibrombenzenu s furanem pak epoxynaftalen 2. Vlastní Dielsovu-Alderovu reakci jsem prováděl v mikrovlnném reaktoru v různých rozpouštědlech. Adukt 3 pak aromatizací poskytne rozšířený triptycen, který po redukci nitroskupiny na aminoskupinu bude možné využít k syntéze NHC ligandů a jejich komplexů s přechodnými kovy.



Organická chemie bakalářská II

MÍSTO: MSTEAMS

KOMISE

doc. Dr. Ing. Jana Hodačová (předseda)

Ing. Radek Jurok, Ph.D. – organizační tajemník

prof. Ing. Ivan Stibor, CSc. (TUL)

Ing. Petr Kovaříček, Ph.D.

Ing. Petr Slavík, Ph.D. (Santiago)

Ing. Martin Horčic, Ph.D. (Biomedica)

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:15 [Tomáš Volný](#) (B2, prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.)

Nukleofilní fluorace na allylových systémech

09:30 [David Král Lesný](#) (B3, prof. Ing. Radek Cibulka, Ph.D.)

Sterically hindered flavinium salts for biomimetic umpolung transformations

09:45 [Soňa Poláčeková](#) (B3, doc. Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D.)

4-Hydroxypyridin jako nové činidlo pro Buchwaldovu-Hartwigovu reakci

10:00 [Eliška Smolová](#) (B3, Ing. Bronislav Jurásek, Ph.D.)

Syntéza vybraných metabolitů látky 25E-NBOH

10:15 [Adam Hroch](#) (B3, Ing. Markéta Rybáčeková, Ph.D.)

Prekurzory 3-substituovaných arynů

10:45 [Ondřej Daněš](#) (B3, Ing. Petra Ménová, Ph.D.)

Synthesis of substituted quinolones as potential DC-SIGN inhibitors

11:00 [Eliška Vlasáková](#) (B3, doc. Dr. Ing. Jana Hodačová)

Syntéza derivátů (1S,2S)-cyklohexan-1,2-diaminu využitelných pro přípravu hybridních organokřemičitých materiálů

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

2,6-disubstituované anthraceny jako prekurzory chirálních triptycenů

11:30 [Karolína Vatrová](#) (B3, prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.)

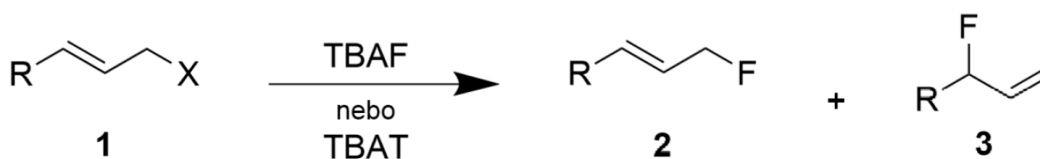
Možnosti provedení ortho-lithiace na thiacalix[4]arenu

Nukleofilní fluorace na allylových systémech

Tomáš Volný (B2)

Školitel: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Substráty obsahující allylové uskupení lze využít pro zkoumání reaktivity nukleofilních fluoračních činidel. Dvojná vazba allylového systému **1** umožňuje kromě klasické nukleofilní substituce S_N2 také nukleofilní substituci s allylovým přesmykem (S_N2'), při níž dochází k posunu dvojně vazby a vzniku nového stereogenního centra. Stereoselektivní fluorace za vzniku rozvětveného allylfluoridu **3** je známá pouze za katalýzy palladiem nebo iridiem. Ve své práci jsem syntetizoval allylhalogenidy a allylalkoholy **1** pomocí Wittigovy nebo Wittigovy–Hornerovy reakce. Pro fluorace připravených allylderivátů jsem využil komerčně dostupná fluorační činidla, a to tetrabutylamonium-fluorid (TBAF) a tetrabutylamonium-trifenyldifluorsilikát (TBAT), přičemž jsem sledoval konverzi a poměr allylfluoridů **2** a **3**.



$R = Ph, Cy, C_5H_{11}$

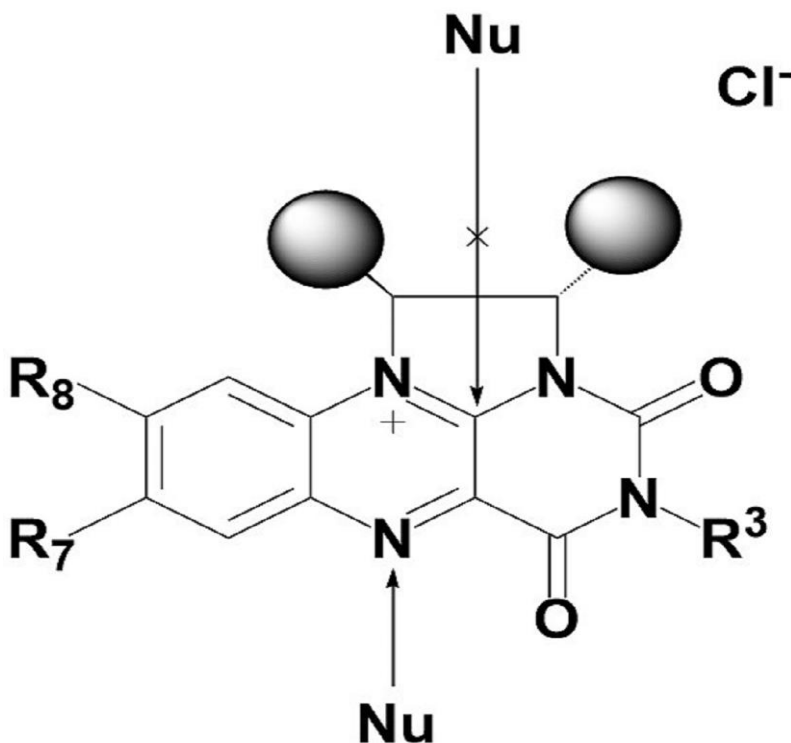
$X = OH, Cl, Br$

Sterically hindered flavinium salts for biomimetic umpolung transformations

David Král Lesný (B3)

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

Several flavin-dependent enzymes have been observed to catalyze reactions including d->a umpolung transformations. Following a nucleophilic attack on the 5-N atom of flavin moiety the polarity of such donor is switched, making it an acceptor while the negative charge is being stabilized by the flavin. A viable in vitro replacement of such enzymes should be ethylene-bridged flavinium salts. However, the 5-N is not the only electrophilic center susceptible to a nucleophilic attack and other nucleophilic attacks are undesirable. To reduce the possibility of an undesirable attack, sterically hindering substituents are added on the bridge. Reactions with nucleophiles are then performed to study the adduct formation, homocoupling reactions of nucleophiles and to compare the yields with reactions catalyzed by analogical flavinium salts without sterical hindrance.

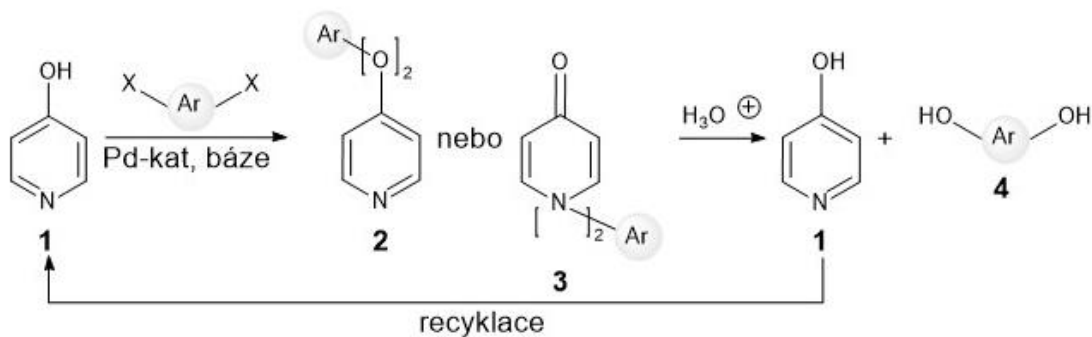


4-Hydroxypyridin jako nové činidlo pro Buchwaldovu-Hartwigovu reakci

Soňa Poláčková (B3)

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

Polyfenoly jsou sloučeniny s potenciální biologickou aktivitou, a proto jsou předmětem studia ve farmacii. Mnohé studie popisují využití polyfenolů při léčbě kardiovaskulárních a onkologických onemocnění nebo jejich protizánětlivé účinky, proto se ve své práci zabývám přípravou polyfenolů Buchwaldovou-Hartwigovou reakcí s použitím 4-hydroxypyridinu (1) jako nového hydroxylačního činidla. Lze předpokládat, že za podmínek Buchwaldovy-Hartwigovy reakce bude 4-hydroxypyridin (1) vystupovat jako ambidentní nukleofil, který v závislosti na reakčních podmínkách umožní vznik produktů N- nebo O-arylace (2) a (3). Hlavním předmětem mé práce je studium vlivu reakčních podmínek na průběh Buchwaldovy-Hartwigovy reakce s cílem maximalizovat tvorbu polyfenolů (4).

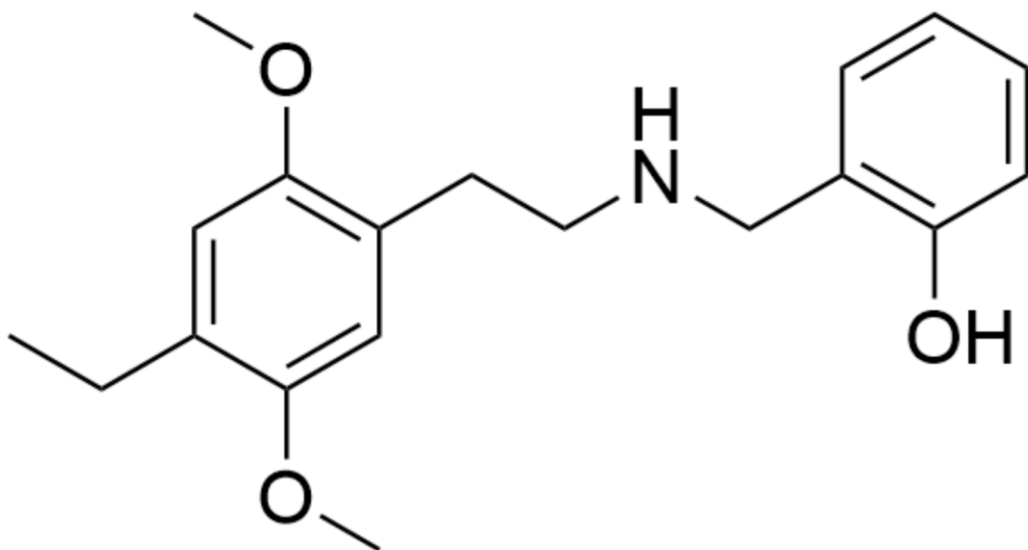


Syntéza vybraných metabolitů látky 25E-NBOH

Eliška Smolová (B3)

Školitel: Ing. Bronislav Jurásek, Ph.D.

Nové psychoaktivní látky (NPS), se objevují na černém trhu jako legální alternativa zákonem zakázaných látek. Na základě struktury se NPS rozlišují do několika skupin (např. fenethylaminy, fenylcyklidiny, kanabinoidy). Mezi fenethylaminy patří i látky typu NBOH i NBOMe, tedy 4-substituované *N*-(2'-hydroxybenzyl)-2,5-dimethoxy fenethylaminy, které se na černém trhu začaly objevovat od roku 2015. NBOH však mohou způsobit řadu nežádoucích účinků, jako jsou hypertermie, bolest hlavy a tachykardie. V krajním případě může nastat i smrt. Vzhledem k tomu, že se jedná o poměrně novou látku, není o ní v současné době mnoho studií k dispozici. Obzvláště znalost metabolismu může být pro identifikaci parentní látky klíčová. Tato práce se zabývá designem a syntézou předpokládaných metabolitů 25E-NBOH, které budou sloužit jako analytické standardy. Doposud byly víceřadovou syntézou s dobrými výtěžky připraveny 2 navržené metabolity, které byly charakterizovány pomocí NMR spektroskopie. V rámci práce budou připraveny další metabolity, například s hydroxyskupinou na hydroxybenzylové části, nebo *O*-demethylované na fenethylaminové části. Jednotlivé metabolity budou dále použity jako analytické standardy pro metabolické a farmakokinetické studie ve spolupráci s Národním ústavem duševního zdraví.

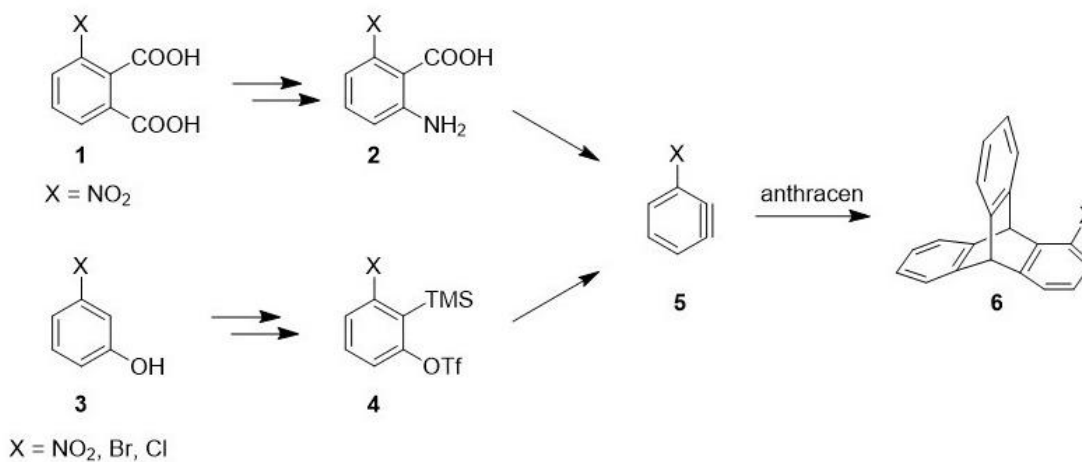


Prekurzory 3-substituovaných arynů

Adam Hroch (B3)

Školitel: Ing. Markéta Rybáčková, Ph.D.

3-Substituované aryny 5 mohou sloužit při Dielsově-Alderově reakci s anthracenem jako stavební bloky 1-substituovaných triptycenů 6. V případě použití vhodně substituovaného anthracenu budou takto připravené triptyceny chirální a bude možné je využít k syntéze chirálních NHC ligandů a jejich komplexů s přechodnými kovy. Ve své práci jsem se zaměřil na přípravu prekurzorů arynů pomocí dvou různých syntetických cest. První cesta využívá substituovanou anthranilovou kyselinu 2, která byla připravena ve dvou reakčních krocích z 3-nitroftalové kyseliny 1 a která poskytuje odpovídající aryn *in-situ* reakcí s isoamylnitritem. Druhá syntetická cesta vychází z 3-substituovaných fenolů 3, které jsou nejprve reakcí s HMDS převedeny *O*-trimethylsilylované deriváty. Ty podléhají vlivem stericky bráněné báze retro-Brookovu přesmyku a následně jsou transformovány na trifláty 4, které vytváří v přítomnosti fluoridového aniontu 3-substituované aryny.

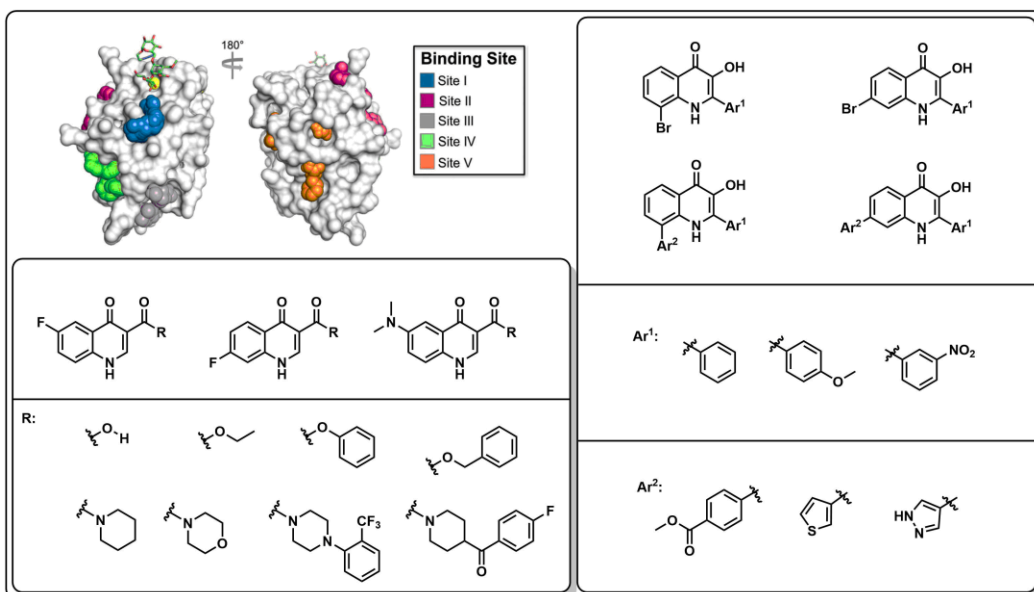


Synthesis of substituted quinolones as potential DC-SIGN inhibitors

Ondřej Daněk (B3)

Školitel: Ing. Petra Ménová, Ph.D.

DC-SIGN receptor is present on the cell membrane of macrophages and dendritic cells of human immunity system and has a high affinity for mannose-rich *N*-glycans typical for pathogens. Some viruses (*e.g.*, HIV or Hepatitis C) take advantage of this affinity to enter and infect T-cells which is why high-affinity antagonists of DC-SIGN have a high potential to become cures for these diseases. My project is focused on the synthesis and evaluation of biological activity of 4-oxoquinoline-3-carboxylic acid and 4-oxo-3-hydroxy-2-phenylquinoline derivatives. In an initial screening, simple amides of fluoro and dimethylamino derivatives showed high affinity for hydrophobic binding sites of DC-SIGN receptor. Initially, reaction conditions of the synthetic routes to carboxylic acids have been optimized and multiple amides and esters of 6-fluoro, 7-fluoro and 6-dimethylamino-4-oxoquinoline-3-carboxylic acids were synthesized. Subsequently, syntheses of the 7-bromo and 8-bromo precursors were optimized and some 7-aryl and 8-aryl substituted derivatives of 4-oxo-3-hydroxy-2-phenylquinolines with 3-nitro, 4-methoxy or no substituents on the phenyl ring were synthesized by the Suzuki–Miaura cross-coupling reactions. The evaluation of affinity of the prepared molecules for DC-SIGN is now under way.



Syntéza derivátů (1*S*,2*S*)-cyklohexan-1,2-diaminu využitelných pro přípravu hybridních organokřemičitých materiálů

Eliška Vlasáková (B3)

Školitel: doc. Dr. Ing. Jana Hodačová

Práce se zabývá přípravou enantiomerně čistých derivátů (1*S*,2*S*)-cyklohexan-1,2-diaminu. Struktura tohoto diaminu se velmi často objevuje v katalyzátorech různých enantioselektivních reakcí.¹ Zabudování tohoto strukturního bloku do křemičité sítě by poskytlo heterogenní, snadno recyklovatelný katalyzátor. Jednou z variant přípravy organokřemičitých materiálů je jejich syntéza z bis(trialkoxysilanů). Při přípravě bis(triethoxysilanu) **1** (schéma 1) se vycházelo z cyklohexa-1,4-dienu (**2**), ze kterého byl několikakrokovou syntézou získán enantiomerně čistý (1*R*,2*R*)-cyklohex-4-en-1,2-diol (**3**). Dalšími reakcemi byl připraven enantiomerně čistý diazido-diol **4** a následně intermediát **5**. Na tento intermediát byly pomocí alkyn-azid cykloadiční reakce v bezvodém prostředí zavedeny triethoxysilanové funkční skupiny.

Literatura: 1) a) *Catalysts*, 2021, 11, 41; b) *New J. Chem.*, 2018, 42, 11896-11904.

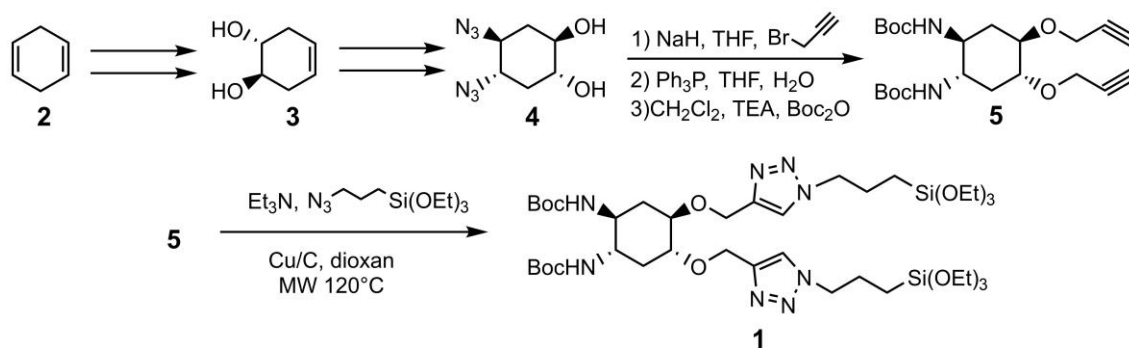


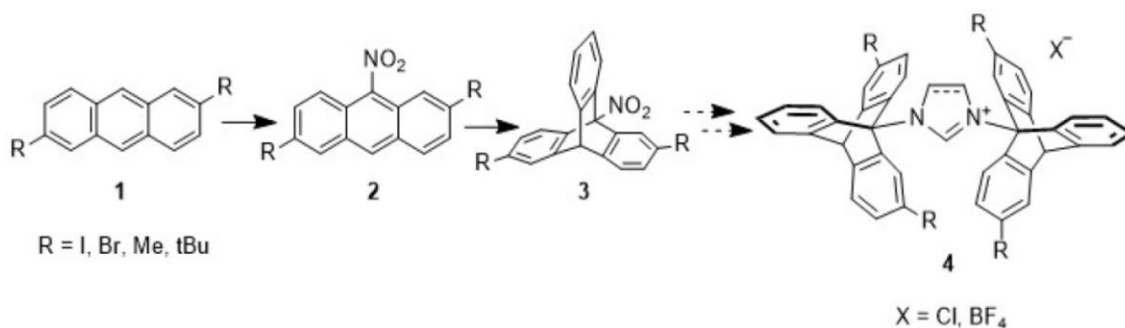
Schéma 1: Syntéza bis(triethoxysilanu) **1**

2,6-disubstituované anthraceny jako prekurzory chirálních triptycenů

Šárka Polívková (B3)

Školitel: Ing. Markéta Rybáčková, Ph.D.

2,6-Disubstituované anthraceny představují prekurzory chirálních triptycenů, které mohou sloužit jako stavební bloky chirálních imidazoliových či dihydroimidazoliových solí. Z nich připravené NHC ligandy bude možné využít pro syntézu komplexů přechodných kovů či nukleofilních fluoračních činidel. Cílem mé práce je využít sérii 2,6-disubstituovaných anthracenů **1** pro syntézu 9-nitroanthracenů **2** a jejich reakcí s benzynem, generovaným in-situ, pak připravit triptyceny **3**. Po redukci nitroskupiny na aminoskupinu budou tyto aminy využity k syntéze imidazoliových a dihydroimidazoliových solí **4**.

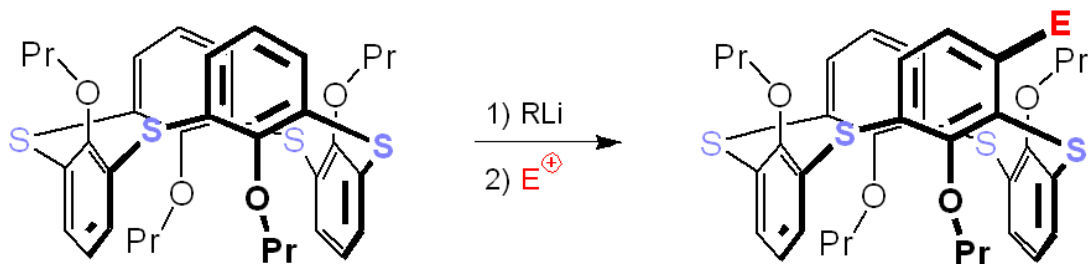


Možnosti provedení *ortho*-lithiace na thiacalix[4]arenu

Karolína Vatrová (B3)

Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Derivatizace horního okraje thiacalix[4]arenů probíhá ve většině případů přednostně do *para*-polohy vůči propylovým skupinám navázaným na benzenovém jádře. O to zajímavější je jednokrokové zavedení různých derivátů do *meta*-polohy thiacalix[4]arenu za vzniku inherentně chirálních látek. Takovouto substituci na derivátech obsahujících síru namísto methylenových spojek umožňuje například *ortho*-lithiační reakce. Cílem této práce je pokus o provedení *ortho*-lithiace na 1,3 – střídavé konformaci a optimalizace této reakce. Zavedení například aldehydové skupiny či karboxylové kyseliny do *meta*-polohy thiacalix[4]arenu by mohlo poskytnout atraktivní intermediáty pro další syntézy a následnou přípravu inherentně chirálních receptorů.



Organická chemie magisterská I

MÍSTO: MSTEAMS

KOMISE

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

doc. Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D. – organizační tajemník

Ing. Petra Ménová, Ph.D.

Ing. Václav Kozmík, CSc.

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

Ing. Karel Křenek (Donaulab)

PROGRAM

09:00 **zahájení**

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

Syntéza chirálních derivátů hexahydrokumarinu cyklizací enolesterů dimedonu

09:30 [Bc. Šárka Bouzková](#) (M2, Ing. Markéta Rybáčková, Ph.D.)

Imidazoliové soli na bázi [2.2]paracyklofanu

09:45 [Bc. Michaela Bršťáková](#) (M1, prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.)

Studium mechanismu merkurace calix[4]arenu

10:00 [Bc. Jiří Neradil](#) (M2, doc. Dr. Ing. Jana Hodačová)

Syntéza 6,6'-difunkcionalizovaných derivátů [1,1'-binaftalen]-2,2'-diolu pro přípravu organokřemičitých materiálů

10:30 [Bc. Rostislav Sponar](#) (M1, Ing. Eva Svobodová, Ph.D.)

Fotoelektrochemicky generované excitované radikály deazaflavinu jako silná redukční činidla

10:45 [Bc. Jiří Šimánek](#) (M2, Ing. Ondřej Kunderát, Ph.D.)

Syntéza dipeptidem/močovinou substituovaných derivátů calixarenu pro studium jejich komplexačních vlastností

11:00 [Bc. Jakub Širůček](#) (M1, Ing. Martin Krupička, Ph.D.)

Kvantově-chemické studium katenanů jako mechanochemických indikátorů

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

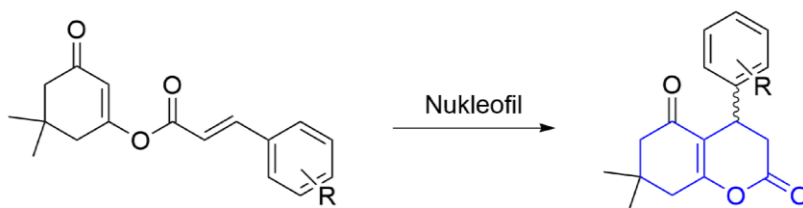
Syntéza chirálních zwitteriontových stacionárních fází pro HPLC

Syntéza chirálních derivátů hexahydrokumarinu cyklizací enolesterů dimedonu

Bc. Marie Kloubcová (M1)

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

Kumarin a jeho deriváty představují početnou skupinu sloučenin přírodní i syntetického původu. V posledních letech se kumarinům dostalo zasloužené pozornosti zejména díky jejich různorodé biologické aktivitě a jsou často studovány, mimo jiné, jako potenciální léčiva. Sloučeniny obsahující skelet hexahydrokumarinu lze připravit pomocí nukleofilem iniciované cyklizační reakce esterů enol formy 1,3-diketonů a α,β -nenasycených kyselin. Jedná se o málo prostudovanou reakci a tato práce by měla přispět k pochopení jejího mechanismu i rozsahu. K tomuto účelu byla připravena série esterů enol formy dimedonu a laterálně substituovaných skořicových kyselin, které byly následně podrobeny reakci s 4-(*N,N*-dimethylamino)pyridinem jako nukleofilem. Struktury vzniklých derivátů hexahydrokumarinu byly charakterizovány pomocí ^1H a ^{13}C NMR spektroskopie a s ohledem na nově vzniklé chirální centrum byla provedena jejich chirální separace. Za účelem studia možného enantiosektivního provedení reakce byla otestována řada chirálních katalyzátorů. Dále byl studován vliv povahy a polohy substituentů na rychlost této reakce, který byl následně kvantitativně vyjádřen pomocí Hammettovy rovnice.



