



FAKULTA
CHEMICKÉ TECHNOLOGIE
VŠCHT PRAHA

Studentská Vědecká Konference

2020

19. 11. 2020

SBORNÍK ANOTACÍ

Fakulta chemické technologie

Organizační tým

FAKULTNÍ KOORDINÁTOR

doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.

Ing. Bc. Michal Himl, Ph.D.

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOŘI

101 **Ústav anorganické chemie**

Ing. Hana Kotoučová, Ph.D., Doc. Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.

105 **Ústav anorganické technologie**

Ing. Miloslav Lhotka, Ph.D.

106 **Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství**

Ing. Jan Šerák, Ph.D.

107 **Ústav skla a keramiky**

Ing. Tereza Uhlířová, Ph.D.

108 **Ústav chemie pevných látek**

Ing. Eva Bedrnová

110 **Ústav organické chemie**

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

111 **Ústav organické technologie**

Ing. Iva Paterová, Ph.D.

112 **Ústav polymerů**

Ing. Lucie Reinišová

126 **Ústav inženýrství pevných látek**

Ing. Alena Řezníčková, Ph.D.

[143](#) **Ústav informatiky a chemie**

Ing. Jiří Jirát, Ph.D.

[148](#) **Ústav chemické technologie restaurování památek**

Ing.et BcA. Martina Kmoníčková

Ústav anorganické chemie (101)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Hana Kotoučová, Ph.D.

Doc. Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.

SEZNAM SEKČÍ

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

Ústav anorganické chemie - S1

MÍSTO: TEAM'S - SVK

KOMISE

Doc. Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D. (předseda)

Ing. Hana Kotoučová, Ph.D.

Doc. Ing. Kateřina Rubešová, Ph.D.

Ing. Jakub Altšmíd, Ph.D.

Ing. Martin Pižl, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:15 [Ivana Faltysová](#) (B2, Doc. Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.)

Kompozitní materiály na bázi MOC dopované grafenem a dalšími aditivy

09:30 [Veronika Kaďorková](#) (B2, Mgr. Alan Liška, Ph.D.)

Elektrochemické studium azamakrocyclických komplexů mědi

10:00 [Herbert Kindl](#) (B2, doc. Ing. Kateřina Rubešová, Ph.D.)

Příprava (Pb,Sr)HfO₃ z roztoků

10:15 [Phuong Thao Ngoová](#) (B3, Ing. Vlastimil Mazánek, Ph.D.)

Využití vrstevnatých karbidů přechodných kovů v elektrochemické detekci psychoaktivních látek

10:30 [Jan Sklenka](#) (B2, Doc. Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.)

Příprava a vlastnosti supravodivých kompozitů na bázi YBCO a jejich recyklace

10:45 [Vojtěch Ševčík](#) (B2, Ing. Vít Jakeš, Ph.D.)

Možnosti přípravy transparentní keramiky YAG:Ce

vyhlášení výsledků

Kompozitní materiály na bázi MOC dopované grafenem a dalšími aditivy

Ivana Faltyšová (B2)

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

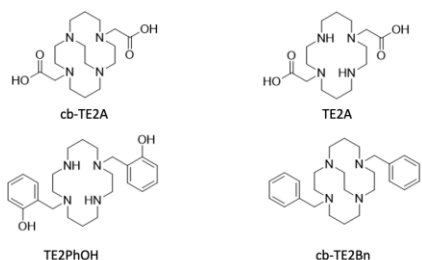
Tématem této práce je příprava a charakterizace hořečnatých pojiv dopovaných grafenem. Nejdříve byly z MgO a MgCl₂ připraveny čisté referenční materiály obsahující pouze fázi 5 (5Mg(OH)₂·MgCl₂·8H₂O). Následně byly připraveny kompozitní materiály s 0,2 hm. % a s 0,5 hm. % grafenu. Připravené vzorky byly detailně analyzovány vzhledem k jejich chemickému a fázovému složení a mechanickým vlastnostem. Při mechanických testech bylo zjištěno, že tyto materiály dosahují výrazně vyšších hodnot pevností v tlaku než čisté MOC. Následně byly připraveny i kompozity s různým obsahem dalšího aditiva simulujícího měsíční horninu regolit. I tyto kompozitní materiály vykazovaly velmi zajímavé mechanické vlastnosti. Všechny připravené materiály byly podrobeny analýze širokým spektrem analytických metod – rentgenové difrakční analýze (XRD), skenovací elektronové mikroskopii (SEM), energetické disperzní spektroskopii (EDS), transmisní elektronové mikroskopii (TEM), optické mikroskopii (OM) a rovněž byla zjištěna pevnosti v tlaku a v ohybu. Kompozity MOC-grafen by mohly najít využití ve stavebnictví, zatímco kompozity MOC-grafen-regolit by ve vzdálené budoucnosti mohly najít uplatnění pro stavby celé infrastruktury na Měsíci.