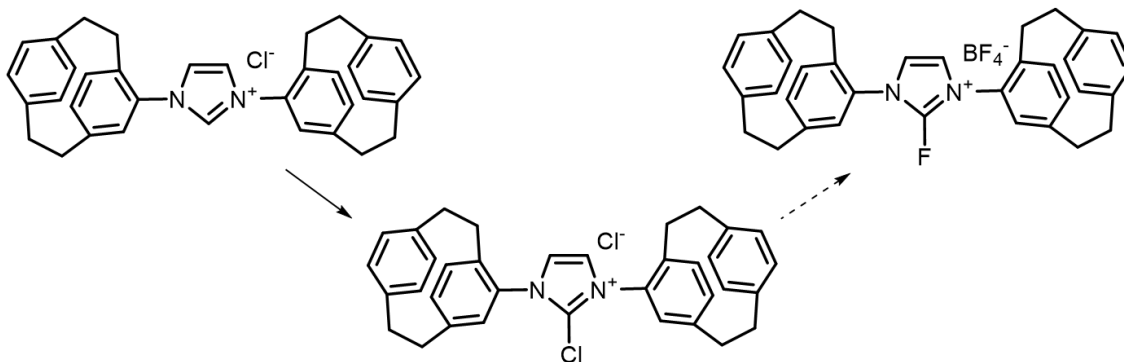
- R: a H
b 2-OCH₃
c 3-OCH₃
d 4-OCH₃
e 2-NO₂
f 3-NO₂
g 4-NO₂
h 4-Br

Imidazoliové soli na bázi [2.2]paracyklofanu

Bc. Šárka Bouzková (M2)

Školitel: Ing. Markéta Rybáčková, Ph.D.

Různé variace imidazoliových a dihydroimidazoliových solí našly v průběhu let využití jako NHC ligandy katalyzátorů přechodných kovů a jako strukturní bloky dalších látek. V mé práci studuji vlastnosti NHC ligandů a roli planární chiralidy substituovaného [2.2]paracyklofanu připojeného k heterocyklickému jádru. Práce navazuje na předchozí syntézu modifikovaných katalyzátorů PEPPSI a vede k chirálním strukturním analogům komerčně dostupných fluoračních činidel AlkylFluor a PhenoFluor. Kritickým krokem syntézy se ukázala být příprava klíčového chlorimidazolium-chloridu, která probíhá přes labilní intermediární NHC ligand.

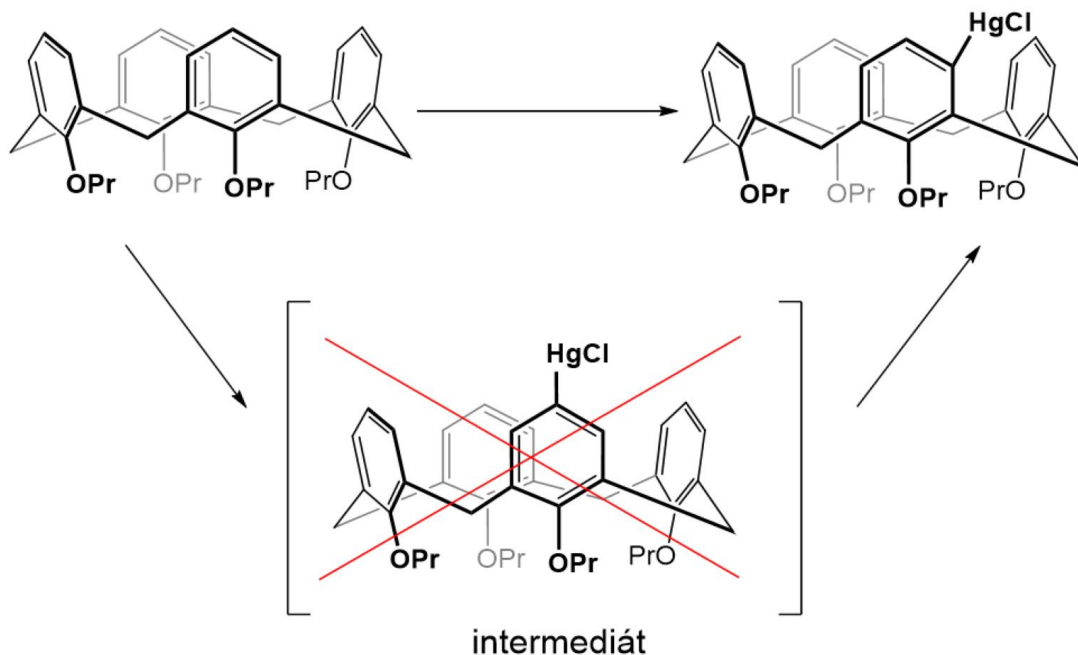


Studium mechanismu merkurace calix[4]arenu

Bc. Michaela Bršťáková (M1)

Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Cílem práce bylo objasnění průběhu přímé merkurace calix[4]arenu. Ta totiž jako jediná známá elektrofilní substituce prováděná na těchto látkách poskytuje *meta*-substituovaný derivát, zatímco všechny ostatní elektrofilní substituce poskytují *para*-substituované deriváty. Průběh reakce byl studován pomocí NMR experimentu. Dále byly provedeny reakce za snížené i zvýšené teploty, při kterých byl zkoumán kinetický a termodynamický produkt reakce. V druhé části projektu byl studován mechanismus přesmyku z *para* do *meta*-polohy, který byl také studován pomocí NMR experimentu.



Syntéza 6,6'-difunkcionalizovaných derivátů [1,1'-binaftalen]-2,2'-diolu pro přípravu organokřemičitých materiálů

Bc. Jiří Neradil (M2)

Školitel: doc. Dr. Ing. Jana Hodačová

Práce se zabývá přípravou enantiomerně čistých 6,6'-difunkcionalizovaných derivátů [1,1'-binaftalen]-2,2'-diolu (1) jako prekurzorů pro přípravu hybridních organokřemičitých materiálů. Tyto hybridní materiály by měly najít své uplatnění jako heterogenní katalyzátory enantioselektivních reakcí. Výhodou těchto materiálů je jejich snadné oddělení od reakční směsi a možnost recyklace. Cílem práce je syntéza (*R*)-6,6'-bis(aminomethyl)-2,2'-dimethoxy-[1,1'-binaftalenu] (2), jehož reakcí s triethoxy(3-isokyanatopropyl)silanem vzniká přemostěný bis(triethoxysilan) 3, což je finální prekurzor pro přípravu hybridního organicko-anorganického křemičitého materiálu. Syntéza přemostěného bis(triethoxysilanu) 3 vycházela z enantiomerně čistého (*R*)-[1,1'-binaftalen]-2,2'-diolu (1), který byl pětikrokovou syntetickou cestou (Schéma 1) převeden na přemostěný bis(triethoxysilan) 3. Látka 3 bude dále využita pro přípravu hybridních organokřemičitých materiálů, které by měly sloužit jako katalyzátory enantioselektivních reakcí.

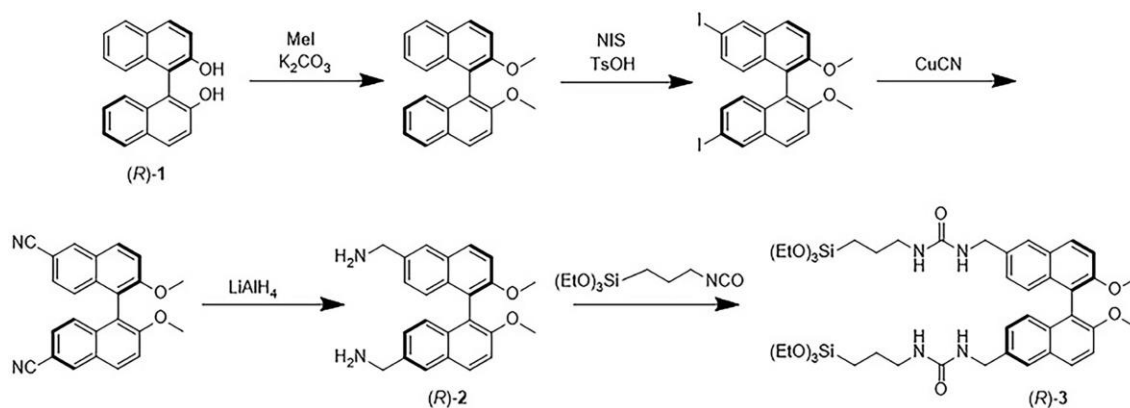


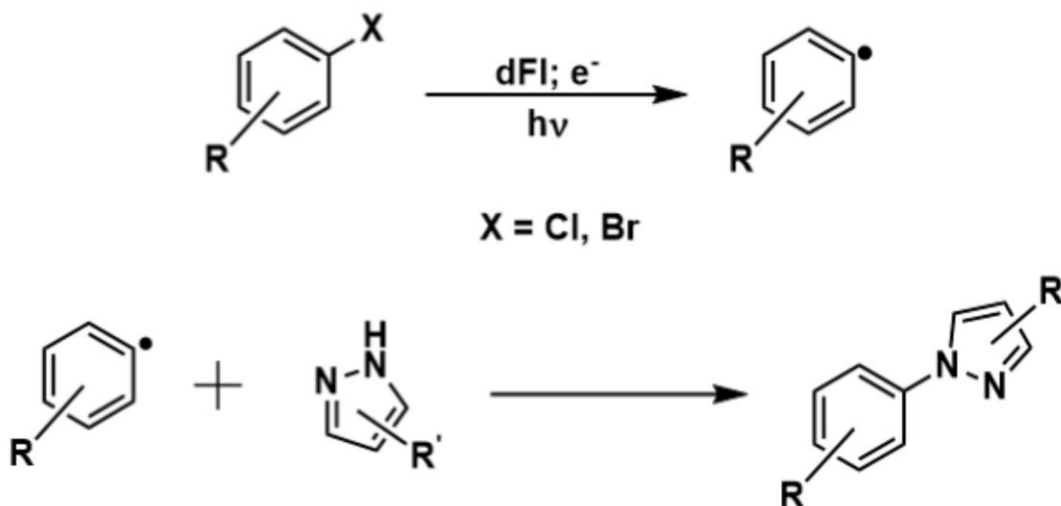
Schéma 1: Syntéza přemostěného bis(triethoxysilanu) 3

Fotoelektrochemicky generované excitované radikály deazaflavinu jako silná redukční činidla

Bc. Rostislav Sponar (M1)

Školitel: Ing. Eva Svobodová, Ph.D.

Deazaflaviny patří k látkám s velmi nízkým redoxním potenciálem. Díky této vlastnosti mohou být, na rozdíl od flavinů s vyšším redoxním potenciálem, využity i u reakcí, které pro svůj průběh vyžadují silné redukční podmínky (např. dehalogenace arylhalogenidů). Reaktivní částicí vystupující v redukčních reakcích je radikál deazaflavinu ve své excitované formě. Pro přípravu této formy se využívá mechanismu con-PET, jehož kroky sestávají z redukce pomocí donoru elektronů (např. DIPEA) a následné excitace viditelným světlem. Tato práce je zaměřena na přípravu radikálu v excitovaném stavu pomocí podobného mechanismu a otestování vlastností radikálu v redoxních dějích. Pro přípravu semichinonu v excitované formě je namísto donoru elektronů použit elektrický potenciál a následná excitace viditelným světlem.

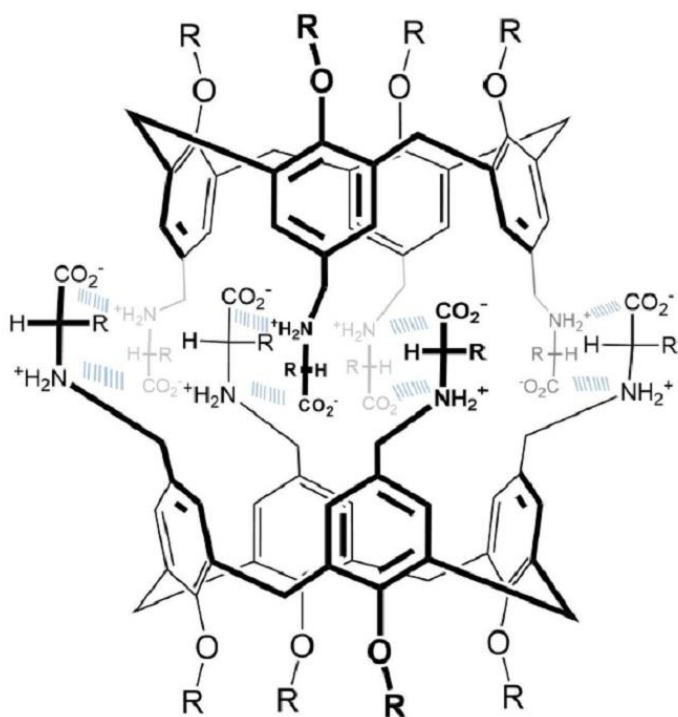


Syntéza dipeptidem/močovinou substituovaných derivátů calixarenu pro studium jejich komplexačních vlastností

Bc. Jiří Šimánek (M2)

Školitel: Ing. Ondřej Kunderát, Ph.D.

Práce se zabývá přípravou a studiem komplexačních vlastností derivátů calixarenu substituovaných aminokyselinami nebo močoviny, které jsou schopny vytvářet vodíkové můstky. Tyto látky pomocí vodíkových můstků dimerizují a vzniklé dimery lze následně použít pro enkapsulaci malých molekul, například paracetamolu. Vodíkové můstky se také využívají pro komplexaci aniontů a tyto vlastnosti budeme zkoumat pomocí ^1H NMR titrací, a to s použitím odlišných velikostí kavit calixarenů a také rozdílných peptidových nebo močovinných substituentů na jejich horním okraji.

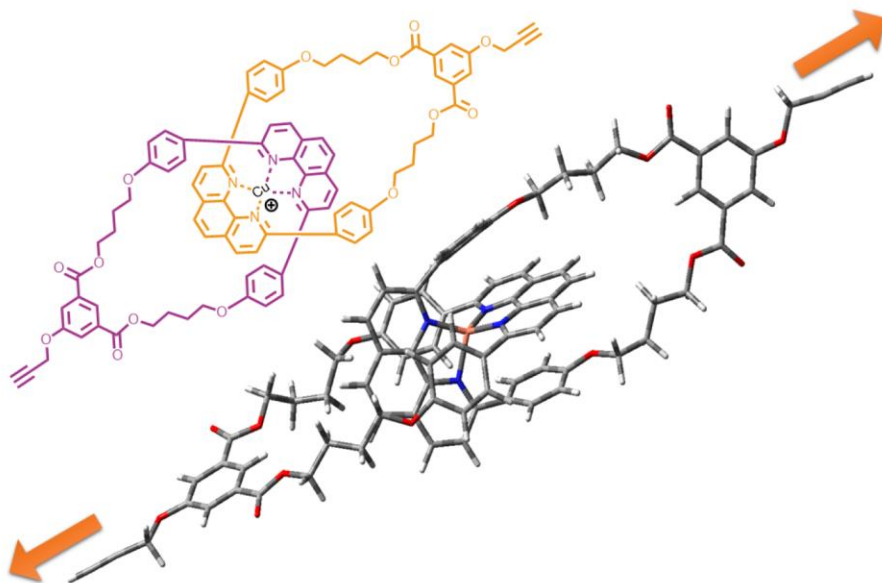


Kvantově-chemické studium katenanů jako mechanochemických indikátorů

Bc Jakub Širůček (M1)

Školitel: Ing. Martin Krupička, Ph.D.

Katenany jsou supramolekuly, obsahující alespoň dva makrocycly topologicky uzavřené do sebe. Jako výchozí struktura je uvažován katenan, získaný pomocí templátové syntézy, obsahující jednomocnou měď, která zaručuje správnou koordinaci dvojice 2,9-bifenyl-1,10-fenantrolinu. Působením mechanické síly na protilehlé konce katenanu dochází k deformaci makrocycly a změnám v okolí centrálního atomu kovu, díky nimž lze katenan využít jako mechanochemický indikátor. Tato práce využívá metody výpočetní chemie k předpovězení vhodné struktury katenanu s ohledem na jeho mechanochemické vlastnosti. Pro tyto účely byly studovány tři varianty katenanu s rozdílnou délkou alifatických spojek při působení externí síly 0,1–2,0 nN. Z nich se jako nejvhodnější jeví struktura obsahující 4 methylenové skupiny v alifatických spojkách. Byl studován také vliv záměny centrálního kovu Cu^+ za Zn^{2+} a Cd^{2+} , a srovnání katenanu s jeho neuzavřeným analogem. Katenan koordinující se k Cu^+ jeví lepší spektroskopické vlastnosti než katenany koordinované k Zn^{2+} a Cd^{2+} , a změna spekter oproti otevřenému analogu je výraznější.

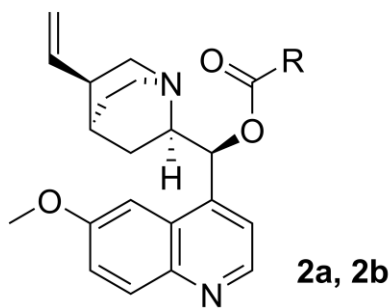
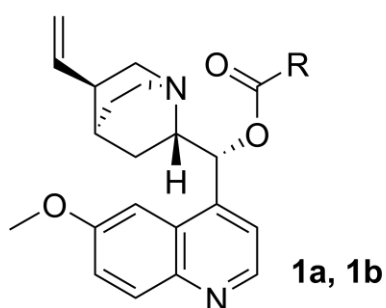


Syntéza chirálních zwitteriontových stacionárních fází pro HPLC

Bc. Anežka Kuncová (M2)

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

S rostoucí poptávkou po enantiomerně čistých látkách roste potřeba vyvinout vhodné separační metody racemických směsí. Jednou z možností je vysokoúčinná kapalinová chromatografie (HPLC) v kombinaci s chirální stacionární fází. Avšak chirální separace ionizovatelných látek je problematická, neboť komerčně dostupné chirální kolony je zpravidla neseparují. Efektivně je lze však dělit na ionizovatelných stacionárních fázích – katexech, anexech či zwitterionických ionexech. Zwitterionické ionexy mají tu výhodu, že je lze použít pro dělení kladně i záporně nabitých látek a zwitteriontů. Cílem této práce je syntetizovat chirální selektory na bázi chininu a chinidinu modifikované dipeptidy a následně je imobilizovat na vhodně modifikovaný silikagel. Takto připravené chirální sorbenty budou následně naplněny do chromatografických kolon a budou vyhodnoceny jejich chromatografické vlastnosti s využitím kyselých, bazických a zwitterionických látek. Jako zwitterionické analyty budou primárně použity nechráněné dipeptidy a oligopeptidy, tedy sloučeniny s významnou biologickou aktivitou.



R: **a** = Ala-Leu
b = Leu-Ala

Organická chemie magisterská II

MÍSTO: MSTEAMS

KOMISE

doc. Ing. Jan Budka, Ph.D. (předseda)

Mgr. Roman Holakovský, Ph.D. – organizační tajemník

doc. Ing. Jan Kotek, Ph.D. (PřF UK)

Ing. Petra Cuřínová, Ph.D.

Ing. Jiří Vokál, Ph.D. (Lach-Ner)

Ing. Aneta Bendová (Donaulab)

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:15 [Bc. Radek Staník](#) (M1, doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.)

Syntéza jader založených na calix[4]arenu pro výstavbu dendrimerních struktur

09:30 [Bc. Ekaterina Zubova](#) (M2, prof. Ing. Radek Cibulka, Ph.D.)

Biomimetický a organokatalytický umpolung nukleofilů tvorbou N(5)-aduktů s deriváty flavinu

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

Syntéza nových potenciálních psychofarmak

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

1,3-Dichloraceton jako stavební kámen pro přípravu primárních, sekundárních a terciárních aminů.

10:30 [Bc. Petr Bečvář](#) (M1, doc. Ing. Michal Kohout, Ph.D.)

Ultrarychlé kapalně-krystalické fotopřepínače

10:45 [Bc. Nikola Broftová](#) (M2, prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.)

Syntéza oxidovaných derivátů thiacalixarenů

11:00 [Bc. Jan Tatýrek](#) (M1, doc. Dr. Ing. Jana Hodačová)

Hybridní organokřemičitý materiál na bázi derivátu cinchoninu

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

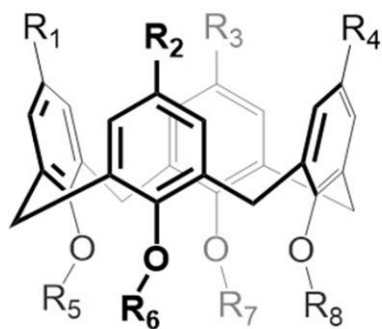
Kapalně krystalické fotopřepínače s azoskupinou

Syntéza jader založených na calix[4]arenu pro výstavbu dendrimerních struktur

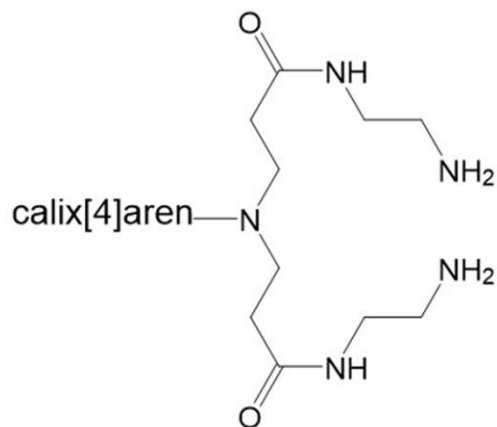
Bc. Radek Staník (M1)

Školitel: doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.

Dendrimery jsou vysoce organizované oligomerní struktury, které hrají důležitou roli v nanotechnologii, farmaceutické a medicíně chemii. Cílem mého výzkumu je syntéza základních derivátů calix[4]arenu v kónické konformaci, které by vhodnou substitucí horního nebo dolního okraje calix[4]arenového kruhu bylo možné přeměnit v ideální jádro dendrimerní struktury, a dále následná syntéza první generace dendrimery, která spočívá ve výstavbě od jádra k periférii. V mém případě se jedná o Michaelovu adici aminoderivátu na methyl-akrylát, následnou aminolýzu esterových funkcí ethylendiaminem za vzniku odpovídajících *N*-(2-aminoethyl)amidů. Posledním krokem by měla být reakce terminálních aminoskupin s isokyanáty za vzniku močovin na periférii, takže výsledný dendrimer by měl být využit jako receptor aniontů.



- | | |
|---|--|
| 1. R_{1-4} : NH_2 | R_{5-8} : Pr |
| 2. R_{1-4} : CH_2NH_2 | R_{5-8} : Pr |
| 3. R_{1-4} : H | R_{5-8} : $\text{CH}_2\text{CONHCH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2$ |
| 4. R_{1-4} : ^tBu | R_{5-8} : $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2$ |

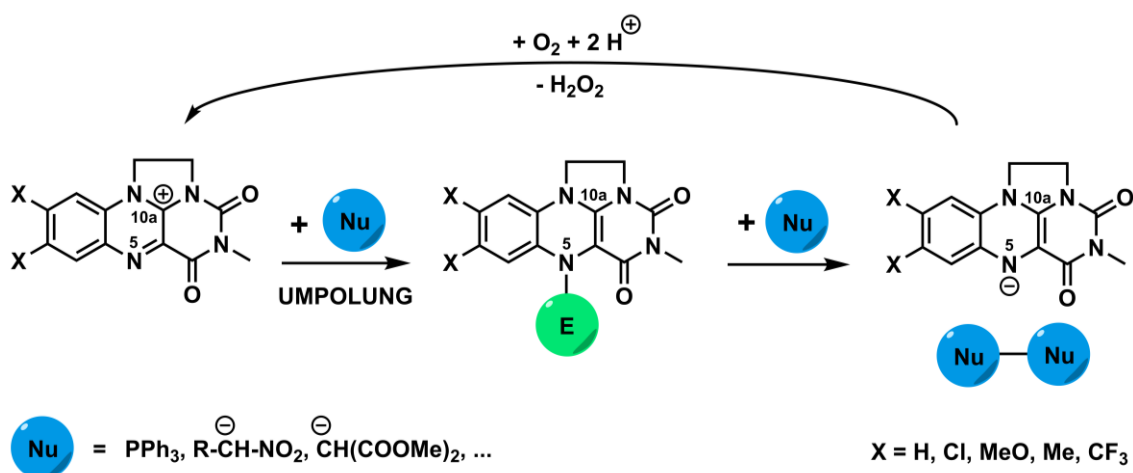


Biomimetický a organokatalytický umpolung nukleofilů tvorbou N(5)-aduktů s deriváty flavinu

Bc. Ekaterina Zubova (M2)

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

Přepólování (umpolung) patří mezi základní strategie využívané v syntéze složitějších molekul. V posledních letech významně vzrostl zájem o organokatalytické metody přepólování. Z přírody je znám například umpolung nitroethanu prostřednictvím vazby na dusík v poloze 5 flavinadenindinukleotidu (FAD), který slouží jako prostetická skupina enzymu nitroalkan oxidasy. Tato skutečnost posloužila inspirací pro návrh možného uplatnění derivátů flavinu v organokatalytickém přepólování. Na flavin se obecně mohou vázat nabitě, nenabitě, měkké i tvrdé nukleofily. Významnou pro umpolung je poloha 5 flavinového skeletu, nicméně u některých nukleofilů, zejména tvrdých, jako je například hydroxidový anion, je známa vazba do polohy 10a. V minulosti byla popsána například organokatalytická Mitsunobuova reakce s využitím flaviniové soli prostřednictvím tvorby N(5)-aduktů s trifenyfosfinem. Cílem mé práce je studovat adici rozličných nukleofilů na deriváty flavinu pomocí kvantově-chemických výpočtů a experimentálně v laboratoři, možnou reaktivitu vzniklých N(5)-aduktů a mechanismy těchto reakcí.



Syntéza nových potenciálních psychofarmak

Bc. Petr Palivec (M1)

Školitel: Ing. Radek Jurok, Ph.D.

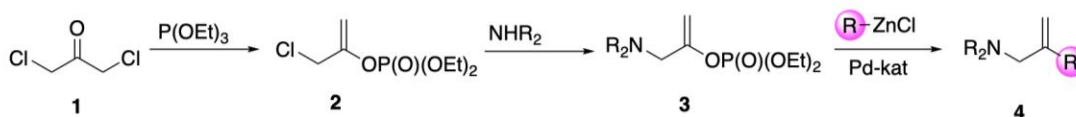
Psychické nemoci, jako klinická deprese nebo posttraumatická stresová porucha (PTSD), se poslední dobou objevují v populaci častěji než kdy dřív. Mezi léčiva používaná pro léčbu těchto poruch patří například inhibitory zpětného vychytávání serotoninu (SSRI) a inhibitory monoaminoxidázy (MAOI), které se však často potýkají s řadou nežádoucích vedlejších účinků. Mezi potenciální psychofarmaka patří také látky užívané jakožto rekreační drogy, jako je MDMA, ketamin, THC, psilocybin a mnoho dalších. Terapeutické užívání těchto látek však často naráží, kromě nežádoucích vedlejších účinků, také na problémy s legislativou. Značná část výzkumu se proto v dnešní době soustředí na hledání nových analogů těchto psychoaktivních látek se snahou zmírnit jejich nežádoucí účinky. V této práci se věnuji syntéze látek s potenciálním psychofarmakologickým využitím. Jde o analoga MDMA na bázi azulenu, syntetické deriváty ibogainu a kanabinoidy. Připravené látky budou sloužit pro *in-vitro* a *in-vivo* výzkum jejich farmakologických vlastností.

1,3-Dichloraceton jako stavební kámen pro přípravu primárních, sekundárních a terciárních aminů.

Bc. Karolína Šilhánová (M2)

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

Allylaminy reprezentované obecnou strukturou 4 jsou důležité intermediáty v organické syntéze, ale jsou také asociovány s významnou biologickou aktivitou. Proto jsem v návaznosti na obtížnou dostupnost allylaminů 4 vypracovala postup pro jejich divergentní přípravu z komerčně dostupného 1,3-dichloracetonu (1). Nejprve byl výchozí aceton 1 převeden Perkowovou reakcí na halovinyl-fosfát (2). Vinyl-fosfát 2 je reprezentativní zástupce dvojnásobně elektrofilního templátu, u kterého jsem úspěšně provedla substituci atomu chloru reakcí s aminy za vzniku fosfátu 3. U připraveného fosfátu 3 jsem následně prostudovala reaktivitu v Negishiho reakci.

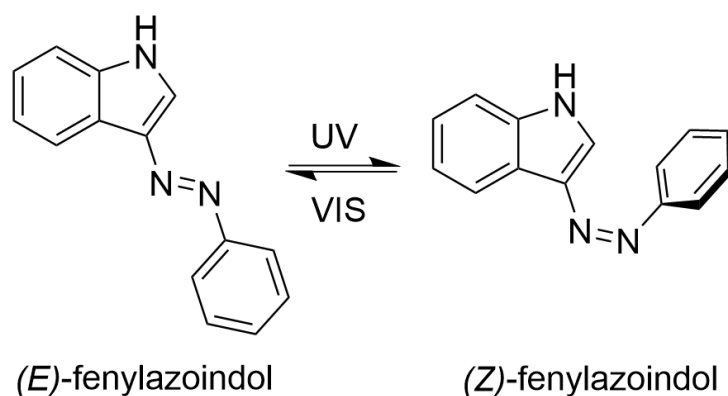


Ultrarychlé kapalně-krystalické fotopřepínače

Bc. Petr Bečvář (M1)

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

Fotopřepínače, molekuly, které dokážou měnit tvar v závislosti na ozáření ultrafialovým (UV) nebo viditelným (VIS) světlem, jsou v současnosti inkorporovány do celé řady chytrých organických materiálů, ke kterým řadíme i kapalně krystaly (LC). LC samovolně vytváří supramolekulární struktury (mesofáze), které rychle reagují na vnější podnět. Zavedení fotocitlivé jednotky do struktury LC umožňuje ovlivnit strukturu vytvořených mesofází i světlem. Jedna z nejpobulárnějších fotosenzitivních jednotek využívaných v syntéze LC je azoskupina, typicky v podobě azobenzenové jednotky. Azobenzenový fragment může být laterálně substituován, čímž lze získat látky s velmi stabilním UV světlem indukovaným Z-isomerem, což je vhodné pro aplikace v optických pamětech. Na druhou stranu, LC vykazující rychlou termální relaxaci $Z \rightarrow E$ lze potenciálně využít pro tvorbu optických přepínačů. V této práci prezentujeme první výsledky syntézy ultrarychlých kapalně-krystalických fotopřepínačů založených na struktuře fenylazoinдолu (Obr. 1). Bude diskutována syntéza a optické vlastnosti vybraných laterálně substituovaných fenylazoinдолů. Obr. 1 Světlem iniciovaná isomerizace fenylazoinдолu

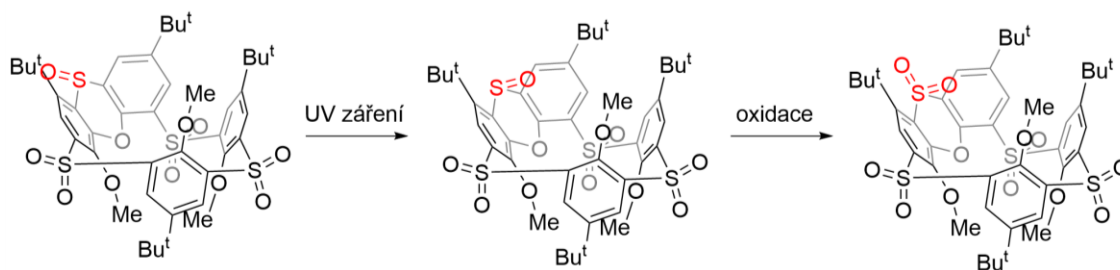


Syntéza oxidovaných derivátů thiacalixarenů

Bc. Nikola Broftová (M2)

Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Vhodnou oxidací sirných můstků thiacalixarenů zavedeme do thiacalixarenového skeletu sulfonylovou skupinu, která následně může sloužit jako direktivní skupina při *ortho* lithiacích, či jako elektronakceptorní skupina při nukleofilních aromatických substitucích. V této práci bylo využito fotochemických reakcí pro syntézu různě oxidovaných thiacalixarenových derivátů s přesmyknutým základním skeletem. Nejprve byl objasněn mechanismus oxidace sirných můstků u fenoxathiinového derivátu s cílem maximalizovat výtěžek plně oxidovaného tetra(sulfonylového)derivátu. Vhodnou úpravou fotochemických podmínek reakce se dále povedlo připravit unikátní fenoxathiinový makrocyklus obsahující kombinaci neoxidovaného sirného můstku a plně oxidovaných sulfonylových můstků. Fotochemické reakce byly následně využity i při syntéze oxidovaných thiacalixarenových derivátů bez přesmyknutého základního skeletu s cílem syntetizovat monosulfonylthiacalixaren.



Hybridní organokřemičitý materiál na bázi derivátu cinchoninu

Bc. Jan Tatýrek (M1)

Školitel: doc. Dr. Ing. Jana Hodačová

Projekt se zabývá přípravou a využitím hybridního organicko-anorganického křemičitého materiálu při heterogenní enantioselektivní katalýze. Cílem práce byla syntéza bis(triethoxysilanového) prekurzoru na bázi derivátu cinchoninu, ze kterého byly následně připraveny dva hybridní materiály. Katalytické vlastnosti těchto materiálů byly otestovány na enantioselektivních chlorolaktonizačních reakcích třech různých 4-arylpent-4-enových kyselin (Schéma 1). Nejlepšího výsledku bylo dosaženo u chlorolaktonizace 4-fenylpent-4-enové kyseliny katalyzované materiálem M2, kde byl výsledný lakton získán ve výtěžku 39 % a 70 % *ee*. Dle dostupných informací se jedná o první heterogenní katalyzátory enantioselektivní chlorolaktonizace.

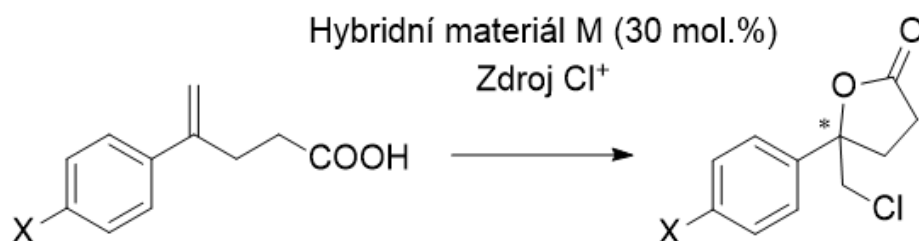


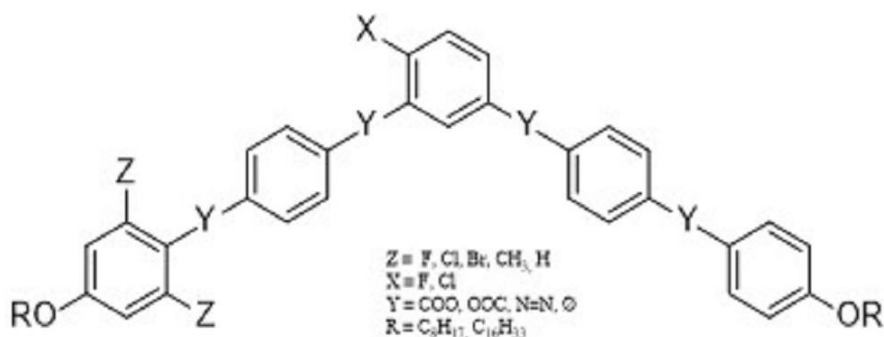
Schéma 1 - Chlorolaktonizace

Kapalně krystalické fotopřepínače s azoskupinou

Bc. Diana Jágerová (M2)

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

Kapalné krystaly (mesogeny) jsou unikátní svou samoskladbou a tvorbou mesofází, které kombinují vlastnosti anisotropního krystalu a isotropní kapaliny. Snadno tak reagují na vnější vlivy jako je teplota, tlak či elektrické pole. Zavedení fotosensitivní jednotky do struktury mesogenu navíc umožní i modulaci mesofáze zářením o vhodné vlnové délce. V naší laboratoři se již delší dobou zabýváme přípravou nových kapalně krystalických fotopřepínačů lomeného tvaru, které potenciálně mohou nalézt uplatnění v inovativních optických a optoelektrických zařízeních. Cílem této práce je syntéza a studium kapalně krystalických fází dvou sérií fotopřepínačů na bázi 4-fluor-3-hydroxybenzoové kyseliny a 4-chlorresorcinolu. Studovali jsme vliv laterální substituce (H, F, Cl, Br, CH₃), použití různých spojek (esterové, bifenylové) a délky terminálních alkoxylových řetězců (oktyloxy, hexadecyloxy) na mesomorfní a fotochemické vlastnosti cílových látek. Všechny připravené materiály obsahují fotosensitivní azoskupinu, která podléhá fotochemické *E/Z* izomerizaci a umožňuje tak ovlivnit uspořádání mesofáze externím UV nebo Vis zářením.



Organická chemie magisterská III

MÍSTO: MSTEAMS

KOMISE

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

Ing. Bc. Michal Himl, Ph.D. – organizační tajemník

prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.

Ing. Ondřej Kunderát, Ph.D.

Ing. Markéta Rybáčková, Ph.D.

RNDr. Pavel Slanina (Synthon)

Ing. Martin Valík, Ph.D. (Teva)

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:15 [Bc. Matěj Poupě](#) (M2, prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.)

Stabilizace konformace calix[4]arenů a calix[5]arenů

09:30 [Bc. Aleš Krčil](#) (M2, doc. Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D.)

Syntéza substituovaných aminů z 2-aminoalkoholů a organokovových činidel

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

Syntéza 5-alkyl-4-amino[2.2]paracyklofanů

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

Syntéza substituovaných 1,3-fenylen-močovinových makrocyklů

10:30 [Bc. Jana Poláchová](#) (M2, doc. Ing. Michal Kohout, Ph.D.)

Syntéza fluoro-substituovaných lomených kapalných krystalů

10:45 [Bc. Pavel Kraina](#) (M1, Ing. Zlatko Janeba, Ph.D.)

Replacement of purine bases in PNP inhibitors

11:00 [Bc. Magdaléna Labíková](#) (M2, doc. Ing. Michal Kohout, Ph.D.)

Syntéza chirálních katexů a jejich využití v kapalinové chromatografii

11:15 [Bc. Thi Phuong Le](#) (M2, Mgr. Jiří Kaleta, Ph.D.)

Polyhalogenované bicyklo[1.1.1]pentany

11:30 [Bc. Kateřina Jochová](#) (M1, Ing. Petra Ménová, Ph.D.)

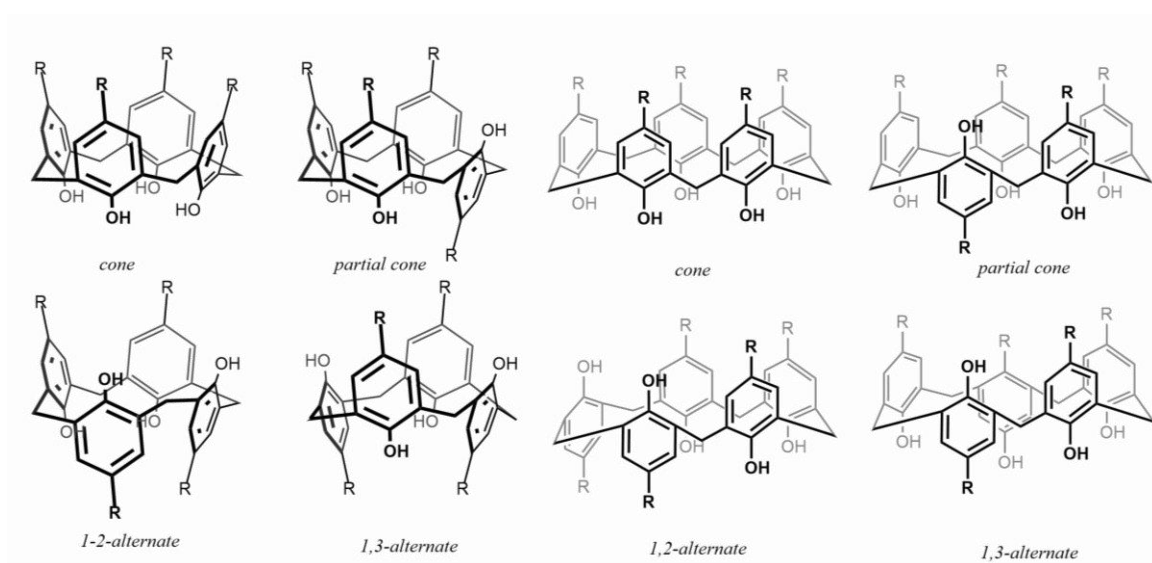
Modified nanoparticles for DC-SIGN targeting

Stabilizace konformace calix[4]arenů a calix[5]arenů

Bc. Matěj Poupě (M2)

Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Calix[4]areny a calix[5]areny jsou známy ve 4 konformacích: kónické, částečně kónické, 1,2-střídavé a 1,3-střídavé. Calix[4]areny mohou být zafixovány v jedné z konformací při zavedení alespoň propylového zbytku na jejich dolní okraj; zafixování calix[5]arenů vyžaduje přítomnost stericky náročných substituentů jak na horním, tak na dolním okraji. V této práci jsem se věnoval konformační stabilizaci calix[4]arenů a calix[5]arenů. V případě calix[4]arenů jsem vycházel z konformačně nestabilního methoxysubstituovaného calix[4]arenu, který jsem derivatizoval v meta-poloze a následně podrobil Bischler-Napieralského reakci s cílem dosáhnout konformační stability přemostěním horního okraje. Konformačně stabilní calix[5]aren se podařilo připravit, bohužel ale s velmi nízkým výtěžkem.

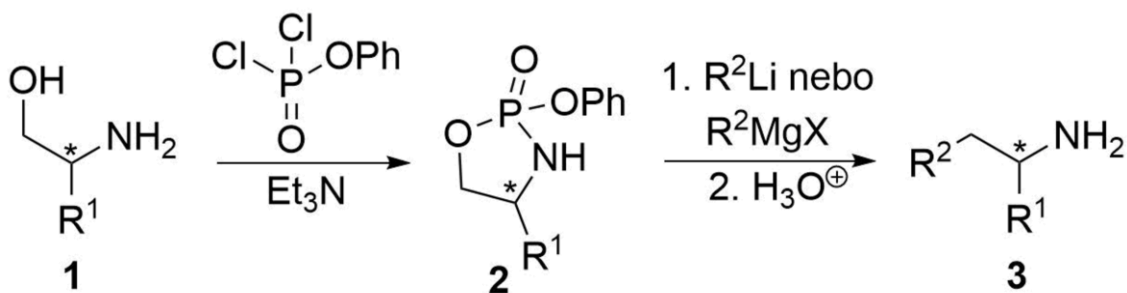


Syntéza substituovaných aminů z 2-aminoalkoholů a organokovových činidel

Bc. Aleš Krčil (M2)

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

Aminy jsou organické sloučeniny formálně odvozené od amoniaku nahrazením vodíkových atomů za uhlíkové substituenty. Celá řada aminů, zejména chirálních aminů, je součástí přírodních látek a léčiv. Chirální aminy se také využívají v asymetrické syntéze. Proto je cílem mé práce vypracovat nový postup pro přípravu chirálních aminů. Navržený postup kombinuje snadnou dostupnost aminů **1** a reaktivitu fosfátů. Ve svém návrhu předpokládám, že výchozí aminy **1** budou převedeny na fosforamidáty **2**, které budou reakcí s organolithnými a Grignardovými činidly převedeny na koncové produkty **3**.

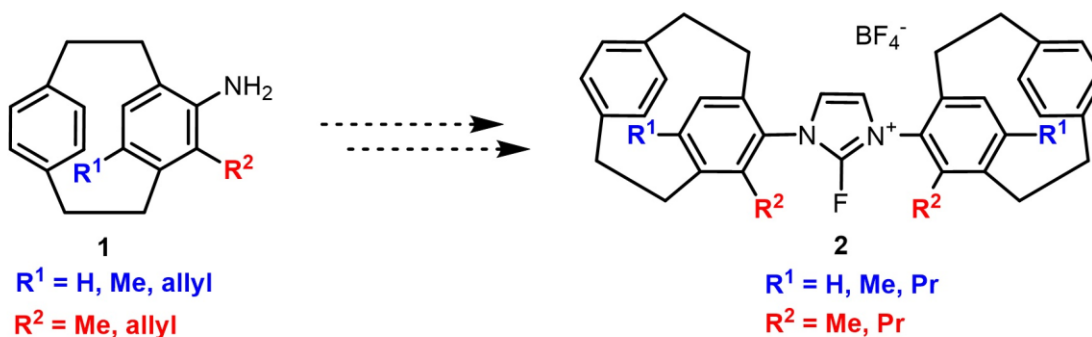


Syntéza 5-alkyl-4-amino[2.2]paracyklofanů

Bc. Vít Jeníček (M1)

Školitel: Ing. Markéta Rybáčková, Ph.D.

Deriváty [2.2]paracyklofanu jsou díky své planární chiralitě využívány v organické syntéze jako stavební bloky pro enantioselektivní katalyzátory. Ve své práci se zabývám přípravou aminoparacyklofanů **1**, které by měly vést k analogům deoxyfluoračních činidel **2** známých jako AlkylFluor a PhenoFluor. Substituce alkylovým řetězcem v *ortho*-poloze k atomu dusíku (R^2 = alkyl) by měla zvýšit stabilitu intermediárních *N*-heterocyklických karbenů. K přípravě aminoderivátů **1** jsem použil dva syntetické postupy vycházející z komerčně dostupného [2.2]paracyklofanu. První z nich využívá jako klíčový intermediát 4-methyl[2.2]paracyklofan, druhý je založen na aza-Claisenově přesmyku *N*-allyl-4-aminoparacyklofanů.

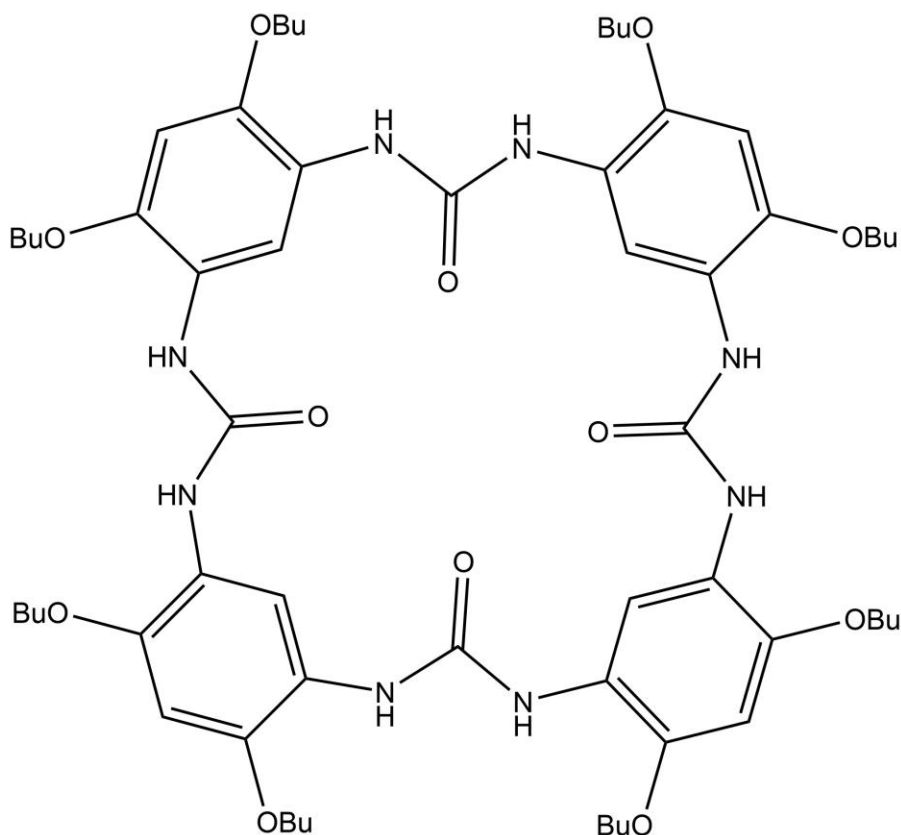


Syntéza substituovaných 1,3-fenylen-močovinových makrocyklů

Bc. Marie Zvěřinová (M2)

Školitel: Ing. Bc. Michal Himl, Ph.D.

Disubstituované 1,3-fenylen-močovinové makrocykly jsou nová skupina symetrických neutrálních látek, které mají schopnost komplexovat nejrůznější ionty. Základní skelet je tvořen čtyřmi benzenovými jádry a ta jsou vzájemně propojena čtyřmi močovinovými jednotkami. Aromatická jádra mohou být derivatizována vhodnými substituenty. Cílem práce je syntéza dibutoxy substituovaného 1,3-fenylen-močovinového makrocyklu a porovnání jeho komplexačních vlastností s podobnými makrocykly připravenými v naší laboratoři. Diskutovány budou zejména optimalizace jednotlivých kroků postupné syntézy makrocyklu.

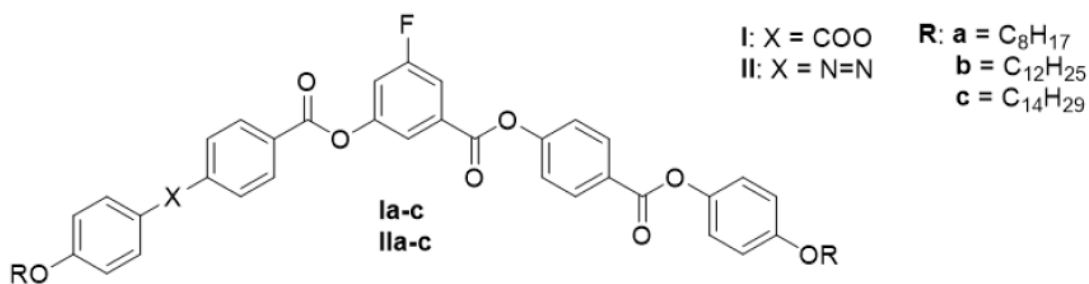


Syntéza fluoro-substituovaných lomených kapalných krystalů

Bc. Jana Poláchová (M2)

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

Kapalné krystaly představují unikátní stav hmoty, jejíž vlastnosti se nachází na pomezí pevné a kapalné fáze. Jsou schopny reagovat na vnější podněty, jako jsou světlo, magnetické či elektrické pole, a díky tomu nachází uplatnění v širokém spektru aplikací zahrnujících jak optické displeje, tak řízené uvolňování léčiv v organismu. Cílem mé práce je syntéza lomených kapalných krystalů (Ia-c, IIa-c) s využitím 3-fluor-5-hydroxybenzoové kyseliny jako centrálního jádra. U cílových achirálních lomených mesogenů budeme studovat vliv délky alkylových řetězců, počtu esterových spojek a přítomnosti fotosenzitivní azoskupiny v postranních ramenech na mezomorfní chování, především vznik nematické fáze a makroskopicky chirální smectické fáze.

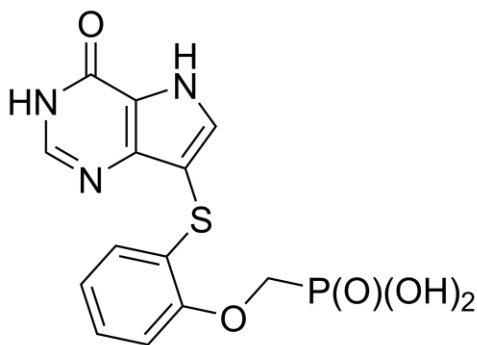


Replacement of purine bases in PNP inhibitors

Bc. Pavel Kraina (M1)

Školitel: Ing. Zlatko Janeba, Ph.D.

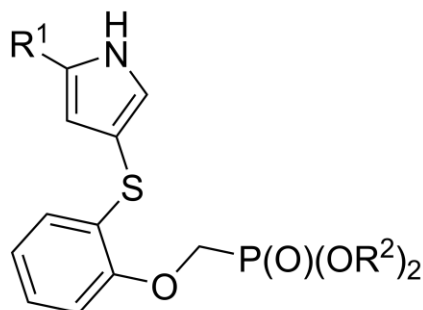
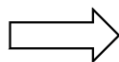
Research of purine nucleoside phosphorylase (PNP) inhibitors started in the 90s, however, since then, most compounds failed in clinical trials due to their low activity, solubility, or bioavailability. In recent years, novel PNP inhibitors with nanomolar activity were developed in our research group. These inhibitors are based on hypoxanthine moiety which modifications have not been explored yet. This work aims to design and synthesize novel PNP inhibitors with a modified base using computational methods in order to achieve better pharmacokinetic properties with preserved biological activity.



JS-196

*h*PNP IC₅₀ = 22 nM

*Mt*PNP IC₅₀ = 31 nM



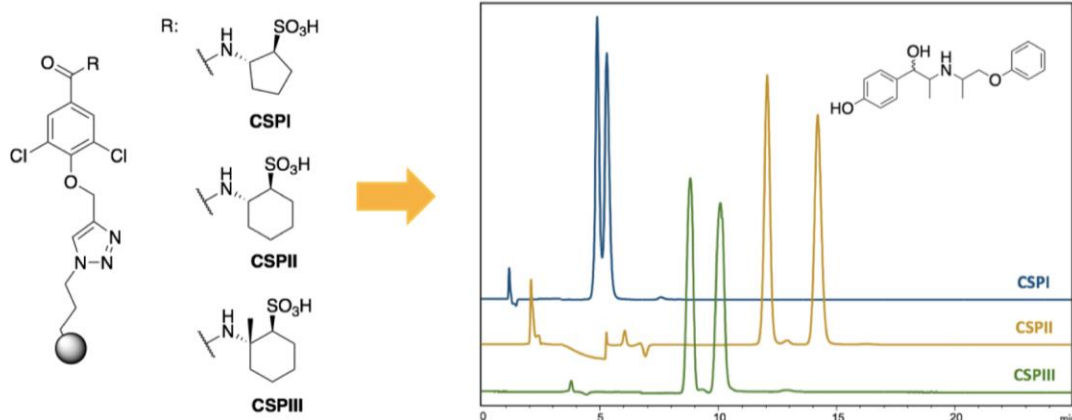
Syntéza chirálních katexů a jejich využití v kapalinové chromatografii

Bc. Magdaléna Labíková (M2)

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

Vysokoúčinná kapalinová chromatografie (HPLC) s použitím chirálních stacionárních fází je bezesporu jednou z nejrozšířenějších metod separace enantiomerů, a to jak v analytickém, tak v preparativním měřítku. V současné době je k dispozici více než 100 typů chirálních stacionárních fází, které umožňují separaci téměř libovolného racemátu. Výjimku tvoří ionizované a ionizovatelné látky, které nejsou vhodnými analyty pro většinu komerčně dostupných chirálních chromatografických kolon. Sloučeniny tohoto typu lze však efektivně separovat na chirálních ionexech.¹ Cílem této práce je syntéza chirálních stacionárních fází povahy katexů, které ve své struktuře obsahují opticky čistou 2-aminocykloalkan-1-sulfonovou kyselinu jako chirální jednotku. Připravené chirální selektory byly imobilizovány na vhodně modifikovaný silikagel a získané chirální sorbenty byly naplněny do chromatografických kolon. Chromatografické vlastnosti připravených stacionárních fází byly vyhodnoceny vysokoúčinnou kapalinovou chromatografií při separaci racemických směsí biologicky aktivních aminů.