Elektrochemické studium azamakrocyclických komplexů mědi

Veronika Kadřorková (B2)

Školitel: Mgr. Alan Liška, Ph.D.

Azamakrocyclické ligandy cyklámového typu jsou již delší dobu studovány s ohledem na jejich potenciální využití jako chelatanty kovů v medicíně. Deriváty cyklámu jsou využívány nejvíce pro navázání radioizotopů mědi v radiomedicínském zobrazování (izotop ^{64}Cu) a v radioterapii (izotop ^{67}Cu). Aby se zabránilo nespecifickému ukládání izotopů mědi, je nutné tyto ionty aplikovat ve formě termodynamicky stabilních a zároveň kineticky inertních komplexů. V rámci příspěvku bude prezentována série čtyř mědnatých komplexů s ligandy, které jsou znázorněny na obrázku. Elektrochemická měření byla provedena metodami DC-polarografie a cyklické voltametrie na rtuťové kapce Na základě půl vlnových potenciálů bylo zjištěno, že v prostředí acetátového pufru při pH 5 dochází ke vzniku komplexů s ligandy nesoucími koordinující pendantní remena ihned po smíchání reaktantů. Z karboxylátových ligandů silnější komplex tvoří přemostěný ligand cb-TE2A. Jeho nepřemostěný analog TE2A tvoří méně stabilní komplex. Ligand TE2PhOH, který obsahuje kyslíkaté donorové atomy fenolové skupiny, tvoří ještě méně stabilní komplex. Přemostěný čistě N-donorový ligand cb-TE2Bn za těchto podmínek mědnatý ion nekoordinuje.



Příprava (Pb,Sr)HfO₃ z roztoků

Herbert Kindl (B2)

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

Scintilátory jsou látky, které mají schopnost interagovat s vysokoenergetickým zářením za emise viditelného nebo ultrafialového záření. Schopnost scintilace je spojená s některými vlastnostmi materiálu, mezi něž se řadí např. hustota, pro kterou platí, že materiál o větší hustotě má větší pravděpodobnost zachycení energetické částice. S hustotou velmi úzce souvisí efektivní atomové číslo Z_{eff} , které můžeme považovat za průměr atomových čísel jednotlivých prvků sloučeniny. Pro maximalizaci obou těchto kritérií je tedy vhodné použít těžké prvky, jako je hafnium, lutecium či olovo. Oxid PbHfO₃, který v obou těchto ohledech exceluje s hustotou $\rho = 10.2 \text{ g/cm}^3$, nebyl doposud pro účely scintilace zkoumán. Pb²⁺ ionty vykazují fotoluminiscenci přechodu 6s-6p, při vysoké koncentraci ale dochází ke koncentračnímu zhášení. Pro zředění byly vybrány ionty Sr²⁺, protože SrHfO₃ je již zkoumaným scintilátorem, se kterým by mohl být PbHfO₃ mísitelný, vzhledem ke strukturním podobnostem. Příprava Pb_xSr_(1-x)HfO₃, kde $x \in <0,1>$, byla prováděna z roztoku, nejdříve pomocí Pechiniho metody, od které se ustoupilo z důvodu přítomnosti halogenidů v produktu. Jako efektivní se projevila oxidační peroxo metoda, která poskytla produkty bez příměsí a nečistot. Všechny vzorky byly charakterizovány pomocí XRD.

Využití vrstevnatých karbidů přechodných kovů v elektrochemické detekci psychoaktivních látek

Phuong Thao Ngoová (B3)

Školitel: Ing. Vlastimil Mazánek, Ph.D.