1 Kohout, M.; Wernisch, S.; Tůma, J.; Hettegger, H.; Pícha, J.; Lindner, W. J. *Sep. Sci.* 2018, 41, 1355.

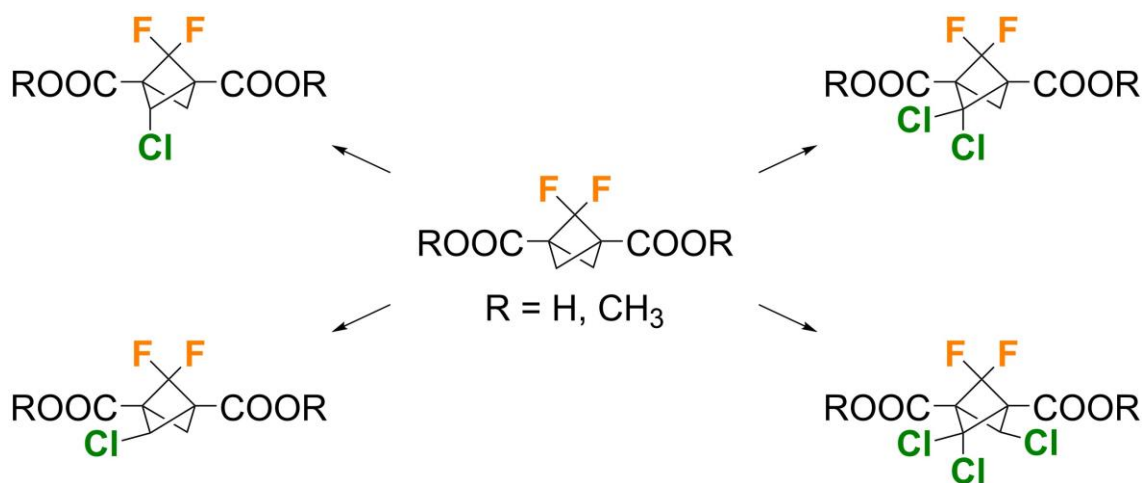


Polyhalogenované bicyklo[1.1.1]pentany

Bc. Thi Phuong Le (M2)

Školitel: Mgr. Jiří Kaleta, Ph.D.

Chemie bicyklo[1.1.1]pentanu (dále BCP) zažívá v posledních třech letech renesanci, což je zjevné z více jak 75 originálních publikací či rozsáhlých review. Téměř veškeré tyto práce se však zabývají chemií v *bridgehead* (neboli 1,3-) pozicích. Přímá substituce atomů vodíku v můstkových (neboli 2,4,5-) polohách je velmi málo prozkoumanou oblastí, což je jasně demonstrováno pouze dvěma publikacemi za posledních 20 let. Prozatím se ukazuje, že pouze radikálová chlorace je dostatečně selektivní metoda vedoucí k zavedení až čtyř atomů chloru na napnutý BCP skelet. Jelikož 2,2-difluorbicyklo[1.1.1]pentan-1,3-dikarboxylová kyselina (F_2BCP) je jedinou doposud známou látkou nesoucí dva atomy halogenu jiné než chlor, rozhodli jsme se prozkoumat její chování při radikálových chloracích a v kombinaci s radikálovou dechlorací se nám podařilo připravit čtyři zcela nové polyhalogenované deriváty BCP. Jejich struktury byly potvrzeny rentgenovou difrakcí a pK_A příslušných kyselin byly stanoveny kapilární elektroforézou. Rozsáhlé DFT výpočty sloužily k objasnění selektivní tvorby čtyř z devíti možných izomerů. Každá tato látka pak může být dále začleněna do složitějších systémů s využitím již velmi dobře známé chemie na *bridgehead* pozicích.

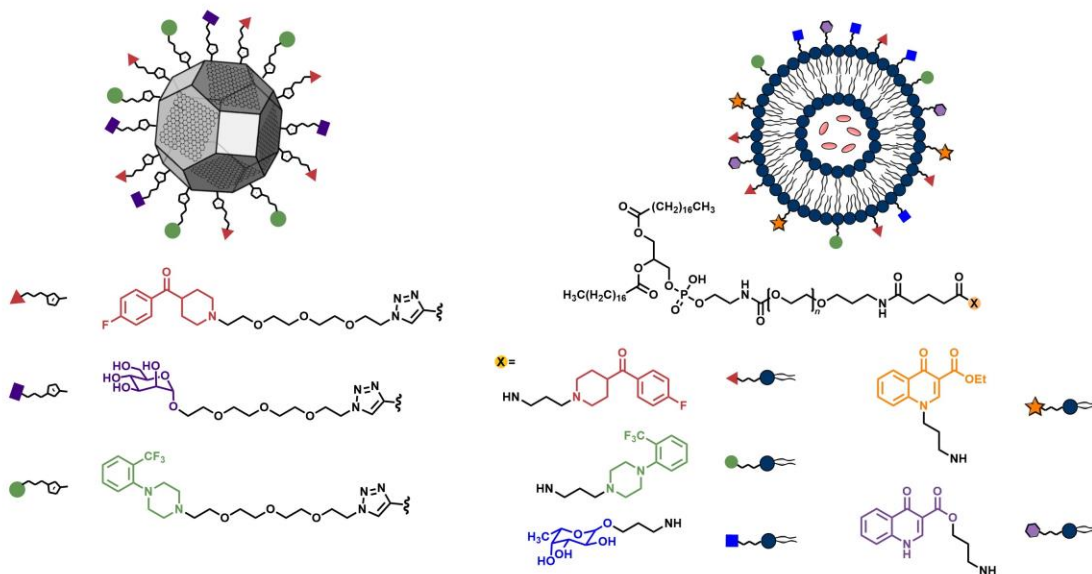


Modified nanoparticles for DC-SIGN targeting

Bc. Kateřina Jochová (M1)

Školitel: Ing. Petra Ménová, Ph.D.

DC-SIGN is a lectin receptor found on the surface of dendritic cells and macrophages. Its interaction with carbohydrates on the surface of pathogens is key for the initiation of immune response. A recent study has identified several small molecules (fragments) which show a high affinity for DC-SIGN. Several DC-SIGN ligands were synthesized and used for DC-SIGN targeting in our two projects. The aim of the first project is to visualize cancerous lymph nodes using fluorescent nanodiamonds. Their surface can be chemically modified to enable attachment of DC-SIGN ligands. Such modified nanodiamonds bind to the DC-SIGN on the surface of tumour-associated macrophages. High concentration of macrophages in nodes is linked to a metastatic tumour. Thanks to the fluorescent properties of nanodiamonds, the nodes can be easily distinguished from the surrounding tissue. In the second project, I am developing modified liposomes for targeted drug delivery to dendritic cells. Being modified with selective DC-SIGN ligands, the liposomes could deliver their cargo directly to the dendritic cells, which is, among others, a promising strategy to increase the efficacy of vaccines.



Organická chemie magisterská IV

MÍSTO: MSTEAMS

KOMISE

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

doc. Ing. Michal Kohout, Ph.D. – organizační tajemník

Ing. Zlatko Janeba, Ph.D. (ÚOCHB AV ČR)

Mgr. et Mgr. Pavla Perlíková, Ph.D.

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

Ing. Martin Káš (Symeres)

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:15 [Bc. Kateřina Svobodová](#) (M1, Ing. Bc. Michal Himl, Ph.D.)

Syntéza substituovaných fenylen-močovinových makrocyclů

09:30 [Bc. Martin Šetek](#) (M2, Ing. Ondřej Kunderát, Ph.D.)

Syntéza látek s novým typem světlem přepínatelných skupin a studium jejich vlastností

09:45 [Bc. Jakub Dávid Malina](#) (M2, Ing. Jiří Tůma, Ph.D.)

Opticky čisté spiropyrány: od teorie k experimentu

10:00 [Bc. Petra Míková](#) (M2, prof. Ing. Radek Cibulka, Ph.D.)

Deazaflaviny vázané na pevném nosiči pro fotokatalytické redukce

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

Fluoridy amoniových solí a difluorsilikáty jako nukleofilní fluorační činidla

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

Synthesis and Characterization of Twice-As-Smart G4 Probes

11:00 [Bc. Michal Churý](#) (M1, doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.)

Dendritické větvení calix[4]arenového skeletu pro syntézu aniontových receptorů

11:15 [Bc. Marika Novotná](#) (M2, doc. Dr. Ing. Jana Hodačová)

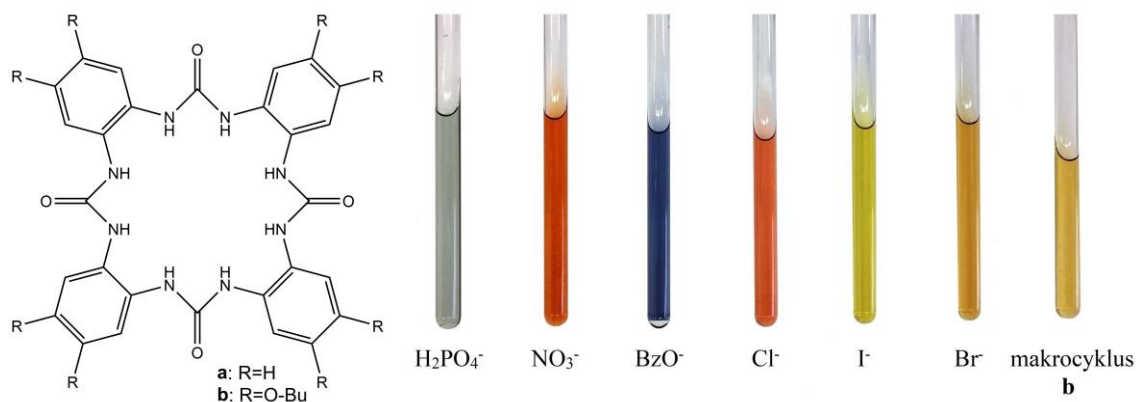
Syntéza hybridních organokřemičitých materiálů na bázi chininu a jejich využití při enantioselektivní Sharplessově dihydroxylaci

Syntéza substituovaných fenylen-močovinových makrocyklů

Bc. Kateřina Svobodová (M1)

Školitel: Ing. Bc. Michal Himl, Ph.D.

1,2-Disubstituované fenylen-močovinové makrocykly jsou poměrně novou skupinou vysoce symetrických neutrálních látek, které díky své schopnosti komplexovat anionty nacházejí uplatnění v oblasti supramolekulární chemie. Základní skelet těchto makrocyklů je tvořen čtyřmi benzenovými jádry, která jsou vzájemně propojena čtyřmi močovinovými jednotkami. V rámci této práce byl proveden pokus o zopakování již publikované syntézy fenylen-močovinového makrocyklu. Syntéza byla provedena s malými odchylkami od publikovaného postupu a požadovaný makrocyklus se podařilo úspěšně připravit. Dále byl analogickou cestou úspěšně připraven nový makrocyklus, který má na každém benzenovém jádře základního skeletu navázány dvě butoxy skupiny. Pro tuto látku byla provedena také kvalitativní zkouška komplexačních vlastností pomocí ^1H NMR měření. Kromě viditelných posunů signálů v ^1H NMR spektrech došlo po přidavku roztoků jednotlivých aniontů k roztoku makrocyklu také k barevným změnám. Další využití těchto makrocyklů bude diskutováno.



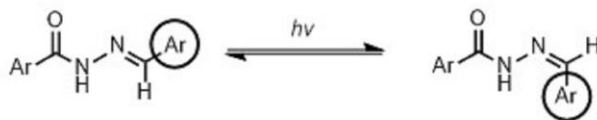
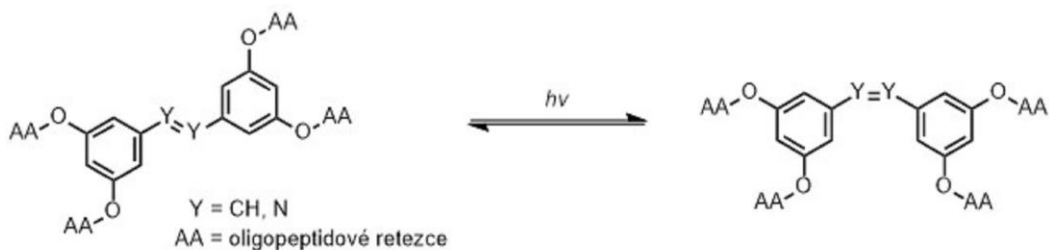
Syntéza látek s novým typem světlem přepínatelných skupin a studium jejich vlastností

Bc. Martin Šetek (M2)

Školitel: Ing. Ondřej Kunderát, Ph.D.

Tato práce se zabývá přípravou sloučenin, které obsahují ve své struktuře dvojnou vazbu, a studiem jejich schopnosti měnit konfiguraci dvojné vazby (*cis/trans*) po dodání energie ve formě světla. Konkrétně se jedná o alkeny, azosloučeniny a acylhydrazony. Výše zmíněné alkeny a azosloučeniny obsahují arylly substituované především elektrondonorními skupinami a zmíněné acylhydrazony obsahující rozdílné aromatické systémy. Při přípravě substituovaných alkenů bylo mj. využito Wittigovy reakce a Suzukiho couplingu. V syntéze substituovaných azosloučenin byla využita diazotace a následný azo-coupling nebo redukce substituovaných nitrobenzenů. Acylhydrazony se připravovaly reakcí hydrazidů s aldehydem. Tímto způsobem připravené alkeny/azosloučeniny/acylhydrazony lze pak využít jako syntetické světelné spínače, které se teprve v nedávné době začaly uplatňovat v oblasti biologie, farmakologie a medicíny. Využitelnost zmíněných sloučenin spočívá např. v ovlivnění uzavírání a otevírání iontových kanálů nebo je lze využít k povrchové modifikaci grafenu.

Cílové stavební jednotky:



Ar = aryl, heteroaryl

Opticky čisté spiropyrány: od teórie k experimentu

Bc. Jakub Dávid Malina (M2)

Školiteľ: Ing. Jiří Tůma, Ph.D.

Spiropyrány sú fotochrómne zlúčeniny s pozoruhodnými vlastnosťami. Ich charakteristikou je, že po ožiarení výrazne menia nielen svoju geometriu ale aj polaritu. Vplyvom UV žiarenia dochádza k otvoreniu spiropyránu, ktorý sa mení na merocyanínovú formu. Táto reakcia je reverzibilná a vplyvom viditeľného svetla dochádza k spätnej cyklizácii. Spirouhlík v molekule je chirálny a v roztoku dochádza k jeho spontánnej racemizácii (Schéma 1). Avšak súčasné aplikácie v materiálovej chémii vyžadujú opticky čistý materiál. V predošlej štúdii sme zistili, že rezolúcia jednotlivých stereoizomérov spiropyránu je dosiahnuteľná vytvorením druhého centra chiralít v indolovom skelete zavedením benzylovej skupiny substituovanej v *para*-polohe rôznymi skupinami. Spiropyrány sa tak vyskytujú vo forme diasteromérov s odlišnou energiou. V prípade veľkého rozdielu energií diastereomérov je jeden z nich energeticky preferovaný čím sa dosiahne optická čistota materiálu (Schéma 2). Cieľom práce je syntéza spiropyránov substituovaných fenylovou skupinou, ktorá je v *para*-polohe substituovaná vybranými funkčnými skupinami a následné určenie diastereomérneho pomeru (Schéma 3). Vplyv elektrónových a sterických efektov substituentov v *para*-polohe na diastereomérny pomer bol študovaný pomocou MTD a DFT výpočtov.

Schéma 1)

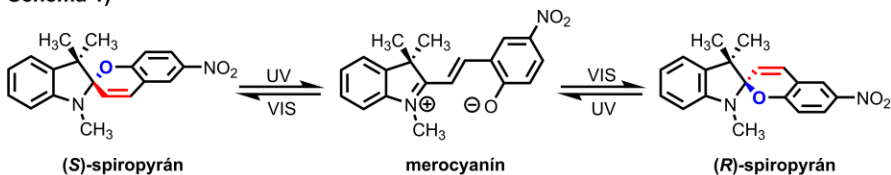


Schéma 2)

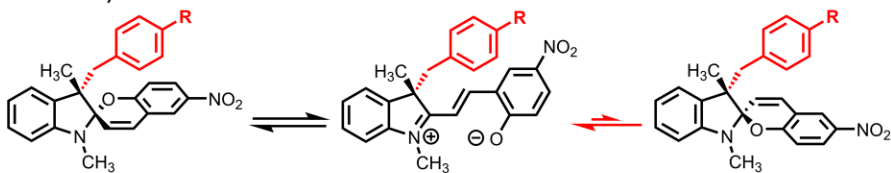
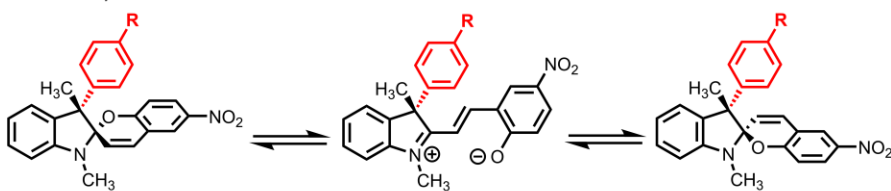


Schéma 3)



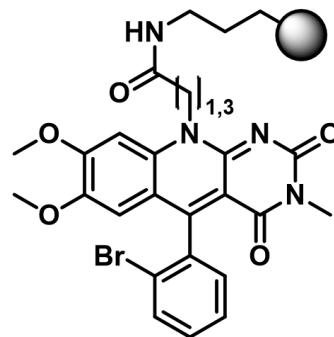
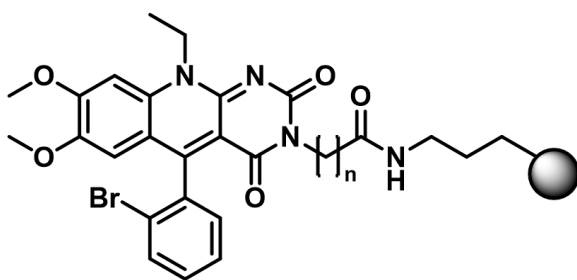
R = vybrané EWG a EDG skupiny

Deazaflaviny vázané na pevném nosiči pro fotokatalytické redukce

Bc. Petra Míková (M2)

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

Flaviny se zatím ve fotokatalýze využívaly výhradně k oxidacím, avšak v přírodě se podílí i na fotoredukčních procesech. Pro fotoredukční reakce jsou namísto flavinů vhodnější deazaflaviny, které mají pro redukce vhodnější redoxní vlastnosti. Oxidační potenciály radikálu deazaflavinů v excitovaném stavu dosahují hodnot -3 V a nižších a jsou tedy srovnatelnými či dokonce silnějšími redukčními činidly než sodík. Proto je lze využít i pro redukce obtížně redukovatelných látek, jako je například *p*-chlor- a *p*-bromanisol. Při reakci dochází ke vzniku aryl radikálu, který poté přijímá proton z rozpouštědla nebo kation radikálu DIPEA. Vzniklý aryl radikál také může reagovat s areny nebo heteroaromatickými sloučeninami ve smyslu C-C couplingu. Tyto reakce však probíhají s mnohem nižší konverzí oproti dehalogenačním reakcím, pokles účinnosti je pravděpodobně způsoben zhášením katalyzátoru vzniklým produktem. Řešením by mohlo být vytvoření heterogenního katalyzátoru, který by byl následně použit v průtočném systému. Ve své práci se věnuji přípravě deazaflavinů, které jsou pomocí amidické vazby vázané na nanočásticích MCM-41 a jejich využití pro fotodehalogenační reakce a fotokatalytické C-C couplingy.

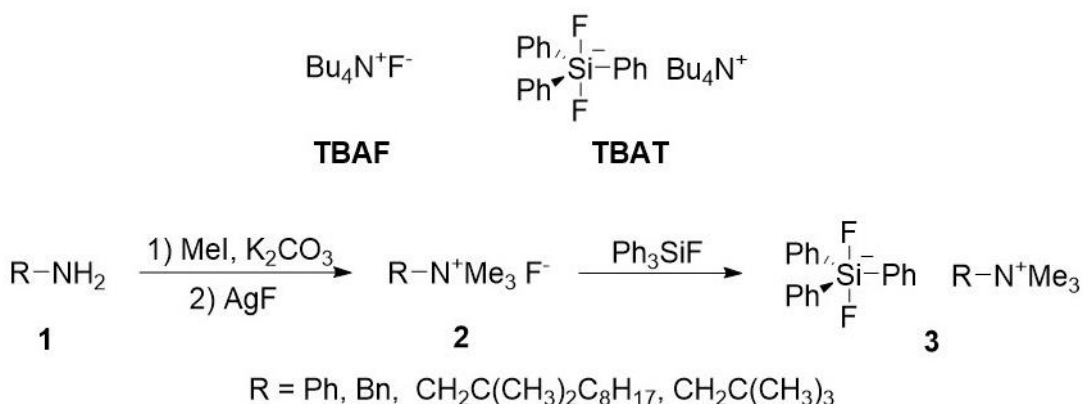


Fluoridy amoniových solí a difluorsilikáty jako nukleofilní fluorační činidla

Bc. Michal Trojan (M1)

Školitel: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Organické sloučeniny obsahující jeden nebo více atomů fluoru hrají důležitou roli jak v organické chemii, tak i ve farmaceutickém průmyslu. Mezi nejpoužívanější fluorační činidla patří tetrabutylamonium-fluorid (TBAF), jeho nevýhodou je však značná bazicita fluoridového aniontu, která vede ke vzniku vedlejších eliminačních produktů a rozkladu činidla na tetrabutylamonium-hydrogendifluorid. Méně bazickým činidlem je tetrabutylamonium-trifenyldifluorsilikát (TBAT), který poskytuje převážně produkty substituce a k výše uvedenému rozkladu nedochází. Cílem mé práce byla příprava nových fluoračních činidel 2 a 3, derivátů TBAF a TBAT, které neobsahují nestabilní butylové skupiny. Trimethylamonium-fluoridy 2 jsem připravil reakcí primárních aminů 1 s přebytkem methyljodidu, následovanou výměnou jodidového aniontu za anion fluoridový působením fluoridu stříbrného. Reakce fluoridů 2 s trifenylfluorsilanem pak vedla ke vzniku série difluorsilikátů 3. V další části práce jsem se zabýval studiem reaktivity připravených fluoračních činidel s modelovými primárními a sekundárními alkylbromidy a alkyl-mesyláty. Sledoval jsem dosaženou konverzi a poměr produktů substituce a eliminace.

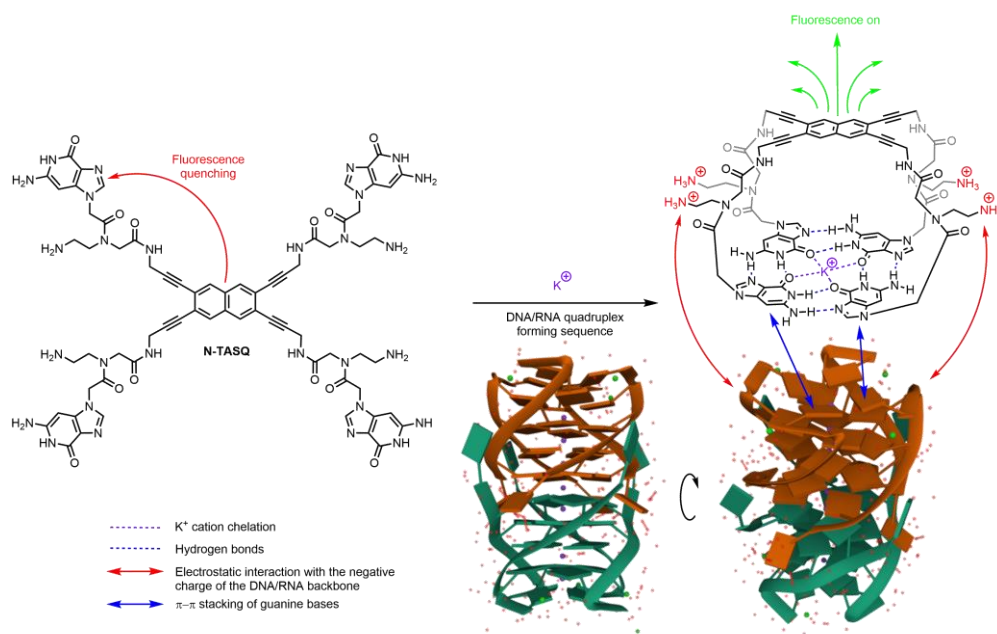


Synthesis and Characterization of Twice-As-Smart G4 Probes

Bc. Jiří Ledvinka (M2)

Školitel: Ing. Petra Ménová, Ph.D.

Secondary structures highly contribute to DNA properties such as stability or gene regulation. In this work, we focused on G-quadruplex (G4) which forms as a planar or helical complex in guanine-rich DNA sequences. It was shown that the G4 occurrence is highly organized in the human genome: G4s occur predominantly in gene promoters, replication origins and at telomeric regions, where they protect ends of chromosomes. They serve as mitotic clocks, limiting the number of cell divisions and triggering cell death after the limit is reached. Telomeres are thus implicated in both cancer and ageing process. Indeed, several G4-mediated anticancer strategies have been proposed and are being intensively studied. In our group, several G4 probes have been synthesized and used in a number of biological studies. The aim of my work was optimization of the synthesis of the most promising G4 probe, N-TASQ, to meet its high need for biochemical studies. In addition, the synthesis of several N-TASQ derivatives is under way. These probes will be characterised in terms of affinity, selectivity and biophysical and imaging properties to better understand complex nature of probe-G4 interaction.

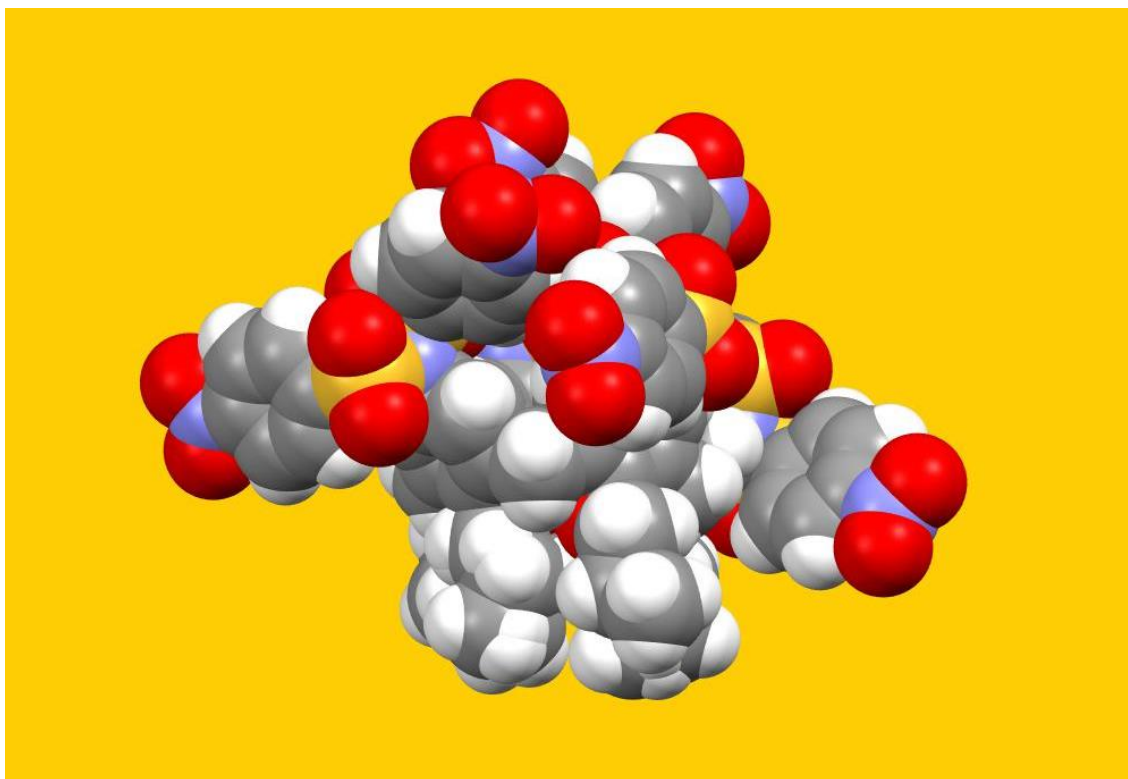


Dendritické větvení calix[4]arenového skeletu pro syntézu aniontových receptorů

Bc. Michal Churý (M1)

Školitel: doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.

Calixareny jsou makrocyclické sloučeniny, známé především pro své komplexační vlastnosti. Tato práce se zabývá dendritickým větvením tetraaminoderivátů calix[4]arenů pomocí *p*-nitrobenzensulfonylchloridu. Touto cestou byly úspěšně syntetizovány dendrimery 1. generace na třech ze čtyř možných atropoisomerů calix[4]arenu, z nichž byly dva podrobeny rentgenostrukturní analýze. Po redukci nitroskupin na aminy by vzniklé struktury měly sloužit k syntéze dendrimerů 2. generace, a kromě toho také jako prekurzory potenciálních aniontových receptorů na bázi močoviny.

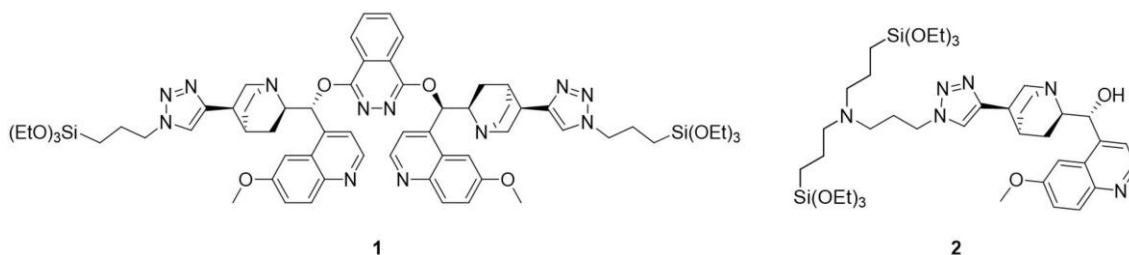


Syntéza hybridních organokřemičitých materiálů na bázi chininu a jejich využití při enantioselektivní Sharplesově dihydroxylaci

Bc. Marika Novotná (M2)

Školitel: doc. Dr. Ing. Jana Hodačová

Hybridní organicko-anorganické křemičité materiály nalézají využití jako heterogenní katalyzátory enantioselektivních reakcí. Náplní této práce je syntéza bis(triethoxysilanových) precursorů 1 a 2, ze kterých byly následně připraveny přemostěné organokřemičité materiály. Z precursoru 1 s ftalazinovou spojkou byl syntetizován kompaktní hybridní materiál a materiál ve formě nanokuliček. Oba typy katalyzátorů byly využity při enantioselektivní Sharplesově dihydroxylaci aromatických a alifatických alkenů. Výsledky provedených dihydroxylací byly porovnány s katalyzátory na bázi cinchoninu a s homogenními chininovými katalyzátory.



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](#)

Organická a farmaceutická technologie I

MÍSTO: A01

KOMISE

prof. Ing. Libor Červený, Dr.Sc. (předseda)

Ing. Iva Paterová, Ph.D.

Ing. Jiří Trejbal, Ph.D.

Ing. Jan Patera, Ph.D.

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

PROGRAM

09:00 **zahájení**

[Bc. Jakub Bachmaier](#) (M2, Ing. Maria Kotova, Ph.D.)

Hydrogenace 2-fenylakrylové kyseliny

[Bc. Michal Drahozal](#) (M2, prof. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.)

Optimalizace systému hydrofobního léčiva impregnovaného v hydrofilní matici

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

Melatonin - nejen lék na spánek

[Bc. Michaela Martínková](#) (M2, Ing. Jan Patera, Ph.D.)

Determinace příčiny rozdílného chování odlišných šarží ezetimibu

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

Kombinovaný nanočásticový systém pro dermální podání hydrokortizonu

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

Dikloethosomy jako nové vezikulární systémy pro topickou aplikaci

[Bc. Sára Pálková](#) (M2, Ing. Iva Paterová, Ph.D.)

Baeyero-Villigerova oxidace myrtenalu a následná hydrolýza na nopinon

[Bc. Karolína Zelinková](#) (M2, doc. Ing. Eliška Vyskočilová, Ph.D.)

Cykloadice CO_2 na styrenoxid

Hydrogenace 2-fenylakrylové kyseliny

Bc. Jakub Bachmaier (M2)

Školitel: Ing. Maria Kotova, Ph.D.

Ibuprofen neboli (*RS*)-2-(4-isobutylfenyl)propanová kyselina je účinnou složkou volně prodejných nenarkotických analgetik, mezi které patří například Ibalgin®, Advil®, Nurofen®. Z hlediska chemické struktury se jedná o derivát 2-arylpropanové kyseliny. Všechny 2-arylpropanové kyseliny mají chirální centrum a jsou důležitou skupinou nesteroidních protizánětlivých léčiv, která se distribuují buď jako racemická směs nebo jako čisté enantiomery. Ibuprofen je komerčně dostupný jako racemická směs. Studie však ukázaly, že protizánětlivá aktivita (*S*)-enantiomeru je stokrát vyšší než (*R*)-ibuprofenu. Modelovou látkou pro tuto práci byla zvolena kyselina 2-fenylakrylová. Hydrogenací této kyseliny lze připravit kyselinu 2-fenylpropanovou, která má strukturu velmi podobnou ibuprofenu, a liší se pouze nepřítomností alkylového substituentu na benzenovém jádře. Cílem práce byla hydrogenace 2-fenylakrylové kyseliny na kyselinu 2-fenylpropanovou a studium vlivu reakčních podmínek (teplota, tlak, rozpouštědlo, katalyzátor) na selektivitu k žádané látce a rychlost reakce. Na základě získaných výsledků by měly být nalezeny optimální podmínky pro hydrogenaci kyseliny (*RS*)-2-(4-isobutylfenyl)propanové na (*RS*)-ibuprofen nebo na jeho aktivnější (*S*)-enantiomer.

Optimalizace systému hydrofobního léčiva impregnovaného v hydrofilní matrici

Bc. Michal Drahozal (M2)

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

Velká část léčivých látek se díky své vysoké lipofilitě potýká s problémem špatné vodné rozpustnosti, která úzce souvisí s jejich špatnou biologickou dostupností. Tímto problémem se zabývá i tato práce, která navazuje na dříve prováděné experimenty, ve kterých bylo cílem zlepšení disolučních vlastností modelové lipofilní aktivní substance, kterou je meloxikam. Z dřívějších experimentů vyplývá, že podstatného zlepšení v disolučním chování lze dosáhnout využitím hydrofilního nosiče, na jehož částice jsou naneseny částice meloxikamu pomocí impregnace nosiče roztokem léčivé látky v těkavém organickém rozpouštědle. Tato práce studuje rozdíly v disolučním chování systémů sestávajících z hydrofilní matrice, na kterou byly nanášeny roztoky meloxikamu v těkavém organickém rozpouštědle. Hydrofilní matrice je v práci reprezentována tabletami z mikrokrytalické celulózy, u nichž lze dobře sledovat rychlost uvolňování léčivé látky z rovinného povrchu. Sledovanými parametry ovlivňující rychlost uvolňování meloxikamu byly koncentrace aplikovaného roztoku a také počet aplikačních cyklů roztoku. Práce má za cíl nalezení vhodného optima těchto parametrů vedoucího k maximalizaci rychlosti uvolňování meloxikamu z hydrofilní matrice.

Melatonin - nejen lék na spánek

Bc. Aneta Krýchová (M2)

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

Melatonin je obecně známý jako hormon spánku, v současné době však narůstá zájem o jeho další přednosti. Jedná se o silný antioxidant, snižuje hladinu kortizonu, stimuluje imunitní systém a potlačuje růst nádorů. Díky těmto vlastnostem má stále větší potenciál ve farmaceutickém průmyslu. V současnosti se klade velký důraz na jeho zpracování do lékové formy, která bude vykazovat co nejméně nežádoucích účinků. Efektivním způsobem se ukázaly být nanočástice jako nosiče léčiva, které zajišťují požadovaný lokální účinek, aniž by se poškodily buňky kožní a tukové tkáně. Tato práce se zabývala přípravou lipidových nanočástic právě s melatoninem a optimalizací jejich složení. V první části byl sledován vliv množství léčiva na stabilitu systémů. Druhá část byla zaměřena na optimalizaci složení. Cílem byla vybrat stabilní nanosystémy s co nejlepší vlastní enkapsulací léčiva. V neposlední řadě proběhly permeační experimenty a nanočástice tak byly testovány z hlediska efektivity.

Determinace příčiny rozdílného chování odlišných šarží ezetimibu

Bc. Michaela Martínková (M2)

Školitel: Ing. Jan Patera, Ph.D.

Rychlost rozpouštění léčivé látky je důležitý parametr při registraci nového léčivého přípravku. U jednotlivých šarží léčivých látek nesmí docházet k výrazným odchylkám v jejich rychlostech rozpouštění. Z provedených zkoušek disoluce dvou rozdílných šarží špatně rozpustné léčivé látky ezetimibu bylo zjištěno, že se jednotlivé šarže ezetimibu liší, neboť dochází k jejich rozpouštění různými rychlostmi. Cílem této práce tedy je odhalení příčiny odlišného disolučního chování jednotlivých šarží ezetimibu a jejich kombinací s pomocnými látkami. Přičemž pro práci byly vytipovány dvě pomocné látky (Avicel PH101 a laktóza 200 mesh), které jsou součástí výsledného léčivého přípravku spolu s ezetimibem, a které by také mohly ovlivňovat jeho disoluční chování. Nejprve byla provedena fyzikálně-chemická charakterizace obou šarží léčivé látky, aby bylo ověřeno, že šarže obsahují stejné polymorfy a disponují stejně velkými povrchy. V další části práce byla pozornost věnována pomocným látkám.

Kombinovaný nanočásticový systém pro dermální podání hydrokortizonu

Bc. Tereza Mužíková (M2)

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

U pacientů trpících různými typy nemocí souvisejících s defektem kožní bariéry je možné k její obnově využít nanočástice složené z lipidů přirozeně se vyskytujících v kůži. Zároveň lze do lipidových částic zapouzdřit léčivo, které cílí na zánětlivá ložiska. Tímto způsobem je možné zvýšit akumulaci léčiva v kůži a současně potlačit jeho lokální i systémové nežádoucí účinky, které se často objevují u komerčně používaných léčivých přípravků. Cílem našeho výzkumu je vyvinout stabilní kombinovaný systém ceramidových lipozomů (cerozomů), které prokazatelně obnovují kožní bariéru, a lipidových nanotobolek (LNC), do kterých je možné zapouzdřit velké množství léčiva. Jako protizánětlivá léčivá látka byl zvolen hydrokortizon, jakožto základní zástupce kortikosteroidů. V první fázi práce byly vyvíjeny samostatné formulace cerozomů a LNC s cílem dosáhnout co nejvyššího obsahu léčiva. U stabilních systémů byla dále pomocí kapalinové chromatografie zjišťována enkapsulační účinnost, tedy množství léčiva úspěšně zapouzdřeného do částic. Nejlepší samostatné formulace byly dále využity pro vytvoření dvou typů kombinovaných systémů cerozomů a LNC, jež byly následně podrobeny permeačním testům ke zjištění míry akumulace léčiva v kůži a jejich vlivu na obnovu poškozené kožní bariéry.

Dikloethosomy jako nové vezikulární systémy pro topickou aplikaci

Bc. Doreen Prittsová (M2)

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

Topické podání léčiv má řadu úskalí a to především kvůli odolné kožní bariéře. Tento fakt je palivem pro výzkum systémů, které by mohly toto podání zefektivnit. Jedním z těchto systémů jsou i ethosomy, neboli ethanolové liposomy. Ethosomy jsou lipidová vezikula, která se skládá z vody, fosfolipidů a ethanolu. Předností těchto nosičů je přítomnost ethanolu, který napomáhá narušení organizace kožní lipidové dvojvrstvy, čímž dochází ke snadnějšímu průniku léčiva *stratum corneum*. Cílem této práce je připravit stabilní nanočásticový ethosomální systém s modelovým léčivem diklofenakem. Diklofenak je, zejména v přípravcích pro topické podání, hojně využíván a proto je snahou konkurovat touto formulací komerčním přípravkům. Za účelem vybrat nejvhodnější formulaci byla použita kaskáda experimentů. V potaz byla brána stabilita částic, velikost částicových systémů a její vliv na stabilitu částic, zastoupení ethanolu a lipidové fáze. Nakonec byla testována efektivita těchto vezikulárních systémů pomocí permeačních experimentů.

Baeyerova-Villigerova oxidace myrtenalu a následná hydrolýza na nopinon

Bc. Sára Pálková (M2)

Školitel: Ing. Iva Paterová, Ph.D.

Baeyerovou-Villiegrovou (BV) oxidací myrtenalu vzniká 6,6-dimethyl-bicyklo[3,1,1]-hept-2-en-2-ol formiát. Ten může být následně hydrolyzován za vzniku nopinonu. Nopinon lze využít jako výchozí látku pro syntézu ligandů, terpenů a farmaceuticky aktivních látek. Nejčastěji se nopinon připravuje oxidací β -pinenu v přítomnosti KMnO_4 . Cílem této práce byla optimalizace podmínek BV oxidace myrtenalu při použití heterogenních katalyzátorů a H_2O_2 jako oxidačního činidla. Výhodou použití peroxidu vodíku je vznik pouze jednoho vedlejšího produktu, vody. V rámci optimalizace podmínek reakce byl studován vliv rozpouštědla, byla zkoušena různá množství peroxidu vodíku či způsobu jeho dávkování do reakční směsi. Pro BV oxidaci myrtenalu byly použity katalyzátory hydrotalcitového typu modifikované cínem. Modifikace katalyzátorů byla provedena různým způsobem, směsným srážením či impregnací a sledován její vliv na průběh reakce.

Cykloadice CO₂ na styrenoxid

Bc. Karolína Zelinková (M2)

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

Oxid uhličitý hraje zásadní roli ve fotosyntéze a tím je nezbytný pro život všech organismů, zároveň se však jedná o hlavní složku podílející se na skleníkovém efektu a tím na globálním oteplování. Koncentrace CO₂ v ovzduší vlivem spalování fosilních paliv a procesu deforestace neustále stoupá, proto roste i snaha využívat CO₂ coby surovinu pro další zpracování. Cykloadice CO₂ na epoxidy představuje jeden ze způsobů, jak redukovat množství CO₂ za vzniku průmyslově využitelných karbonátů. V rámci této práce byla studována cykloadice CO₂ na styrenoxid vedoucí k syntéze styrenkarbonátu, která byla prováděna za využití homogenních i heterogenních katalyzátorů. Homogenní katalyzátory (ethylpyridiniumbromid a benzyipyridiniumbromid) se k syntéze příliš neosvědčily, v důsledku vysoké nestability navíc docházelo k oddělování ethylbromidu a benzylbromidu od dusíkaté sloučeniny (pyridinu). V případě heterogenních katalyzátorů byly porovnávány pyridiniové soli chloru, bromu a jodu nanesené na nosič MCM-41. Za využití katalyzátoru MCM-Br-py bylo dosaženo nejvyšší relativní koncentrace styrenkarbonátu (85,6 rel. %), katalyzátor bylo též možné použít opakovaně bez výrazné ztráty aktivity. Dále bude studována možnost záměny pyridinu ve struktuře katalyzátoru za jiné dusíkaté sloučeniny.

Organická a farmaceutická technologie II

MÍSTO: A81A

KOMISE

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

Ing. Maria Kotova, Ph.D.

Ing. Martin Zapletal, Ph.D.

Ing. Lada Sekerová, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

[Bc. Barbora Haláková](#) (M1, prof. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.)

Studium smáčivosti binárních systémů léčivo-nosič pro vývoj interaktivních formulací

[Bc. Lukáš Koláčný](#) (M1, Ing. Martin Veselý, Ph.D.)

Optimalizace pracovního režimu fotokatalytického reaktoru

[Bc. Lucie Kuchařová](#) (M1, Ing. Martin Veselý, Ph.D.)

Porovnání katalytické aktivity vrstevnatých a exfoliovaných WS_2 a MoS_2 při hydrodesulfuračních reakcích

[Bc. David Novák](#) (M1, prof. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.)

Vliv strategie mísícího procesu na homogenitu směsí určených k přímému lisování

[Bc. Petra Příbylová](#) (M1, Ing. Iva Paterová, Ph.D.)

Ce- modifikované silikátové katalyzátory pro izomeraci β -pinenoxidu

[Bc. Martina Slaná](#) (M1, Ing. Iva Paterová, Ph.D.)

Bazicky katalyzovaná kondenzace kamfolenického aldehydu s propanalem

[Bc. Nikola Studničková](#) (M1, Ing. Tereza Školáková, Ph.D.)

Stanovení binárních fázových diagramů v systémech ibuprofen – paracetamol a ibuprofen – kofein

[Bc. David Šafařík](#) (M1, doc. Ing. Eliška Vyskočilová, Ph.D.)

Pyridiniové soli jako katalyzátory při přípravě styrenkarbonátu

Studium smáčivosti binárních systémů léčivo-nosič pro vývoj interaktivních formulací

Bc. Barbora Haláková (M1)

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

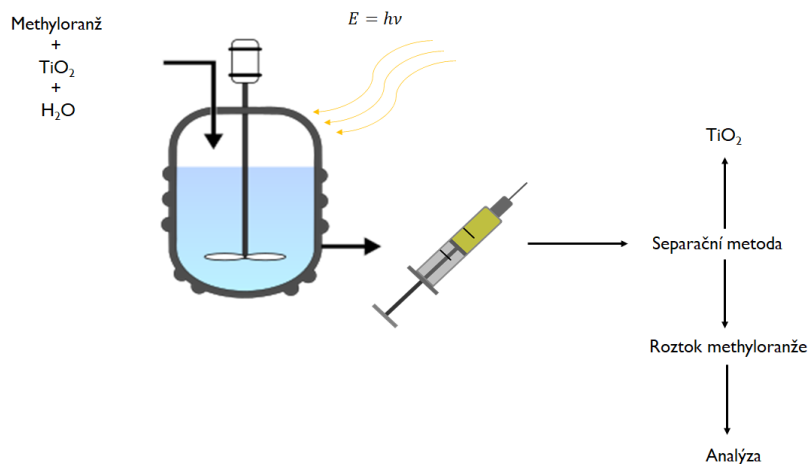
Velmi malá rozpustnost léčivých látek je pro formulátory přetrvávajícím problémem. Vzhledem k tomu, že rozpouštění je následováno absorpcí léčiva, může být řešením i pouhé zvýšení rozpouštěcí rychlosti. Technologické způsoby zlepšení rychlosti se často zakládají na využití kompozitních materiálů, jejichž povrch je kromě účinné látky tvořen i látkou s rozdílnými vlastnostmi. Schopnost charakterizace povrchu je tak jedním ze způsobů, jak přispět k pochopení této problematiky, a ve svém důsledku tak přispět i ke zlepšení biologické dostupnosti léčiv. Cílem této práce je proto studium interakce kapaliny na povrchu binárních formulací, zejména měřením povrchové energie a porovnáním těchto dat s výsledky disolučních testů. Studiemi na modelové látce naproxenu bylo potvrzeno, že existuje korelace mezi smáčivostí a mírou zaplnění povrchu kompozitního materiálu a dále také, že heterogenita a vlastnosti povrchu mají vliv na rychlost rozpouštění. Dalšími kroky výzkumu je provedení testů na meloxicamu, tedy na látce s obdobnými chemicko-fyzikálními vlastnostmi, čímž by bylo možné potvrdit obecné využití metod pro látky se známými povrchovými vlastnostmi. V širším kontextu je poté cílem dalších testů návrh optimální struktury z hlediska kompromisu mezi smáčivostí a obsahem léčiva.

Optimalizace pracovního režimu fotokatalytického reaktoru

Bc. Lukáš Koláčný (M1)

Školitel: Ing. Martin Veselý, Ph.D.

TiO₂ je široce využívaný fotokatalyzátor indukující oxidační a redukční reakce na svém povrchu, čehož lze využít například při odbourávání organických polutantů v odpadní vodě. Zaměřením této práce byl vývoj a optimalizace pracovního režimu fotokatalytického reaktoru při modelové reakci fotodegradace methylované s využitím komerčního katalyzátoru TiO₂. Jelikož samotné sledování úbytku koncentrace může být ovlivněno makrokinetickými jevy, bylo nutné nalézt optimální procesní podmínky studovaného fotoreaktoru. Dalším tématem práce byla vhodná adjustace zpracování reakční směsi pro přesné a rychlé vyhodnocení úbytku koncentrace sledované látky a to hlavně, vzhledem k povaze katalyzátoru, který tvoří v roztoku jemnou disperzi.



Porovnání katalytické aktivity vrstevnatých a exfoliovaných WS_2 a MoS_2 při hydrodesulfuračních reakcích

Bc. Lucie Kuchařová (M1)

Školitel: Ing. Martin Veselý, Ph.D.

Tato práce se zabývá porovnáním katalytické aktivity disulfidů přechodných kovů při hydrodesulfuraci benzothiofenu v heptanu. Zvláštní pozornost je věnována efektu exfoliace disulfidů a jeho vlivu na hydrodesulfurační reakce. Při exfoliaci dochází k rozdělení jednotlivých vrstev sulfidické struktury, a tím dochází k několikanásobnému nárůstu měrného povrchu. K prozkoumání tohoto efektu byla provedena série experimentů k porovnání katalytické aktivity mezi bulkovými (ne-exfoliovanými) a exfoliovanými disulfidy, které v reakční směsi sloužily jako katalyzátory. Dále byl studován vliv teploty a vliv složení katalyzátoru na provedené reakce, přičemž byly použity katalyzátory: MoS_2 , WS_2 a jejich směsi Mo:W v molárních poměrech 1:1, 1:3 a 3:1. Ze získaných výsledků provedených experimentů vyplývá, že exfoliované katalyzátory, vzhledem k většímu měrnému povrchu a snadněji dostupným sirným vakancím ve struktuře disulfidu, katalyzují hydrodesulfurační reakce lépe.

Vliv strategie mísícího procesu na homogenitu směsí určených k přímému lisování

Bc. David Novák (M1)

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

V procesu přímého lisování je důležité, aby vstupní směs byla dostatečně homogenní. Většinou používané rotační mísice, i přes řadu svých výhod, nejsou příliš efektivní v rozrušování agregátů kohezních látek, a proto se používají vícekrokové mísící strategie, v nichž jsou zahrnuty kroky sítování a kroky mísení. V rámci této práce bylo připraveno několik směsí API se směsí excipientů (placeba) za použití procesů s rozdílným počtem jednotlivých kroků. U připravených směsí byla stanovena homogenita z hodnot variačních koeficientů. Náročnost přípravy směsi byla popsána indexem procesní náročnosti, který kvantitativně hodnotí časovou náročnost daného mísícího procesu. Ukazatele homogenity směsi a náročnosti procesu slouží k určení vhodnosti použitého mísícího procesu při přípravě tablet přímým lisováním. Vyhovujícím procesem k přípravě zkoumané směsi se ukázal proces zahrnující pouze jeden síťovací krok a dva mísící. Tento proces představuje výrazné zjednodušení oproti průmyslově používaným procesům a jeho zavedení by mohlo představovat významnou úsporu času a energie. Použití navrženého optimalizačního postupu by mohlo výrazně zefektivnit výrobní procesy zejména ve fázi jejich vývoje a registrace.

Ce- modifikované silikátové katalyzátory pro izomeraci β -pinenoxidu

Bc. Petra Příbylová (M1)

Školitel: Ing. Iva Paterová, Ph.D.

Odborná práce se zaměřuje na izomeraci velmi reaktivní molekuly β -pinenoxidu, jejíž přeskupením vznikají významné látky používané především v potravinářském a vonném průmyslu. Zaměřuje se na vliv různých parametrů ovlivňujících samotný průběh reakce. Sledovanými parametry byla konverze β -pinenoxidu a selektivita k M a P produktům. Mezi M produkty byly z identifikovaných produktů zařazen myrtanal a myrtenol. Mezi P produkty byly zahrnuty perillový alkohol, anthemol, isoperillový alkohol a 4-isopropyl-1,3-cyklohexadien-1-karbaldehyd. Bylo zjištěno, že volba rozpouštědla má výrazný vliv na zastoupení produktů izomerace β -pinenoxidu. Reakcí vedenou při teplotě 140 °C v rozpouštědle DMSO s 10 hm. % katalyzátoru (7 hm. % CeO₂ β -38) bylo dosaženo konverze cca 90 % a selektivity k P produktům 84 %. V acetonitrilu jako jediném rozpouštědle probíhala reakce selektivněji k M produktům. Bylo zjištěno, že zvyšováním obsahu CeO₂ v katalyzátorech spíše dochází k poklesu aktivity, selektivita k P produktům ovlivněna nebyla. Opakované použití katalyzátoru po reakci je možné. Ve třech po sobě jdoucích cyklech nedošlo k poklesu aktivity ani snížení selektivity.

Bazicky katalyzovaná kondenzace kamfolenického aldehydu s propanalem

Bc. Martina Slaná (M1)

Školitel: Ing. Iva Paterová, Ph.D.

Práce se zabývá optimalizací reakčních podmínek bazicky 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 92 % a 91% selektivity k žádanému produktu) bylo dosaženo při vedení reakce v polárním rozpouštědle (např. DMF), za refluxu propanalu, použití 36% roztoku NaOH v množství 40 mol. % ku kamfolenickému aldehydu jako katalyzátoru a při přebytku propanalu vůči kamfolenickému aldehydu.

Stanovení binárních fázových diagramů v systémech ibuprofen – paracetamol a ibuprofen – kofein

Bc. Nikola Studničková (M1)

Školitel: Ing. Tereza Školáková, Ph.D.

Tato práce se zabývá stanovením binárních fázových diagramů v systémech ibuprofen – paracetamol a ibuprofen – kofein diferenční skenovací kalorimetrií. Metodou DSC byly v práci stanoveny teploty (tání a fázové transformace) a entalpie (tání a fázové transformace) pro čisté látky. Pro binární systémy byly změřeny eutektické teploty, teploty likvidu, teploty fázové transformace a hodnoty entalpie pro eutektikum a fázový přechod. Z experimentálních dat byly prostřednictvím programu FactSage vyhodnoceny parametry Redlichovy – Kisterovy rovnice, pomocí nichž byly vytvořeny fázové diagramy zkoumaných systémů. Ze získaných dat byl následně vypočten ternární fázový diagram pro systém ibuprofen – paracetamol – kofein, který byl ověřen experimentálním měřením.

Pyridiniové soli jako katalyzátory při přípravě styrenkarbonátu

Bc. David Šafařík (M1)

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

Práce se zabývá katalýzou cykloadiční karboxylace epoxidu, konkrétně styrenoxidu, na styrenkarbonát. Testovaným katalyzátorem bylo halogenované a pyridinem modifikované MCM-41 a v menší míře také alkyl a aryl pyridiniové soli, jmenovitě se jednalo o 1 – ethylpyridinium bromid a 1 – benzylpyridinium bromid. V práci je detailně popsána příprava, postup povrchové modifikace MCM-41 a detailní charakterizace připravených materiálů. V rámci práce byly připraveny různé varianty modifikovaného MCM-41: chlorovaná, bromovaná a jodovaná verze, které sloužily jako zdroj halogenu pro vytvoření soli s pyridinem. Všechny připravené materiály byly otestovány s ohledem na jejich katalytickou aktivitu. Nejlepších výsledků, tzn. nejvyšší konverze, bylo dosaženo při použití jódu jako halogenu. Selektivita ke styrenkarbonátu byla ve všech případech 100 %. Nejvyššího výtěžku styrenkarbonátu bylo dosaženo při použití následujících podmínek: 120 °C, 1,2 MPa, 12,5 hm. % katalyzátoru MCM-I-py a rozpouštědlo NMP. Jedná se o první popsanou přípravu MCM-41 modifikovaného pyridiniovými ionty, které bylo použito pro přípravu styrenkarbonátu.

Organická a farmaceutická technologie III

MÍSTO: A77C

KOMISE

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

Ing. Tomáš Sommer, Ph.D.

Ing. Martin Veselý, Ph.D.

Ing. Tereza Školáková, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

[Bc. Darina Achriměňa](#) (M2, Ing. Iva Paterová, Ph.D.)

Využití kovem modifikovaných hydrotalcitů pro one-pot syntézu Rosaphenu

[Veronika Hružová](#) (B3, prof. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.)

Příprava a vlastnosti tablet s vysokým obsahem ibuprofenu

[Zuzana Kubešová](#) (B3, doc. Mgr. Jarmila Zbytovská, Dr.rer.nat.)

Využití lipidových nanočástic pro kožní podání léčiv - v hlavní roli isopropylmyristát

[Bc. Lukáš Máčal](#) (M2, Ing. Lenka Hašková)

Syntéza karboxylového fragmentu tezakaftoru

[Šimon Zahradník](#) (B3, prof. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.)

Kinetika mletí meloxicamu v suspenzích určených pro přípravu nosičových systémů

[Terézia Šlosárová](#) (B3, Ing. Lada Sekerová)

Príprava molekulárne otlačených polymérov pre separáciu aminokyselín z biologických matric

[Anna Šmídová](#) (B3, Ing. Lada Sekerová)

Syntéza komplexů Pt(IV) s adamantanovými ligandy jako proléčiv s potencionální cytostatickou aktivitou

Využití kovem modifikovaných hydrotalcitů pro one-pot syntézu Rosaphenu

Bc. Darina Achriměňa (M2)

Školitel: Ing. Iva Paterová, Ph.D.

Při aldolové kondenzaci skořicového aldehydu s propanalem dochází ke vzniku 2-methyl-5-fenylpentan-1-olu, který se následně hydrogenuje na velmi ceněný a hlavně v parfumářském průmyslu používaný produkt – Rosaphen. Rosaphen patří do skupiny odorantů s květinovými tóny růže, jasmínu a konvalinky. Žádaný produkt syntézy je buď (*R*)-enantiomer, (*S*)-enantiomer, nebo racemát v závislosti na tom, jaké vůně chceme docílit. Tato práce se zabývá přípravou Rosaphenu s použitím heterogenních katalyzátorů na bázi hydrotalcitů, které jsou modifikovány různými kovy reprezentující hydrogenační složku. Tyto bifunkční katalyzátory mohou být následně využity pro „one-pot“ syntézu Rosaphenu, tedy pro oba zmiňované reakční kroky. Cílem práce je optimalizovat reakční podmínky aldolové kondenzace za použití bifunkčních katalyzátorů a studovat vliv typu kovu na průběh reakce.

Příprava a vlastnosti tablet s vysokým obsahem ibuprofenu

Veronika Hrůzová (B3)

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

Léčiva ve formě tablet, obsahující ibuprofen jako účinnou látku, patří mezi nejmasověji vyráběná. Při běžném procesu lisování tablet ibuprofenu se před vlastním lisováním provádí vlhká granulace směsi. Farmaceutické firmy se snaží přecházet na přímé lisování, které vlhkou granulaci nezahrnuje a slibuje tak výrazné ekonomické benefity. Tato práce se zabývá přímým lisováním binárních směsí s vysokým obsahem ibuprofenu a hodnocením vlastností z nich vylisovaných tablet. Byl studován vliv obsahu ibuprofenu a použitého excipientu, a to 3 typů laktóz a 2 mikrokrytalických celulózy (MCC). Hlavními sledovanými parametry bylo ejekční napětí (σ_E), tedy snadnost vysunutí tablety z matrice, a pevnost tablety (T_s). Pro lisování byl využit kompaktní analyzátor Gamlen GTP-1, který umožňuje vyhodnotit i studované σ_E . Pro měření T_s se použil přístroj Sotax Multitest 50. Z výsledků bylo zjištěno, že na oba studované parametry má vliv množství ibuprofenu. V případě σ_E je důležitým atributem i tendence excipientu k radiální relaxaci. Ta byla výraznější u směsí s laktózami a vedla k horší ejekci jejich tablet. T_s byla naopak dána deformačním chováním částic excipientu, kdy laktózy podléhají fragmentaci, zatímco MCC spíše plastické deformaci a poskytují vyšší pevnost tablet.

Využití lipidových nanočástic pro kožní podání léčiv - v hlavní roli isopropylmyristát

Zuzana Kubešová (B3)

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

Kožním podáním léčiv lze obejít mnoho nežádoucích účinků, které se objevují při jiných typech podání. Nedráždí trávicí trakt, nedochází k metabolizaci léčiva v játrech brzy po podání a navíc je komfortní pro pacienta. Bohužel mnoho léčiv se špatně absorbuje přes kožní bariéru, proto je nutné transport léčiv podpořit dalšími prostředky. Jedou z metod, jak lze napomoci transportu léčiva kůží, je použití lipidových nanočástic. V naší laboratoři používáme lipidové nanotobolky, které mají vnitřek zcela tvořený kapalnou lipidovou fází, a jejich povrch je stabilizován tenzidy. Jiným přístupem k podpoření absorpce léčiv je použití urychlovačů, které dočasně rozruší kožní bariéru a umožní tak proniknutí léčiva. Mezi urychlovače patří také olej isopropylmyristát, který je hlavním předmětem této práce. Cílem práce bylo připravit lipidové nanotobolky obsahující isopropylmyristát namísto standardních olejů. Byly sledovány základní vlastnosti částic (velikost, polydisperzita a stabilita) a zároveň byl stanoven jejich vliv na permeaci léčiva kůží. Bylo zjištěno, že částice s obsahem isopropylmyristátu skutečně podporují a urychlují průstup léčiva kůží oproti volnému léčivu, i oproti standardním lipidovým nanotobolkám, kde byl použit olej bez urychlovacích účinků.

Syntéza karboxylového fragmentu tezakaftoru

Bc. Lukáš Máčal (M2)

Školitel: Ing. Lenka Hašková

Tezakaftor patří mezi léčiva, která se v různých kombinacích používají pro léčbu cystické fibrózy. Struktura tezakaftoru se skládá z karboxylového a aminového fragmentu. Tato práce se zabývá optimalizací syntézy karboxylového fragmentu, a to konkrétně prvního z celkem šesti kroků. Prvním krokem je tvorba methylesteru z výchozí kyseliny 3,4-dimethoxyfenyloctové, kterým se ochrání karboxylová skupina před následnými reakcemi. Methylester byl připraven několika způsoby. Prvním z nich byla Steglichova esterifikace, která jako kondenzační činidlo využívá *N,N'*-dicyklohexylkarbodiimid v kombinaci s 4-dimethylaminopyridinem, který slouží jako katalyzátor. Jako kondenzační činidlo byl dále použit 1,1'-karbonyldiimidazol. Tyto reakce se neosvědčily z důvodu obtížnější separace reakční směsi. Druhou možností je využití bazicky katalyzované methylace kyseliny 3,4-dimethoxyfenyloctové pomocí CH_3I , která probíhala ekvivalentně. Třetím způsobem je využití kyseliny katalyzované Fischerovy esterifikace, ke které byly využity tři katalyzátory: H_2SO_4 , kyselina *p*-toluensulfonová a H_3PO_4 . U těchto reakcí byl studován vliv množství katalyzátoru a teploty. Dále byly porovnávány konverze a časy potřebné k jejich dosažení. Nejlepší výsledky poskytovaly reakce katalyzované H_2SO_4 .

Kinetika mletí meloxicamu v suspenzích určených pro přípravu nosičových systémů

Šimon Zahradník (B3)

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

Systém BCS léčivé látky dělí dle biodostupnosti do čtyř skupin na základě permeability a rozpustnosti. Velká část nových, ale i mnoho již používaných léčivých látek, spadá do skupin II a IV – látky s nízkou rozpustností. Biodostupnost léčivé látky lze zvýšit úpravou lékové formulace, ve které je podávána, nebo úpravou samotné léčivé látky. Vzhledem k tomu, že biodostupnost látek nutně nepředstavuje pouze ovlivnění permeability, ale i rozpustnosti či rozpouštěcí rychlosti, je cílem formulačních oddělení farmaceutických firem tyto parametry zlepšit. Snížením velikosti částic se zvyšuje její specifický povrch, což může rozpouštěcí rychlost pozitivně ovlivnit. Jako modelová látka byl zvolen meloxicam, u kterého byla prostudována kinetika mletí mokrou cestou. Studie byla založena především na sledování distribucí velikostí částic v závislosti na době mletí, rychlosti otáček a složení mlecí směsi. Na základě získaných dat lze připravit mikrosuspenze o žádaných parametrech. Z těchto mikrosuspenzí budou dále vytvořeny nosičové systémy, které budou analyzovány, podrobeny disoluční zkoušce a porovnány s referenční léčivou formulací – nemletým meloxicamem.

Príprava molekulárne otláčených polymérov pre separáciu aminokyselín z biologických matric

Terézia Šlosárová (B3)

Školiteľ: Ing. Lada Sekerová

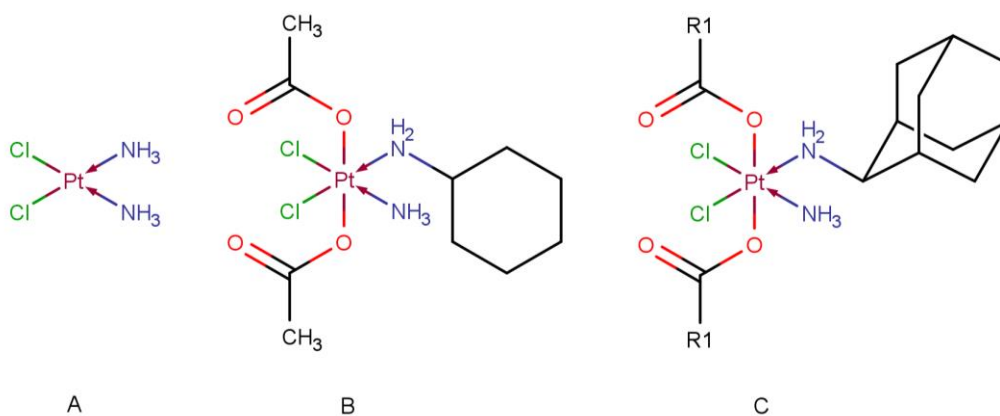
Molekulárne otláčené polyméry (MIP), tiež často označované ako syntetické receptory, sú látky so špecifickými rozpoznávacími miestami, ktoré sú komplementárne k cieľovej molekule. Pomocou týchto rozpoznávacích miest vykazujú vysokú selektivitu a afinitu k spätnému vychytávaniu cieľovej molekuly (templátu) z roztoku. MIP vykazujú mnoho výhod, ako sú napríklad stabilita aj pri vysokých teplotách, robustnosť alebo lacná a rýchla syntéza. Príprava MIPu je dvojkroková. V prvom kroku syntézy je vytvorený polymér z funkčného monoméru, odtlačovanej molekuly (templátu), sieťovacieho činidla a iniciátora. Druhý krok spočíva v odstránení templátu pomocou extrakčného činidla. Cieľom práce je optimalizácia prípravy MIP-u s použitím alaninu ako templátovej molekuly. Následne vývoj vhodnej analytickej metódy (HPLC/MS) pre detekciu alaninu, ktorý bude pomocou MIPov vychytávaný z rôznych biologických matric.

Syntéza komplexů Pt(IV) s adamantanovými ligandy jako proléčiv s potencionální cytostatickou aktivitou

Anna Šmídová (B3)

Školitel: Ing. Lada Sekerová

Výzkum Pt(IV) komplexů jako proléčiv je dnes jednou z hlavních strategií pro optimalizaci léčby nádorových onemocnění. Doposud klinicky využívaná Pt(II) cytostatika jsou strukturní analoga cisplatiny (Obr. 1 A), prvního schváleného léčiva tohoto typu. Tato chemoterapeutika jsou velice reaktivní a vedle vysoké účinnosti s sebou přináší mnohé nežádoucí účinky způsobené jejich nízkou selektivitou pro nádorové buňky. Využití komplexů platiny v oxidačním stavu IV přináší, kromě snížení vedlejších účinků a zlepšení cytostatické aktivity, také možnost perorálního podání. Předmětem práce je tříkroková syntéza analog platinových cytostatik 4. generace (satraplatina, Obr. 1 B) a jejich následná charakterizace. Připravené komplexy (obecná struktura Obr. 1 C) se odlišují ligandy v axiální pozici, která je typická právě pro Pt(IV). Obměna ligandů vede k rozdílné lipofilitě a rozpustnosti ve vodě, např. objemný hydrofobní adamantylamin výrazně zvyšuje lipofilitu celého komplexu. Zvýšení lipofility vede ke snazšímu pronikání přes buněčné membrány a oxidační stav IV zajišťuje aktivaci komplexu až po vstupu do buňky. Obr. 1: Strukturní vzorce cisplatiny (A), satraplatiny (B) a obecný vzorec připravovaných komplexů (C)



Ústav polymerů (112)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Lucie Reinišová

SEZNAM SEKČÍ

1. [Chemie a technologie polymerů](#)

Chemie a technologie polymerů

MÍSTO: B11

KOMISE

prof.Ing. Petr Sysel, CSc. (předseda)

Ing. Anatolij Sokolohorskyj, Ph.D.

Ing. Alena Kadeřábková, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:10 [Bc. Veronika Šofrová](#) (M2, Ing. Anatolij Sokolohorskyj)

Příprava hydroxy-funkcionalizovaného polyethylenů

09:15 [Bc. Štěpán Maštalíř](#) (M1, Ing. Radka Kalousková, CSc.)

Využití dimeru ϵ -kaprolaktonu k měkčení PVC.

09:20 [Bc. Kateřina Mazánková](#) (M1, Ing. Lenka Malinová, Ph.D.)

Studium degradace biomateriálů na bázi poly(ϵ -kaprolaktonu)

09:25 [Bc. Karolína Zoulová](#) (M1, doc. Ing. Jan Merna, Ph.D.)

Příprava amfifilních kopolymerů s dendritickým jádrem reagujících na vnější podněty

09:30 [Bc. Jonáš Uříčář](#) (M2, prof. Ing. Jiří Brožek, CSc.)

Polymerní kompozity připravené technologií stereolitografie

09:35 [Bc. Hynek Urban](#) (M1, Ing. Drahomír Čadek, Ph.D.)

Materiálové využití směsí plastového odpadu

09:40 [Bc. Vojtěch Musil](#) (M2, doc. Ing. Jan Merna, Ph.D.)

Vývoj houževnatých materiálů s elastomerní fází na bázi větveného polyethylenů pro 3D tisk

09:45 [Bc. Michaela Šusterová](#) (M2, prof. Ing. Petr Sysel, CSc.)

Polyimidy na recentnej báze

09:50 [Bc. Karolína Gorzolková](#) (M1, None)

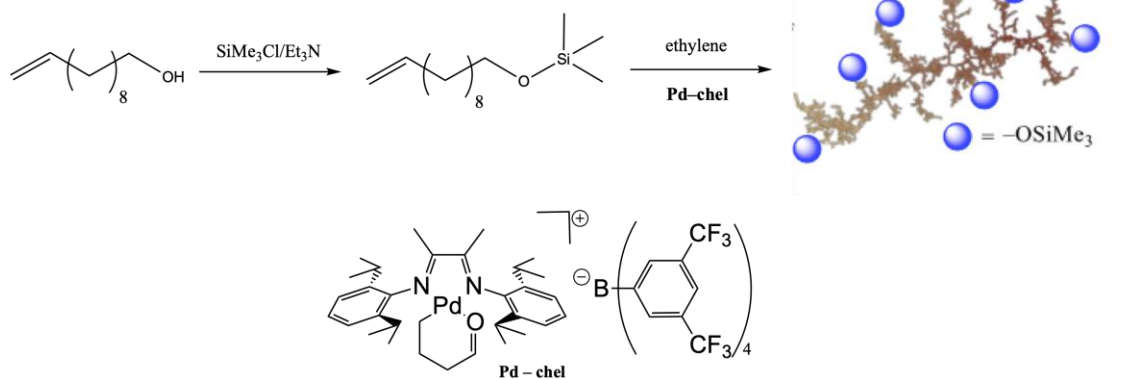
*Příprava uhlíkatých materiálů mikrovlnnou pyrolýzou odpadních pneumatik pro
snižování koncentrace xylenu z odpadních plynů*

Příprava hydroxy-funkcionalizovaného polyethylenu

Bc. Veronika Šofrová (M2)

Školitel: Ing. Anatolij Sokolohorskyj

Polyethylen se stal dominantou mezi syntetickými polymery, který nabízí široké uplatnění. Jeho hlavní nevýhoda spočívá v nepolární struktuře, díky které je polyethylen špatně barvitelný a hůře mísitelný s ostatními materiály. Tento problém může být vyřešen vnesením polárních skupin do struktury polyolefinů. Takové polymery lze využít přímo jako makroiniciátory pro syntézu roubovaných amfifilních kopolymerů, které mohou nalézt uplatnění ve speciálních aplikacích např. jako nosiče léčiv nebo jako nanoreaktory. Cílem této práce je ověřit možnost kopolymerace ethyleny s 10-undecen-1-olem pomocí α -diiminového Pd komplexu (Schéma 1). Tento komplex umožňuje tzv. chain walking polymeraci, která vede k vysoce větvenému polyethyleny s amorfny strukturnou. Pro úspěšnou polymeraci je nejdříve nutné polární komonomer ochránit sylimací. Připravený kopolymer nescí po ochránění hydroxylové skupiny byl využit jako makroiniciátor při polymerizaci kaprolaktonu. Vzniklé kopolymery obsahují hydrofobní polyethylenové jádro a polární plášť z polykaprolaktonu. Výsledné kopolymery byly studovány pomocí SEC, ^1H NMR, IČ a AFM. Schéma 1: Schéma kopolymerace ethyleny s chráněným 10-undecen-1-olem.



Využití dimeru ϵ -kaprolaktonu k měkčení PVC.

Bc. Štěpán Maštalíř (M1)

Školitel: Ing. Radka Kalousková, CSc.

Cílem této práce byla syntéza dimeru ϵ -kaprolaktonu (DCLO) a jeho následná aplikace v PVC směsích v roli změkčovadla. DCLO byl připraven polymerací ϵ -kaprolaktonu a následnou depolymerací vzniklého poly(ϵ -kaprolaktonu). K syntéze byly využity iniciátory ethylmagnesium bromid a propoxid titaničitý. Získaný DCLO byl využit při přípravě PVC blendů, u kterých byly sledovány termické vlastnosti. Blendy byly připraveny extruzí. Přidaný stabilizátor dibutylcín maleát měl v blendu zároveň význam jako iniciátor dodatečné polymerizace DCLO na polymerní změkčovadlo. Do některých směsí byl v roli iniciátoru polymerizace DCLO přidán (kaprolaktammagnesium)bromid. Pomocí dynamické mechanické analýzy a diferenční skenovací kalorimetrie byly potvrzeny měkčící účinky DCLO, avšak DCLO za daných podmínek při zpracování téměř nepolymeroval. Dále byly zaznamenány stabilizační účinky DCLO a iniciátoru (kaprolaktammagnesium)bromidu při tepelné degradaci.

Studium degradace biomateriálů na bázi poly(ϵ -kaprolaktonu)

Bc. Kateřina Mazánková (M1)

Školitel: Ing. Lenka Malinová, Ph.D.

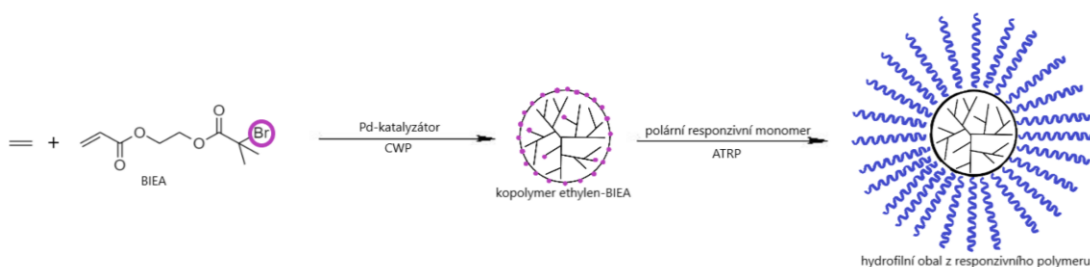
Poly(ϵ -kaprolakton) je biokompatibilní a biodegradovatelný polymer, který je vzhledem ke svým vlastnostem využíván v řadě medicínálních aplikací. Mezi nejdůležitější patří cílený transport léčiv a použití jako tzv. lešení pro růst tkání. Jeho nevýhodou je však dlouhá doba degradace, která je vyšší jak 1 rok a brání tak rozšíření jeho využití. Řešení tohoto problému se naskýtá v přípravě kopolymerů ϵ -kaprolaktonu s jinými monomery, které napomáhají ke snížení krystalinity či zvýšení hydrofility materiálu. V této práci byla nejprve otestována iniciační aktivita iniciátoru na bázi biogenního kovu - bis(ϵ -kaprolaktamátu) vápenatého dispergovaného v γ -valerolaktonu. Iniciátor byl použit při polymeraci ϵ -kaprolaktonu a kopolymeraci ϵ -kaprolaktonu s γ -valerolaktonem při rozdílných podmínkách, které zahrnovaly teplotu, čas a koncentraci iniciátoru. Dále byla studována degradace homopolymerních a kopolymerních vzorků ϵ -kaprolaktonu s γ -valerolaktonem či γ -butyrolaktonem různé morfologie po dobu 2, 4 a 7 týdnů. Degradace probíhala v podmínkách, které napodobovaly prostředí lidského organismu.

Příprava amfifilních kopolymerů s dendritickým jádrem reagujících na vnější podněty

Bc. Karolína Zoulová (M1)

Školitel: doc. Ing. Jan Merna, Ph.D.

Responzivní polymery jsou díky schopnosti reagovat na fyzikální nebo chemické změny (T, pH) řazeny mezi materiály s velkým potenciálem v oblasti biomedicínských aplikací. Umožňují cílenou reakci ve specifických částech těla. To lze využít pro transport léčiv kdy maximalizují terapeutický účinek léků, sníží počet nežádoucích účinků a prodlouží cirkulaci léčiva v těle. Cílem mé práce je příprava amfifilních roubovaných kopolymerů se strukturou jádro-plášť obsahující hydrofobní jádro z dendritického polyethylenu a hydrofilní plášť z responzivního polárního monomeru. Takovéto kopolymery byly připraveny kombinací chain-walking kopolymerace a ATRP. Kopolymerací ethylenu s 2-(2-bromisobutyryloxy)ethylakrylátem byl připraven multifunkční makroiniciátor dPE-BIEA, který právě díky mechanismu chain-walking lze vyrobít jedнокrokovou reakcí narozdíl od jiných syntéz získávajících přesné dendrimery složitým postupem. Následnou řízenou radikálovou polymerací s přenosem atomu (ATRP) iniciovanou Br-skupinami makroiniciátoru došlo k naroubování OEGMA (oligo(ethylen glykol)methakrylát) roubů na dPE jádro. Byly připraveny kopolymery s molární hmotností 326-811 kg/mol s obsahem roubů 62-85 hm.%. U připravených kopolymerů dPE-graft-pOEGMA byla provedena zkouška termoresponzivity.



Polymerní kompozity připravené technologií stereolitografie

Bc. Jonáš Uřičář (M2)

Školitel: prof. Ing. Jiří Brožek, CSc.

V posledních letech můžeme pozorovat rozvoj technologie 3D tisku a její pronikání do nejrůznějších výzkumných i průmyslových aplikací. S rostoucí poptávkou po této moderní technologii rostou i požadavky na používané materiály. Tato práce se zabývá vývojem materiálů pro 3D tisk technologií stereolitografie, a to především pro oblast elektrotechnologie. V práci byly modifikovány vlastnosti komerčně dostupného UV-zářením polymerizovatelného resinu přidavkem dostupných plniv na bázi nanočástic Fe_3O_4 , grafitu a aktivního uhlí. Tato plniva dokázala zvýšit elektrickou vodivost o několik řádů oproti neplněnému resinu. Dále byla sledována zvyšující se absorpance v UV-VIS oblasti s rostoucím množstvím plniva, homogenita dispergace pomocí mikroskopie či mechanické vlastnosti. Přídavek plniv v obsahu větším než 5 hm. % ovšem způsobuje nedostatečnou adhesi tištěného materiálu k tiskové podložce, avšak použitím grafenu by mohl být tento problém eliminován. Z tohoto důvodu byla druhou částí práce optimalizace syntézy high-quality grafenu redukcí grafen oxidu ve větším měřítku.

Materiálové využití směsí plastového odpadu

Bc. Hynek Urban (M1)

Školitel: Ing. Drahomír Čadek, Ph.D.

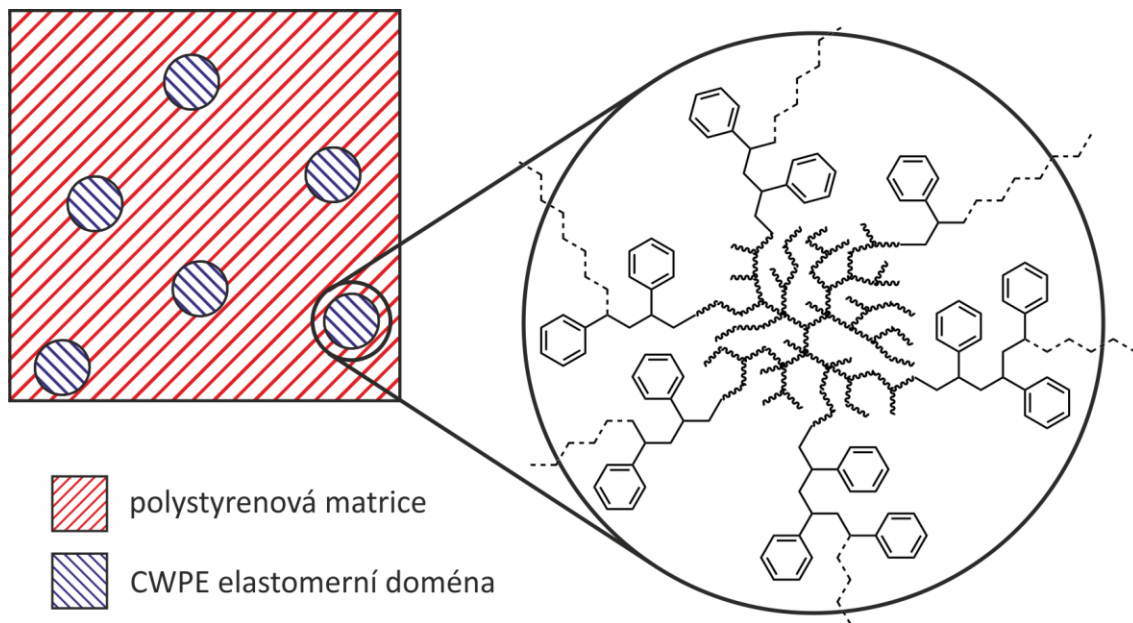
Zpracování druhotného plastového odpadu pro materiálové využití představuje vzhledem k jeho rozmanitému složení a znečištění výzvu, na kterou stále neexistuje ekonomicky smysluplná odpověď. Práce je zaměřena na charakterizaci a materiálové zpracování komunálního plastového odpadu získaného ze zpětného odběru. Zvláštní důraz byl kladen na možnost materiálového zpracování a následné zhodnocení vlastností v ČR nevyužívaných frakcí plastového odpadu nízké kvality. Připravené a zkoumané vzorky jsou směsi různých plastů běžně zastoupených v obalech a dalších spotřebních výrobcích z plastů. Složení směsí vychází ze skladby již zmíněných frakcí, aby byla omezena potřeba důkladného dotřídování. V rámci práce byl sledován i vliv zastoupení jednotlivých odpadních frakcí a typů plastu na vlastnosti výsledného materiálu.

Vývoj houževnatých materiálů s elastomerní fází na bázi větveného polyethylenu pro 3D tisk

Bc. Vojtěch Musil (M2)

Školitel: doc. Ing. Jan Merna, Ph.D.

Za účelem zvýšení rázové houževnatosti materiálů se běžně využívají modifikátory houževnatosti vytvářející dvoufázovou strukturu s dispergovanými elastomerními doménami. Tato heterogenní struktura poskytuje materiálu schopnost pojmout kinetickou energii nárazu a zastavit šíření trhlin. Mezi běžně používané modifikátory houževnatosti patří dienové elastomery nebo EPM kaučuk. Využitím chain-walking katalyzátorů při homopolymerizaci ethylenu lze připravit vysoce větvený polyethylen (CWPE), který není schopen krystalizovat, a díky nízké T_g má elastomerní charakter. Cílem této práce je využít CWPE připravený pomocí Ni diiminových katalyzátorů jako modifikátor houževnatosti polystyrenu. Kopolymerací ethylenu s nekonjugovaným diem je možné dále připravit i CWPE s dvojnými vazbami, které lze využít pro kovalentní navázání na řetězce polystyrenu. Takový systém by bylo možné využít pro fotopolymerizační 3D tisk houževnatého polystyrenu.

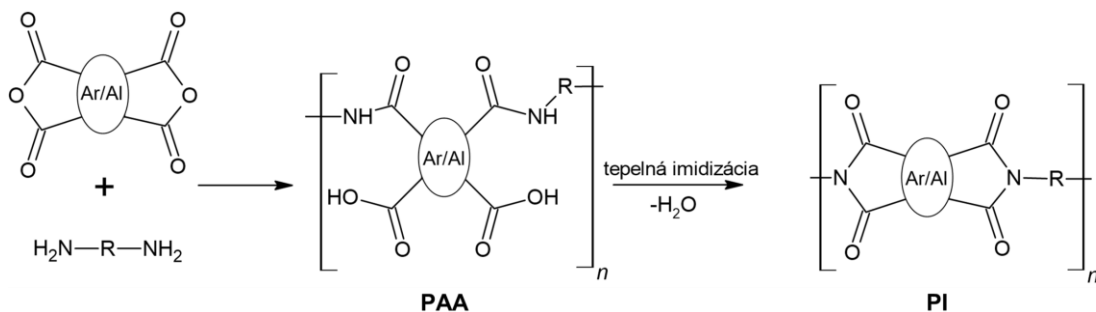


Polyimidy na recentnej báze

Bc. Michaela Šusterová (M2)

Školiteľ: prof. Ing. Petr Sysel, CSc.

Polyimidy (PI), produkty stupňovitej polyreakcie diamínu s dianhydridom karboxylovej kyseliny, sú skupinou polymérov, ktoré sa radia medzi tzv. high-performance materiály. Monoméry sa väčšinou získavajú z ropy, ale z dôvodu neobnoviteľnosti, obmedzených zásob a potenciálnej environmentálnej záťaže tejto fosílny suroviny je snaha nájsť iné zdroje na tzv. recentnej báze. Tento pojem predstavuje synonymum pre látky rastlinného a živočíšneho pôvodu. Cieľom práce bolo pripraviť PI dvojkrokovou syntézou, zahŕňajúcou prípravu polyamidkarboxylovej kyseliny (PAA) ako prekursoru pre vznik PI, ktoré by štrukturálne vychádzali z alicyklických dianhydridov karboxylových kyselín a diamínov, ktorých zdrojom sú materiály na prírodnej báze.



Příprava uhlíkatých materiálů mikrovlnnou pyrolýzou odpadních pneumatik pro snižování koncentrace xylenu z odpadních plynů

Bc. Karolína Gorzolková (M1)

Školitel: None

Aktivní uhlí má široké využití jako účinný adsorbent pro odstranění znečišťujících látek z odpadních plynů. Zajímavou alternativou ke konvenčně připraveným aktivním uhlím je mikrovlnná pyrolýza odpadních materiálů – biomasy, kávových slupek, kukuřice anebo také právě odpadních pneumatik. Aktivní uhlí byla připravena mikrovlnnou pyrolýzou odpadních pneumatik, tzn. termickým rozkladem v mikrovlnném poli bez přístupu oxidačního činidla v jednom a dvou stupních bez/a s přidavkem aktivačního činidla (KOH). Dále byla testována a vypočítána sorpční kapacita xylenu z proudu vzduchu na připravených materiálech. Nejlepší texturní vlastnosti prokázaly vzorky jednostupňové pyrolýzy s KOH aktivací. Aktivací došlo ke zvýšení specifického povrchu a objemu mikropórů. Ostatní vzorky vykazovaly mezo-makroporézní strukturu s nízkým specifickým povrchem a nulovým objemem mikropórů. Ramanova spektroskopie prokázala poměr neuspořádané („disordered“) a grafitické („graphitic“) struktury srovnatelný. Výsledky sorpčních experimentů korelují s výsledky texturní analýzy – největší sorpční kapacitu vykazují vzorky jednostupňové pyrolýzy s aktivací. Adsorpční kapacita připravených aktivních uhlí tedy závisí na texturních a strukturních vlastnostech.



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: B360

KOMISE

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

doc. Ing. Jakub Siegel, Ph.D.

Ing. Ondřej Kvítek, Ph.D.

Ing. Nikola Slepíčková Kasálková, Ph.D.

Ing. Jana Pryjmaková

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Bc. Terezie Burianová](#) (M1, prof. Ing. Václav Švorčík, DrSc.)

Chytré polymerní hydrogely pro tkáňové inženýrství

09:15 [Bc. Zuzana Dorňáková](#) (M2, Ing. Nikola Slepíčková Kasálková, Ph.D.)

Příprava a modifikace tenkých PLLA vrstev dotovaných grafenovými nanopeletami.

09:30 [Bc. Bára Frýdlová](#) (M2, prof. Ing. Petr Slepíčka, Ph.D.)

Kompozitní fólie PDMS a jejich modifikace

09:45 [Alžběta Kociánová](#) (M1, Ing. Roman Elashnikov, Ph.D.)

Plazmon-aktivní měděné nanočástice pro generaci radikálů a aktivaci antimikrobiálních účinků slunečním světlem

10:00 [Bc. Marie Potěrová](#) (M2, Ing. Alena Řezníčková, Ph.D.)

Plazmatická modifikace PEEK při zvýšené teplotě pro bioaplikace.

10:15 [Bc. Kamil Severa](#) (M1, Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.)

Z-schéma pro fotolýzu vody – úprava rozhraní polovodičů

10:30 [Bc. Anastasia Vulakh](#) (M1, Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.)

Detekce chiralitý farmakologických sloučenin

10:45 [Bc. Nina Čepelková](#) (M2, Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.)

Plazmonem indukovaná organická fotoelektrochemie

Chytré polymerní hydrogely pro tkáňové inženýrství

Bc. Terezie Burianová (M1)

Školitel: prof. Ing. Václav Švorčík, DrSc.

Chytré polymerní hydrogely získávají velkou pozornost díky vysokému potenciálu pro využití v tkáňovém inženýrství. V této práci byly pro kultivaci buněk úspěšně připraveny hydrogely na bázi N-isopropylakrylamidu s různými stupni zesíťování. Morfologie připravených hydrogelů byla charakterizována skenovací elektronovou mikroskopií. Chemické složení bylo potvrzeno infračervenou a ultrafialovou spektroskopií s Furierovou transformací. Dolní kritická rozpouštěcí teplota připravených hydrogelů byla analyzována refraktometricky. Pro zvýšení vodivosti hydrogelů byly navíc přidány polypyrrolové nanotrubice. Zvláštní pozornost byla věnována mechanickým vlastnostem připravených hydrogelů. Ukázalo se, že připravené hydrogely jsou netoxické a vhodné pro buněčnou kultivaci.

Příprava a modifikace tenkých PLLA vrstev dotovaných grafenovými nanopeletami.

Bc Zuzana Dorňáková (M2)

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

Uhlíkové atomy mají jedinečnou vlastnost podílet se na pevných kovalentních vazbách s jinými atomy uhlíku nebo s nekovovými prvky. Toto umožňuje uhlíku vytvářet širokou škálu nanostruktur, které vykazují jedinečné fyzikální, chemické, mechanické a elektrické vlastnosti. Jsou proto hojně využívány v různých průmyslových oblastech, např. v leteckém a automobilovém průmyslu nebo v lékařství. Uhlíkové nanostruktury mohou být připraveny pomocí laserové modifikace, což je značně výhodné z hlediska čistoty produktu, rychlosti přípravy a možnosti přípravy z velkého množství zdrojů. Jedním z těchto zdrojů mohou být tenké PLLA vrstvy dotované grafenovými nanopeletami. Cílem této práce je optimalizace přípravy těchto vrstev metodami „solvent-casting“ a „spin-coating“ a jejich modifikace tepelným namáháním a laserovým zářením. Analýza a studium připravených vrstev jsou v první fázi založeny na stanovení tloušťky připravených vrstev pomocí optického mikroskopu v konfokálním módu a zjištění povrchové morfologie.

Kompozitní fólie PDMS a jejich modifikace

Bc. Bára Frýdlová (M2)

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

Cílem práce byla příprava homogenních kompozitních fólií polydimethylsiloxanu (PDMS) s nanostrukturami, a to především uhlíkovými nanovláknami, pomocí metody solvent castingu. Povrchy takto připravených fólií byly modifikovány argonovým plazmatem, tepelným namáháním či depozicí nanovrstev ušlechtilého kovu. Následně byly připravené fólie charakterizovány z hlediska jejich povrchové morfologie (mikroskopii atomárních sil, laserovým konfokálním mikroskopem, rastrovacím elektronovým mikroskopem), chemického složení (rentgenovou fotoelektronovou spektroskopií) a také smáčivosti (goniometricky). Modifikace povrchů obecně vedly k nárůstu drsnosti povrchu, změně morfologie, zvýšení smáčivosti a v případě plazmaticky modifikovaných povrchů docházelo k tvorbě periodických vlnitých struktur, jejichž tvorba byla následně záměrně indukována a zkoumána. Potenciál těchto kompozitních materiálů spočívá především v biokompatibilitě PDMS, tudíž použitelnosti v tkáňovém inženýrství, ve vývoji flexibilní elektroniky či senzorů zabudovatelných přímo do lidského těla.

Plazmon-aktivní měděné nanočástice pro generaci radikálů a aktivaci antimikrobiálních účinků slunečním světlem

Alžběta Kociánová (M1)

Školitel: Ing. Roman Elashnikov, Ph.D.

Ačkoliv je kontaminace povrchů v nemocničních zařízeních dlouhodobě známá, dnes, v době celosvětové pandemie, je omezení mikrobiálního růstu a zabránění vzniku rezistentních kmenů na površích obzvlášť významné. Jedním z možných opatření je tyto povrchy modifikovat a tím jim antimikrobiální vlastnosti přidělit. Pro tyto účely jsou velmi zajímavé některé kovové nanomateriály – zejména stříbro a měď, která je v porovnání se stříbrem komerčně dostupnější. Efektivita antibakteriálního účinku kovových plazmon-aktivních NP může být navíc zvýšena excitací lokální povrchové plasmonové rezonance (LSPR) při působení světla. V této práci byly připraveny měděné nanočástice, u kterých byla prokázána zvýšená inhibice růstu bakterií zejména při použití světla. V neposlední řadě byly studovány mechanismy působení antibakteriálních účinků měděných nanočástic

Plazmatická modifikace PEEK při zvýšené teplotě pro bioaplikace.

Bc. Marie Potěrová (M2)

Školitel: Ing. Alena Řezníčková, Ph.D.

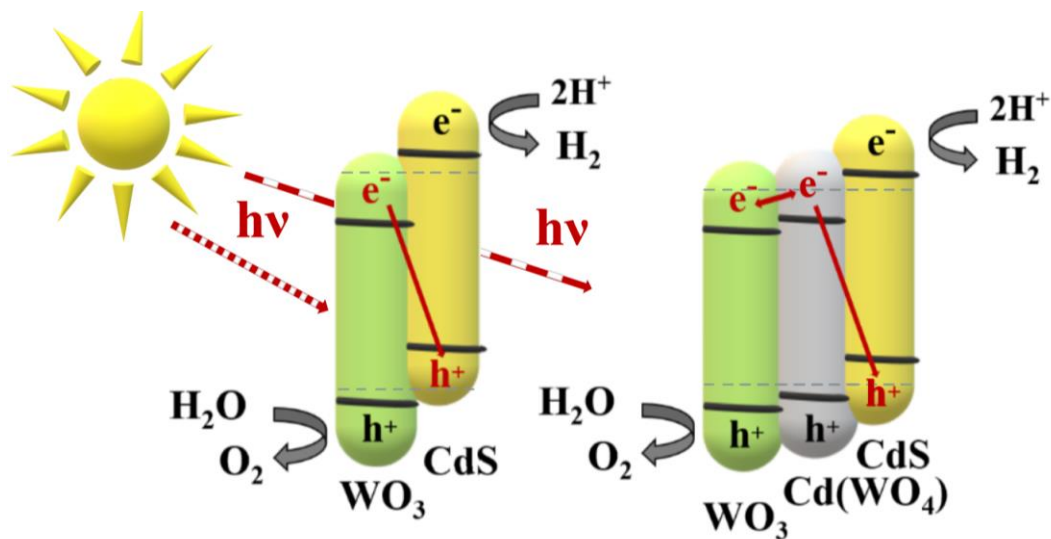
Poly(etheretherketon) (PEEK) je nově studovaný polymerní biomateriál pro výrobu implantátů. V biomedicíně se stal oblíbeným pro své výborné mechanické vlastnosti, tepelnou stabilitu a chemickou odolnost. Mimo to nevykazuje žádnou mutagenní a toxickou aktivitu. PEEK však disponuje nižší povrchovou smáčivostí, což může omezovat jeho využití. Jeho povrch je proto potřeba vhodně modifikovat. Tato práce se zabývá změnami povrchových vlastností PEEK způsobené modifikací plazmatem za zvýšené teploty. Povrch polymerní fólie byl modifikován po různou dobu depozice (60, 120, 240 a 480 s) při různé teplotě (25, 37, 80, 100 a 121 °C). Výběr teploty vychází z praktických aplikací, kdy například 37 °C je teplota fyziologického prostředí lidského těla nebo 121 °C odpovídá teplotě sterilizace. Povrchové vlastnosti takto modifikovaného polymeru byly charakterizovány pomocí goniometrického měření smáčivosti, gravimetrie, mikroskopie atomárních sil (AFM) a rentgenové fotoelektronové spektroskopie (XPS).

Z-schéma pro fotolýzu vody – úprava rozhraní polovodičů

Bc. Kamil Severa (M1)

Školitel: Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.

Cílem této práce je úprava rozhraní polovodičových struktur (Z-schematických hybridních katalyzátorů) s potenciálním využitím pro fotolýzu vody. Jako komponenty pro fotokatalyzátor byly vybrány oxid wolframový a sulfid kademnatý pro svou vhodnou a komplementární pásovou strukturu. K úpravě jejich rozhraní bylo užito žíhání při různých teplotách. Od teploty 400 °C pozorujeme vznik nové struktury, kyslíkově vakantního oxidu wolframového WO_{3-x} , od teploty 500 °C a vyšších pak pozorujeme další novou komponentu – wolframan kademnatý $\text{Cd}(\text{WO}_4)$. WO_{3-x} se oproti původnímu WO_3 stává lépe vodivým. $\text{Cd}(\text{WO}_4)$ má potenciál fungovat na rozhraní WO_3/CdS jako elektronový mediátor a tím zlepšit katalytickou účinnost oddělením center s redoxně aktivnějšími nosiči náboje a plynulejším přechodem náboje mezi energetickými pásy komponent vytvořením elektronové kaskády. Se zvyšující se teplotou žíhání pozorujeme zvyšování krystalinity sulfidu kademnatého, což je považováno jako další krok ke zlepšení fotokatalytické aktivity. Procesem sintrace můžeme u všech žíhaných vzorků pozorovat lepší kontakt komponent. Kaskádová heterojunkce $\text{WO}_3/\text{Cd}(\text{WO}_4)/\text{CdS}$ vzniklá žíháním materiálu na 700 °C má z připravené řady vzorků nejlepší katalytickou aktivitu pro fotolýzu vody.



Detekce chiralidy farmakologických sloučenin

Bc. Anastasia Vulakh (M1)

Školitel: Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.

Stereochemie hraje velkou roli ve výrobě a vývoji léků. Organismus je soustavou chirálních komponentů, a proto chirální vlastnosti léčiva jsou významné při určování jeho farmakologických účinků. V posledních letech vzrostl zájem o enantioselektivní detekci opticky aktivních látek za účelem kontroly kvality lékařských preparátů. Několik běžně používaných analytických postupů enantioselektivní detekce jsou ovšem založené na technicky-náročných postupech. Tato práce se zaměřuje na enantioselektivní detekce léčiv prostřednictvím chirální Ramanovi spektroskopie s použitím hybridních struktur typu AuNPs@MOF. Byly připraveny plazmon-aktivní Au nanostruktury, na povrch kterých byl naroubován film homochirálního MOF – L-ZnAlaCl. Tento MOF je schopen k enantioselektivní adsorpci chirálních analytů. Metoda navázání filmu MOF na povrch zlatých nanočástic byla optimalizována a ověřena několika nezávislými technikami, SERS odezva připravených nanostruktur byla optimalizována a zatím ověřena na řadě modelových analytů.

Plazmonem indukovaná organická fotoelektrochemie

Bc. Nina Čepelková (M2)

Školitel: Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.

Nahrazení běžných redukčních a oxidačních činidel v tradiční organické chemii a chemické technologii přináší řadu ekologických a ekonomických výhod. Mezi ně patří například snížení množství odpadních produktů, rychlost, jednoduchost a nižší náklady. Alternativní cestu reprezentuje organická elektrochemie, která umožňuje provádět redoxní reakce přímo, bez použití dalších chemikálií. Současný trend představuje zapojení světla do procesu, díky kterému lze dosáhnout vyšší selektivity. Tato práce se zabývá fotoelektrochemickou aminací C-H vazby arenů, o kterou je zájem především díky všudypřítomnosti arylových C-N vazeb v léčivech, přírodních produktech, agrochemikáliích, pigmentech a optoelektronických materiálech. Elektrody byly vytvořeny z periodického polymerního substrátu s deponovaným kovem. Dalším krokem byla optimalizace reakčních podmínek a použitých elektod. K ověření funkčnosti dané metody a k doladění detailů byla provedena modelová reakce mezi anisolem a pyrazolem.

Materiálové inženýrství II

MÍSTO: B14

KOMISE

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

prof. Ing. Václav Švorčík, DrSc.

Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.

Ing. Alena Řezníčková, Ph.D.

doc. Ing. Zdeňka Kolská, Ph.D.

doc. Ing. Jaromír Lederer, CSc., UniCRE Litvínov

PROGRAM

09:00 **zahájení**

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

Plazmonová chemie ve vnějším elektrickém poli

09:15 [Bc. Jakub Dědek](#) (M1, prof. Ing. Václav Švorčík, DrSc.)

Plazmonem indukovaná konverze oxidu uhličitého na karbonáty za snížené teploty

09:30 [Bc. Olena Khrystonko](#) (M2, Ing. Roman Elashnikov, Ph.D.)

Plasmonická nanovlákná pro efektivní SERS detekci molekul.

09:45 [Bc. Kateřina Kubičková](#) (M2, prof. Ing. Petr Slepíčka, Ph.D.)

Povrchová modifikace dotovaného polystyrenu a jeho antibakteriální vlastnosti

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

Enantiosektivita v plazmon-indukované organo-katalýze.

10:15 [Bc. Vera Shilenko](#) (M1, Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.)

Nové materiály pro enantiosektivní redukci

10:30 [Bc. Barbora Vyhnálková](#) (M2, doc. Ing. Jakub Siegel, Ph.D.)

Antibakteriální povlaky na bázi stříbrných nanočástic pro polymery

10:45 [Bc. Klára Červenková](#) (M2, Ing. Nikola Slepíčková Kasálková, Ph.D.)

Příprava nanostruktur a kompozitů typu Au/C a Au/C/Au

11:00 [Bc. Anna Šebelová](#) (M2, Ing. Ondřej Kvítek, Ph.D.)

Příprava Ag nanočástic fotochemickou redukcí AgNO_3 v derivátech celulózy

Plazmonová chemie ve vnějším elektrickém poli

Bc. Sofiia Chufistova (M2)

Školitel: Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.

V posledních letech velkou pozornost získala povrchová plazmonová rezonance (SPR) nanočástic ušlechtilých kovů jako nástroj pokročilé aktivace fotochemických procesů. Excitace na povrchu kovových nanočástic SPR lze použít pro účinnou aktivaci řady fotochemických efektů přes mechanismy jako jsou lokalizovaná tvorba fototermálního tepla, injekce horkých elektronů a děr, nebo transfer vysoce energetických stavů. SPR efekt se současně začíná používat i v oblastí klasické organické chemie pro reakcí typu C-C coupling, oxidačně-redukčních reakcí atd. V naší skupině SPR byl poprvé aplikován pro iniciaci azid-alkyn cykloadice (AAC). V této práci jsem zkoumala možnost provádět cykloadici při aktivaci plazmonem za současného působení vnějšího elektrického pole. Hlavní předpoklad je založen na indukovaném štěpení molekulárního orbitalu v elektrickém poli s následným zvýšením pravděpodobnosti indukce horkého elektronu a tím i větší pravděpodobností aktivace chemické transformace. Kinetika a rychlost reakce AAC byla studována jako funkce času a intenzity elektrického pole. Vyhodnocení reakční kinetiky ukázalo, že reakční rychlost AAC je výrazně vyšší v přítomnosti elektrického pole než bez něj.

Plazmonem indukovaná konverze oxidu uhličitého na karbonáty za snížené teploty

Bc. Jakub Dědek (M1)

Školitel: prof. Ing. Václav Švorčík, DrSc.

Tato práce se zabývá možností použití plazmonové aktivace organických katalyzátorů pomocí (foto)chemických přeměn. Pomocí Turkevichovy metody vytvořené zlaté nanočástice, které byly modifikovány 1,5,7-triazabicyklohept-5-enem (TBD). Modifikace se prováděla v několika krocích s použitím ADT-OH, brom obsahujícím činidlem (2-Brompropionyl bromid) a TBD. Navázané molekuly TBD zaručují katalytickou aktivitu systému, zlaté nanočástice jsou zodpovědné za účinnou absorpci světla a foton-plazmonovou konverzi. Plazmony, jež byly excitovány na povrchu zlatých nanočástic, byly zodpovědné za katalytickou účinnost TBD. Připravený systém je možný použít pro řadu (foto)chemických transformací, jak při konverzi CO_2 , tak při „Ring-opening“ reakcích, Michaelově a Henryho reakcích. (Foto)chemické transformace se prováděly při osvětlení LED diodou. Transformace byly prováděny pod laboratorní i sníženou teplotou. Pro větší stabilitu je nyní zkoumána možnost roubování zlatých nanočástic na povrch nosiče Al_2O_3 .

Plasmonická nanovlákná pro efektivní SERS detekci molekul.

Bc. Olena Khrystonko (M2)

Školitel: Ing. Roman Elashnikov, Ph.D.

Povrchem zesílená Ramanova rozptylová spektroskopie (Surface-enhanced Raman spectroscopy - SERS) je extrémně citlivá analytická metoda využívaná k detekci vibračních signálů seskupení molekul, až po signály jednotlivých molekul. V souvislosti s tím byly připraveny měkké porézní SERS aktivní substráty z různých polymerních nanovláken pokrytých vrstvou nanočástic z ušlechtilých prvků. Nanovlákná byla připravena metodou elektrostatického zvlákňování. Morfologie a úzká distribuce nanovláken byla ověřena rastrovací elektronovou mikroskopií (scanning electron microscope - SEM). SERS signály byly analyzovány na základě druhu polymerních nanovláken a tloušťky vrstvy nanočástic. Chemické složení a homogenní distribuce prvků připravených substrátů byla potvrzena pomocí SEM-EDX (Energy-dispersive X-ray). Potenciální využití těchto substrátů bylo demonstrováno pomocí modelových látek za použití Ramanovy spektroskopie. Tento způsob přípravy umožňuje dosáhnout vyššího faktoru zesílení SERS než u plochých substrátů a demonstruje dokonalou reprodukovatelnost Ramanových signálů. Navíc mají tato nanovlákná vysoký potenciál pro praktické aplikace.

Povrchová modifikace dotovaného polystyrenu a jeho antibakteriální vlastnosti

Bc. Kateřina Kubičková (M2)

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

Tato práce se zabývá studiem morfologie povrchu vzorku polystyrenu dotovaného kyselinou acetylsalicylovou. Při tvorbě těchto vzorků byla využita metoda solvent casting. Na vytvořený substrát byla nanášena vrstva stříbra o různé tloušťce v závislosti na podmínkách (velikost použitého proudu, doba naprašování). Vzorky byly následně tepelně namáhány z důvodu ukotvení stříbra v substrátu a pro vytvoření wrinkles na povrchu substrátu. Vzorky polystyrenu dotovaného kyselinou acetylsalicylovou byly rovněž plazmaticky a laserově modifikovány. Vzorky byly opět tepelně namáhány a prostudovány. Morfologie všech vzorků byla analyzována pomocí metody AFM, povrchová chemie pak studována rentgenovou fotoelektronovou spektroskopií. Cílem práce je ovlivnění antimikrobiálních účinků polystyrenu dotovaného kyselinou acetylsalicylovou.

Enantioselektivita v plazmon-indukované organo-katalýze.

Bc. Anna Kushnarenko (M2)

Školitel: Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.

V posledních letech dochází k značnému pokroku ve vývoji organokatalytických systémů, založených na použití chirálních organických katalyzátorů a výsledné enantioselektivní syntéze. Organokatalyzátory dokážou spustit kaskádovou reakci, která nejenom reakci zrychluje, ale navíc dokáže snížit množství nežádoucích vedlejších produktů reakci na výstupu. Syntéza čistých enantiomerů je velmi technologický vhodný proces, zejména z hlediska přidané hodnoty, a proto organická enantioselektivní katalýza se používá jak ve vědě, tak i v škálovatelném farmaceutickém průmyslu. V této práci byla provedena reakce aldolové kondenzaci 4-chlorbenzaldehydu s acetonem pomocí katalýzy na bázi L-prolinu, AuNPs. Cílovým produktem byl 4-(4-Chlorfenyl)-4-hydroxy-2-butanon, Tento produkt je nestabilní za laboratorní teploty, ovšem L-prolin vykazuje nízkou katalytickou aktivitu při snížené teplotě. Pomoci efektu povrchové plazmonové rezonance na zlatých nanočásticích bylo poprvé docíleno značně vyšších výtěžků v reakci aktivované L-prolinem při nižších teplotách, a dokonce ve velké míře došlo k snížení výtěžku nežádoucího Mannichova produktu.

Nové materiály pro enantioselektivní redukci

Bc. Vera Shilenko (M1)

Školitel: Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.

Velkou vědeckou pozornost přitahuje přeměna sloučenin získaných z biomasy na chemikálie, které lze dále využít jako prekurzory ve farmaceutickém průmyslu. Zejména zajímavým je studium hydrogenace organických molekul jako jsou karbonylové sloučeniny (např. acetofenon nebo ethylpyruvát). V posledních letech vzrostl zájem o řízení těchto reakcí pomocí elektrochemie v důsledku zjednodušení procesu a zavedení postupů tzv. „green“ chemie. Klíčovou otázkou, a to i z hlediska farma-průmyslu je enantioselektivita produktů. Hlavním způsobem zvýšení enantio-selektivity reakce je správná volba katalyzátoru na povrchu elektrody. Většina katalyzátorů je založena na komplexech vzácných kovů, což výrazně omezuje technologickou použitelnost výroby farmaceutik z biomasy. Tato práce se zabývá studiem elektrochemické redukce acetofenonu na elektro- a fotoaktivní elektrodě s přihlédnutím k možnostem získání enantio-čistého produktu redukcí.

Antibakteriální povlaky na bázi stříbrných nanočástic pro polymery

Bc. Barbora Vyhnálková (M2)

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

Projekt se zabývá úpravou polymerních biomateriálů a jeho cílem je připravit antibakteriální povlak, který by omezoval riziko vzniku infekce při aplikaci daného materiálu. Na povrch polyetheretherketonu (PEEK) byly pomocí excimerového laseru z roztoku imobilizovány stříbrné nanočástice (AgNPs). Polovina vzorků byla ještě před imobilizací AgNPs povrchově modifikována pomocí laseru. U připravených kompozitů byly následně zkoumány jejich vlastnosti. Povrch byl charakterizován pomocí AFM, SEM, XPS, goniometrie a UV-Vis spektroskopie. Uvolňování AgNPs do okolního prostředí bylo studováno pomocí výluhů; byl proveden experiment za statických i dynamických podmínek a množství uvolněného stříbra bylo stanoveno pomocí ICP-MS.

Příprava nanostruktur a kompozitů typu Au/C a Au/C/Au

Bc. Klára Červenková (M2)

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

Uhlík, prvek mnoha forem a různých vlastností. Jedna z posledních objevených forem uhlíku je Q – uhlík, jehož příprava není vůbec jednoduchá a vyžaduje velmi specifické podmínky. Pokud nejsou podmínky pro vznik Q-uhlíku ideální, je možné připravit stejnými metodami jiné a nové formy/strukтуры uhlíku, které mohou mít také unikátní a jedinečné vlastnosti. Tyto formy vznikají díky vysoké schopnosti uhlíku se různě vázat a jednotlivé formy uhlíku nachází uplatnění v mnoha odvětvích. Cílem práce je příprava a charakterizace nanostruktur a kompozitů typu Au/C a Au/C/Au. K přípravě jednotlivých vzorků byly použity dvě metody (napařování a naprašování). Pro vzorky typu Au/C byly obě vrstvy připraveny metodou naprašování. V případě vzorku Au/C/Au byly použity v kombinaci obě výše uvedené metody. Vybrané vzorky byly na jednu hodinu vystaveny tepelnému namáhání při 280 °C a následně byly modifikovány laserovým zářením. Charakterizace takto připravených vzorků spočívala nejprve ve studiu povrchové morfologie.

Příprava Ag nanočástic fotochemickou redukcí AgNO_3 v derivátech celulózy

Bc. Anna Šebelová (M2)

Školitel: Ing. Ondřej Kvítek, Ph.D.

Deriváty celulózy se díky své rozpustnosti ve vodě nebo běžných organických rozpouštědlech, biokompatibilitě a biodegradabilitě a nízkých nákladech na výrobu jeví jako vhodné nosiče pro řízenou dopravu a uvolňování léčiv do organismu. Tato práce se zabývala přípravou nanočástic stříbra fotochemickou redukcí AgNO_3 v různých derivátech celulózy. Nejprve byly zkoumány ve vodě rozpustné deriváty karboxymethylcelulóza (CMC) a hydroxypropylmethylcelulóza (HPMC) společně se stříbrem ve formě roztoků, dále byly z těchto roztoků připraveny fólie a pomocí spin-coatingu tenké vrstvy na skleněných substrátech. Vlastnosti těchto vzorků byly studovány pomocí UV-VIS spektrometrie, IČ spektrometrie, konfokální mikroskopie, gravimetrie a metody dynamického rozptylu světla (DLS). Následně byla zkoumána možnost přípravy micel se stříbrnými nanočásticemi z roztoku ethylcelulózy (EC) v dichlormethanu s přídavkem CTAB (hexadecyltrimethylamoniumbromid) a vodného roztoku AgNO_3 . Dále bude optimalizován poměr koncentrací výchozích látek tak, aby bylo dosaženo požadované velikosti stříbrných nanočástic a jejich dalších vlastností, jako je například antibakteriální účinek.

Ústav informatiky a chemie (143)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Jiří Jirát, Ph.D.

SEZNAM SEKCI

1. [Bioinformatics and modelling](#)
2. [Cheminformatics](#)

Bioinformatics and modelling

MÍSTO: B35

KOMISE

Prof. Daniel Svozil, MSc, PhD (předseda)

Danny Bitton, MSc, PhD

Ing. Jiří Jirát, Ph.D.

Mgr. Michal Kolář, Ph.D.

doc. Ing. Filip Lankaš, Ph.D.

Mgr. Jan Pačes, Ph.D.

Ing. Janka Puterová, DNANexus

Ing. Martin Šícho, Ph.D.

PROGRAM

10:45 **zahájení**

11:00 [Květa Brázdilová](#) (M2, prof. Mgr. Daniel Svozil, Ph.D.)

Prediction of antibody developability from protein sequence

11:15 [Bc. Jozef Fülöp](#) (M1, None)

Bioinformatic searching for GT-A glycosyltransferases in Mycobacterium tuberculosis

11:30 [Marharyta Klianitskaya](#) (M2, Mgr. Jan Pačes, Ph.D.)

Analysis of expression of endogenous retroviruses in thymus: relevance for antigen presentation and autoimmunity.

11:45 [Bc. Eliška Lieberzeitová](#) (M2, Mgr. Jan Pačes, Ph.D.)

Understanding the Language of Introns and Exons from Nucleotide Sequence

12:00 [Bc. Kateřina Večerková](#) (M1, doc.Ing. Filip Lankaš, Ph.D.)

Efficient computation of rigid base coordinates in DNA oligomer structures

12:15 [Martina Zoubková](#) (M1, doc.Ing. Filip Lankaš, Ph.D.)

Context-dependent structural properties of methylated and unmethylated DNA

Prediction of antibody developability from protein sequence

Květa Brázdilová (M2)

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

The development of therapeutic monoclonal antibodies (mAbs) is a multi-billion-dollar industry with nearly a hundred therapeutic antibodies currently approved for use in the EU and much more waiting for approval. However, the journey of a therapeutic mAb from discovery to the market is long and costly and can be marred by unsuitable properties of the antibody, such as aggregation or low stability. Developability index is a metric that aims to predict the antibody's likelihood of reaching clinical stages. It can be calculated from the three-dimensional structure of the antibody, but the structure is often not available and its modeling can be computationally demanding and imprecise. Therefore, we aim to predict the developability index of antibodies directly from the amino acid sequence using machine learning. Various preprocessing and feature extraction methods are applied to a set of antibody sequences with known structures in order to obtain multiple training datasets. Different machine learning models are then compared in terms of classification performance.

Bioinformatic searching for GT-A glycosyltransferases in Mycobacterium tuberculosis

Bc. Jozef Fülöp (M1)

Školitel: None

Mycobacterium tuberculosis is a pathogenic bacterium and can cause tuberculosis. Because this bacterium has a poorly permeable cell wall, which complicates the treatment of this disease, it is essential to focus on GT-A glycosyltransferases, which this bacterium uses, among other things, to build its cell wall. The reasons mentioned above make them an interesting therapeutic target for fighting this bacterium. It is important to identify yet undescribed glycosyltransferases in the genome of *M. tuberculosis* CDC1551. For their retrieval, the program Phyre2 is used, which is a program that deals with the prediction of the 3D structure of proteins from a sequence. This program also has a feature that allows you to use a protein with an already solved 3D structure to scan a particular genome and in this way find proteins that are likely to be structurally similar. From the proteins found, some hypothetical proteins were finally selected and further investigated using the functions of the Phyre2, BLAST, and RaptorX programs to predict their likely function and to determine whether they could be GT-A glycosyltransferases.

Analysis of expression of endogenous retroviruses in thymus: relevance for antigen presentation and autoimmunity.

Marharyta Klianitskaya (M2)

Školitel: Mgr. Jan Pačes, Ph.D.

Autoimmune diseases are pathologic conditions in which the reactivity of the immune system occurs in the form of autoantibodies and T-cell responses to self-structures. Autoimmune conditions, depending on the localization and severity of the process, lead to various clinical manifestations up to disability and death. To prevent the response of the T-cells on the tissues of their own body, maturing T-cells are checked in the thymic medulla for interaction with the vast majority of self-antigens, and in the case of strong interaction, are subjected to negative selection. In some autoimmune diseases, especially in such a severe one as multiple sclerosis, there is an abnormal activation of the expression of human endogenous retroviruses (HERVs). HERVs are sequences of viral origin, which compose about 8% of our genome and are traces of infections that affected the primates' germ line along the last 100 million of years. In this work, we process bulk and single cell RNA-seq of mouse and human thymus cells to analyze autoantigens of retroviral origin, which are presented to maturing T-cells during negative selection.

Understanding the Language of Introns and Exons from Nucleotide Sequence

Bc. Eliška Lieberzeitová (M2)

Školitel: Mgr. Jan Pačes, Ph.D.

Genetic information in organisms is stored in a form of a DNA molecule. The information in the genome is not random. Therefore, certain patterns can be distinguished using various techniques. Gene coding and non-coding region determination from nucleotide sequence is the main focus of this work. Tokenization, a data compression algorithm, seem to be a useful tool in the process of understanding the language of genomes.

Efficient computation of rigid base coordinates in DNA oligomer structures

Bc. Kateřina Večerková (M1)

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

Structural and mechanical properties play a significant role in biological function of nucleic acids. Sequence-dependent structure of nucleic acids determines ligand binding, nucleosome positioning, promotor location, gene regulation and chromatin organisation. In this contribution, the conformation of nucleic acids is considered at the level of the rigid base approximation. In the rigid base model, nucleic acids are described using internal coordinates defining the relative displacement and orientation of bases within and between base pairs. Programs in C and Python were developed for efficient computation of these coordinates from molecular dynamics simulation data. The accuracy of the coordinate computation was verified, and runtime was compared to the standard software packages. The C program is roughly ten times faster than the standard implementation.

Context-dependent structural properties of methylated and unmethylated DNA

Martina Zoubková (M1)

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

This work focuses on structural properties of methylated and unmethylated DNA depending on the context of bases around the CpG dinucleotides. Methylation plays a key role in many biological processes, such as gene expression, immune responses and organism development and aging. A suitable DNA sequence was divided into three parts. A copy of this sequence was then methylated. This way, six shorter sequences suitable for molecular dynamics simulations using AMBER software were obtained. Resulting trajectories were analysed by 3DNA software package. Data about local base-step parameters (shift, slide, rise, tilt, roll and twist) obtained by this analysis were processed in Python. Results suggest that there are changes to the local structure for distinct contexts, however, it is not possible to entirely rule out the impact of context context dependent population of BI/BII backbone substates.

Cheminformatics

MÍSTO: B35

KOMISE

Prof. Daniel Svozil, MSc, PhD (předseda)

Danny Bitton, MSc, PhD

Ing. Jiří Jirát, Ph.D.

Mgr. Michal Kolář, Ph.D.

doc. Ing. Filip Lankaš, Ph.D.

Mgr. Jan Pačes, Ph.D.

Ing. Janka Puterová, DNANexus

Ing. Martin Šícho, Ph.D.

PROGRAM

13:00 **zahájení**

13:00 [Bc. Martin Engst](#) (M1, prof. Mgr. Daniel Svozil, Ph.D.)

Implementation of chemical space visualization methods for de novo generation of chemical structures

13:15 [Bc. Valeriia Fil](#) (M2, prof. Mgr. Daniel Svozil, Ph.D.)

Influence of parameters on chemical space exploration with Molpher

13:30 [Dzianis Hancharyk](#) (M2, prof. Mgr. Daniel Svozil, Ph.D.)

Prediction of the number of synthesis steps for a given structure

13:45 [Simona Šuhajová](#) (M2, prof. Mgr. Daniel Svozil, Ph.D.)

Benchmarking linear structure notations for deep QSAR modelling

14:00 [Vít Turčín](#) (B1, None)

Stability of solvated electron in small ammonia clusters

14:15 [Bc. Dominika Zumrová](#) (M1, prof. Mgr. Daniel Svozil, Ph.D.)

Ensemble learning in QSAR

Implementation of chemical space visualization methods for de novo generation of chemical structures

Bc. Martin Engst (M1)

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

The exploration of chemical space is important not only during the design of drugs but also of other bioactive compounds that can be used by chemical biology for study of biochemical processes in living organisms. Lately one of the most progressive areas is the research of so called de novo molecular generators. Those generators are most often based on deep learning networks specifically trained for virtual design of bioactive compounds with specific properties (for example sufficient activity for a certain molecular target). Those algorithms can in a very short time generate a large amount of possible chemical structures of potential compounds, therefore it is necessary to effectively visualize and process such data, so those experiments can be intuitively evaluated by a human. In our laboratory, we have developed a web application called GenUI for working with de novo generators, which includes the visualization of compounds in a chemical space. The objective was to explore the different methods of chemical space visualization and integrate some of them into the existing app.

Influence of parameters on chemical space exploration with Molpher

Bc. Valeriia Fil (M2)

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

Chemical space is a virtual space consisting of all possible organic compounds. Its size is estimated to be in the order of 10^{60} molecules and, thus, its exploration is very important for the discovery of new bioactive compounds and drugs. Molpher is an open-source framework that enables to systematically generate chemical structures from chemical subspace potentially enriched by biologically active compounds. However, the number and quality of generated compounds depends on various Molpher parameters. In this work, we propose a set of quantitative measures based on prospective scaffold recall that enable to benchmark individual Molpher settings and we apply them to compare Molpher libraries of putative vitamin D receptor ligands.

Prediction of the number of synthesis steps for a given structure

Dzianis Hancharyk (M2)

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

Retrosynthesis steps prediction is a crucial task for organic chemists. This task often requires the identification of reactant molecules and possible reaction pathways for synthesizing a product molecule. Existing methods for this task mostly include time and computationally intensive algorithms. This work aims to research different machine learning models to identify some algorithms, which can be a good heuristic models for the task of retrosynthesis steps prediction. Such a model could drastically reduce the data processing time, while still produce good results.

Benchmarking linear structure notations for deep QSAR modelling

Simona Šuhajová (M2)

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

In this contribution, the influence of chemical linear notations and tokenization methods on neural network QSAR models is explored. Various molecular linear representations (SMILES, InCHI, SLN, DeepSMILES, SELFIES) are encoded into a vector using different tokenization methods (character-level, atom-level, 4-mers, SPE, BPE). These vectors serve as an input into a neural network that predicts a biological activity on VEGF2 (vascular endothelial growth factor) receptor. The quality of neural network models is assessed by the comparison of predicted and measured biological activities.

Stability of solvated electron in small ammonia clusters

Vít Turčín (B1)

Školitel: None

Liquid ammonia dissolves alkali metals, producing blue or bronze solutions. These solutions consist of alkali metal cations and electrons localized in solvent cavities. They are used in organic chemistry, for instance in the Birch reduction. It is known from the experiments that the smallest stable cluster containing a solvated electron, is composed of 13 ammonia molecules. On the other hand, the reported theoretical calculations on ideal clusters at 0 K show that the sufficient number of ammonia molecules is 6. To perform calculations with more physically meaningful results sampling thermal structures of small ammonia clusters is essential. As the first step in this work, the geometry of symmetric clusters 2 to 8 ammonia molecules with 1 excess electron were optimized using the hybrid DFT B3LYP functional. The local minima structures were verified using frequency analysis. Vertical detachment energies (VDE) were calculated on the optimized structures using B3LYP and MP2. The obtained VDE values show that 4-5 ammonia molecules are sufficient to stabilize 1 excess electron. The obtained VDE values from ideal clusters set the lower limit energy for comparison with VDEs on thermal structures. These will be prepared using ab-initio molecular dynamics simulation during future studies.

Ensemble learning in QSAR

Bc. Dominika Zumrová (M1)

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

Ensemble models in machine learning combine the decisions from multiple models to improve the overall performance. This contribution deals with the study of the use of established ensemble methods (e.g., bagging, boosting or stacking) for the prediction of biological activity of organic compounds from their structure (QSAR). The aim of the work was to implement models in Python, to use them for the prediction of ligands biologically active on the vitamin D receptor and on vascular endothelial growth factor and to discuss their advantages and disadvantages. I focused on the comparison of ensemble methods with each other and with individual models. I thoroughly researched each ensemble algorithm, and I found the best weak learners or the best combination of parameters. The best results on both datasets were provided by the Stacking model. The use of ensemble methods in machine learning provides better results, even though they are more computationally time-consuming than using stand-alone models.

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: PŘÍZEMÍ BUDOVY A, CHODBA G

KOMISE

doc. Dr. Ing. Michal Ďurovič (předseda)

Ing. Vítězslav Knotek, Ph.D.

Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.

doc. Ing. Alexandra Kloužková, CSc.

PROGRAM

09:00 zahájení

[Zuzana Bránická](#) (B3, None)

Prieskum a záchrana historickej rukopisnej knihy

[Bc. Andrei Kazanskii](#) (B1, doc. Dr. Ing. Michal Ďurovič)

Interakce diazotypů a materiálů archiválií

[Bc. Artur Kossevanov](#) (B1, Ing. Klára Drábková, Ph.D.)

Barvení hedvábných textilií

[Lenka Lopatková](#) (B1, None)

Využitie nízкотеплотnej atmosférickej plazmy v procesoch konzervovania drevenných predmetov

[Bc. Adéla Marešová](#) (M2, doc. Ing. Milan Kouřil, Ph.D.)

Rezistometrická čidla pro korozní monitoring reálných povrchů

[Barbora Řípová](#) (B4, doc. Ing. Alexandra Kloužková, CSc.)

Restaurování mlékovky a talíře z produkce míšeňské porcelánky

[Eliška Špotová](#) (M2, Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.)

Restaurování dámského stříbrného čepce

Prieskum a záchrana historickej rukopisnej knihy

Zuzana Bránická (B3)

Školiteľ: None

Predkladaná práca sa zameriava na literárnu rešerš kultúrohistorického pozadia a prieskum fyzického stavu a materiálového zloženia historickej rukopisnej náboženskej knihy v latinskom jazyku, ktorá je v koženej šitej väzbe a pochádza z Maďarska zo 60. rokov 18. storočia. V experimentálnej časti práce bolo vykonané meranie kyslosti papiera, ktoré poukazuje na mierne kyslé hodnoty pH papiera, atramentu a knižnej dosky. Bola uskutočnená röntgenová fluorescenčná analýza (XRF), ktorá poukázala na prítomnosť železogatových atramentov ako písacieho prostriedku, ktorý je mierne zhnednutý, avšak neporušený a veľmi dobre čitateľný. Kniha je poškodená, znečistená a rozpadá sa, preto je dôležité na základe materiálového prieskumu vykonaného v tejto práci uskutočniť reštaurátorský zásah.

Interakce diazotypů a materiálů archiválií

Bc. Andrei Kazanskii (B1)

Školitel: doc. Dr. Ing. Michal Ďurovič

Diazotypie (diazografie, whiteprint) je kopírovací technika, která byla v průběhu 20 století často využívána při výrobě velkoplochých kopií, map, plánů, stavebních výkresů a jiné převážně technické dokumentací. Dnes v muzeích a archivech můžeme najít obrovské množství historického diazografického papíru, který byl původně produkován jako „pracovní kopie“, ale nyní se často má hodnotu originálů. Je třeba mít na paměti, že diazotypy nestálé formy záznamu informací. Po dlouhodobé expozici v agresivním prostředí, zejména s přístupem ultrafialového záření, dochází k rychle degradaci tohoto materiálů a k postupnému zmizení záznamu z papírové podložky. Není zřejmé, do jaké míry degradační produkty diazotypů mohou negativně ovlivňovat jiné archiválie nebo použité obaly, se kterými jsou v těsném dlouhodobém kontaktu. Ale je možné předpokládat, že jednou z možností prodloužení životnosti záznamu diazotypů i samotného papírového podkladu, je přijetí vhodných preventivních opatření, konkrétně jejich vhodná adjustace. Cílem této práce bylo studium vlivu různých typů lignocelulosových obalových materiálů na degradační procesy jak samotného záznamu diazotypu, tak papírového nosiče. Dále byl zkoumán možný vlivu produktů rozpadu diazotypu na archivní dokumenty uložené v jeho těsné blízkosti.

Barvení hedvábných textilií

Bc. Artur Kossevanov (B1)

Školitel: Ing. Klára Drábková, Ph.D.

Práce se zabývá problematikou dlouhodobé stability hedvábných textilií obarvených různými typy barviv (kyselá Rybacidová, 1:2 kovokomplexní Ostalanová, přímá Saturnová, reaktivní Ostazinová a Avitera, směsná Lanasetová, v maloobchodech běžně dostupná Duha) pro účely restaurování. Důvodem zkoumání byla absence studie, která by se tomuto tématu věnovala. Pro testování byly použity žluté a červené odstíny. Takto byly připraveny dvě sady vzorků s odlišnou závěrečnou úpravou: vypráním ve vodě a mydlením v roztoku tenzidu Syntaponu ABA. Dlouhodobá stabilita byla sledována po různých typech umělého stárnutí (vlhké teplo, suché teplo, světelné záření se zvýšeným podílem UV). Kritéria, podle kterých byla hodnocena barviva jsou následující: dlouhodobá stabilita barevného odstínu, egalita obarvení, zapouštěcí zkouška, pevnost nití v tahu, stanovení limitního viskozitního čísla. Ze získaných výsledků byla vybrána barviva vhodná pro restaurování textilií (Ostalanová, Saturnová, Avitera), použitelná (Lanasetová, Duha) a nevhodná (Rybacidová, Ostazinová).

Využitie nízкотеплотnej atmosférickej plazmy v procesoch konzervovania drevených predmetov

Lenka Lopatková (B1)

Školiteľ: None

V konzervátorskej praxi sú využívané viaceré účinné metódy čistenia drevených artefaktov, ale tieto metódy pozostávajú z viacerých krokov a zahŕňajú použitie toxických organických rozpúšťadiel. Preto je potrebné hľadať nové, efektívnejšie metódy čistenia. Cieľom práce bolo porovnať účinky nízкотеплотnej atmosférickej plazmy so štandardnými postupmi čistenia dreveného artefaktu a následne vybrať vhodné podmienky opracovania plazmou. Na základe výsledkov sa pre ďalšie skúmanie vybralo použitie plazmy v atmosfére vzduchu a argónu na pripravené modelové vzorky dubového dreva ošetrovaného povrchovou šelakovou úpravou. Účinky pôsobenia nízкотеплотnej atmosférickej plazmy sa vyhodnocovali opticky pomocou mikroskopu a zmeny v chemickom zložení povrchu boli vyhodnocované spektrometrom. Z nameraných výsledkov práce vyplývajú konkrétne podmienky, pri ktorých pôsobenie plazmy na povrch dreva so šelakovou úpravou nevedie k degradácii laku a pri ktorých možno predpokladať priaznivý vplyv plazmy pri čistení drevených artefaktov. Práca bola vypracovaná v rámci projektu APVV-15-0460.

Rezistometrická čidla pro korozní monitoring reálných povrchů

Bc. Adéla Marešová (M2)

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

Rezistometrie je jednou z metod monitoringu vnitřních prostor kulturních památek, muzeí a archivů, kde je důležité rychle zachytit malé změny prostředí. Tato metoda využívá čidla s tenkou kovovou stopou, jejichž odpor se mění se změnou průměru stopy. Z měření odporu lze získat časovou závislost úbytku kovu, která odpovídá korozivitě prostředí. V rámci této práce byla připravena čidla s vrstvou korozních produktů, která se blíží povrchu kovových předmětů kulturního dědictví. Byly vyzkoušeny různé varianty čidel a způsobů předkorodování a porovnána jejich citlivost a preciznost měření. Také byl otestován nový způsob zpracování dat z čidel, který umožňuje přesnější vyhodnocení korozního úbytku hlavně u čidel s větší tloušťkou stopy.

Restaurování mlékovky a talíře z produkce míšeňské porcelánky

Barbora Řípová (B4)

Školitel: doc.Ing. Alexandra Kloužková, CSc.

Práce popisuje restaurátorský zásah na mlékovce a talíři z produkce míšeňské porcelánky. Předměty jsou na dně značeny pro manufakturu typickými kobaltově modrými zkříženými meči různého provedení, což naznačuje odlišnou dataci. Zdobení má formu motivu „Voller grüner weinkratz“ v chromoxidové zeleni se zlacenými linkami. Počáteční běžné znečištění objektů doplňovaly u mlékovky „rezavé“ stopy po předchozím adhezivu, poškození v oblasti hrdla, podstavy a fragmentované ucho. Od talíře byl oddělen jeden masivní střep. Předměty byly očištěny pomocí detergentu TWEEN 20, střepy separovány 10 % roztokem Paraloidu B72 v acetonu a slepeny epoxidovým adhezivem HXTAL NYL-1. Následovalo doplnění epoxidovým tmelem MILLIPUT SUPERFINE WHITE, mechanická retuš doplňků a barevné doladění pomocí akrylových barev FOLKART modifikovaných pigmenty KREMER. Na závěr proběhla simulace glazury epoxidovým adhezivem dříve užitým k lepení a nakonec napodobení zlatých linek pomocí zlaté barvy FOLKART. V průběhu restaurování byly odebrány vzorky pro stanovení pórovitosti a nasákavosti, dále pak pro chemické (XRF) a mineralogické (XRD) analýzy složení střepové hmoty a glazury. Závěrem byly navrženy vhodné podmínky uložení a manipulace. Práce proběhly v souladu s restaurátorským záměrem schváleným zadavatelem.

Restaurování dámského stříbrného čepce

Eliška Špotová (M2)

Školitel: Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.

Restaurování dámského stříbrného čepce proběhlo v akademickém roce 2018/19 v rámci předmětu Semestrální práce V v restaurátorských dílnách VOŠTŘ, Praha 1. Jedná se o tuhý dýnkový čepce zdobený paličkovanými krajkami a velkou zelenou mašlí. Byl proveden podrobný textilně technologický průzkum tkanin, stuhy i kraje na čepci. Restaurátorský zásah spočíval v čištění čepce a konsolidaci poškozených míst. Čepce byl čištěn suchou cestou odsátím nečistot muzeálním vysavačem a stíráním vatovými tampony, kovové krajky byly stírány tampony navlhčenými etanolem. Zelená mašle a textilní krajka byly demontovány a čištěny mokrou cestou na stole se spodním odtahem. V rámci konsolidace byla černá lemovka překryta hedvábnou krepelínou, poškozená místa na textilní krajce a zelené mašli podložena vhodnou tkaninou a zasketována. Skeletované byly také trhliny ve tkanině na dýnku a skeletovací steh byl použit i na přichycení uvolněných kovových lamel. Nakonec byly kovové krajky vyrovnány a textilní krajka a mašle byly zpětně našity k čepci. Pro čepce byla vyrobena krabice z lepenky Klug a vycpávka z neběleného bavlněného plátna a byly stanoveny podmínky uložení a vystavování.