MAX fáze jsou vrstevnaté karbidy nebo nitridy s obecným vzorcem $M_{n+1}AX_n$, kde M je přechodný kov, A označuje kovy nebo polokovy především z 13.-16. skupiny (např. Al, Ga, Ge, As), X je uhlík nebo dusík a kde $n = 1 - 3$. MAX fáze vykazují vysokou elektrickou a tepelnou vodivost, mechanickou a teplotní stabilitu. Protože jsou M-A vazby oproti M-X vazbám slabé, je možné provést selektivní odleptání prvku A, které vede ke vzniku tzv. MXenů. Na jejich povrchu se nachází kov (např. Ti) a uprostřed mezi vrstvami kovů je uhlík nebo dusík. MXeny se řadí mezi sloučeninové 2D nanomateriály s velkou elektrochemicky aktivní plochou a dobrou elektrickou vodivostí. V této práci byly použity karbidy na bázi Ti, V, Nb a Ta. Rozšířené užívání nelegálních drog vedlo ke zvýšenému úsilí o vývoj a zdokonalování metod jejich stanovení ať již v zadržených vzorcích nebo biologických matricích např. z krve uživatelů. Vzhledem k dobré stabilitě, velkému povrchu a dobré elektrické vodivosti byly MXeny testovány pro elektrochemickou detekci tzv. ředících látek např. kofein či lidokain. V rámci této práce byla také studována jejich elektrochemická stabilita a heterogenní přenos elektronů.

Příprava a vlastnosti supravodivých kompozitů na bázi YBCO a jejich recyklace

Jan Sklenka (B2)

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

Tato práce se věnuje vysokoteplotním supravodivým diskům na bázi směsného oxidu mědi YBCO připravených v podobě jednodoménových monokrystalů 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. Tato práce se zabývá zejména možnostmi recyklace keramického kompozitu YBCO chemickou cestou. Klade si za cíl izolovat jednotlivé složky včetně vzácných zemin a dále navrhnout postup využití těchto materiálů pro přípravu nových disků. YBCO disky stejně jako jednotlivé frakce byly detailně analyzovány pomocí rentgenové fluorescence (XRF) a rentgenové difrakce (XRD). Jakmile dojde k optimalizaci této metody a její aplikaci do praxe, vyřeší se tím komplikovaný problém s ukládáním nebezpečného odpadu. Naopak může dojít k využití tohoto odpadu jako druhotné suroviny, což bude mít pozitivní účinek nejen na ekonomiku výroby, ale i na životní prostředí.



Možnosti přípravy transparentní keramiky YAG:Ce

Vojtěch Ševčík (B2)

Školitel: Ing. Vít Jakeš, Ph.D.

Transparentní keramika nachází mnohá uplatnění – od materiálů pro aktivní prostředí laserů až po ochranné prvky optických přístrojů – díky svým unikátním fyzikálním a optickým vlastnostem. Podmínkou pro přípravu transparentní keramiky je vysoce symetrická krystalová struktura, v nejlepším případě kubická. Při průchodu světla skrz takový materiál může dojít k rozptylu a tedy ke ztrátě transparentnosti, pokud materiál obsahuje nedokonalé hranice zrn, póry, sekundární fáze a další poruchy. Příprava transparentní keramiky spočívá ve snaze docílit co nejhomogennější keramiky s minimem pórů a optimální velikostí částic. Homogenity prekurzoru pro slinování lze dosáhnout přípravou z roztoku, ať už metodami sol-gel, nebo koprecipitací. Při vlastním slinování pak lze využít několika moderních metod, jako je například izostatické lisování za studena (CIP), vakuové žíhání nebo metoda SPS. Tato práce se zaměřuje na zpracování a analýzu kubického YAG dopovaného cerem připravovaného metodou sol-gel a zpracovávaného pomocí CIP a vakuového slinování. Fázové složení vzorků bylo zkoumáno rentgenovou difrakční spektrometrií (XRD), jejich prvkové složení rentgenovou fluorescenční spektroskopií (XRF). Skenovací elektronovou mikroskopií (SEM) byla následně zkoumána jejich struktura a velikost částic.

Ústav anorganické chemie - S2

MÍSTO: TEAM'S - SVK

KOMISE

Prof. Dr. Ing. David Sedmidubský (předseda)

Ing. Hana Kotoučová, Ph.D.

Ing. Tomáš Hlásek Ph.D.

Ing. Vlastimil Mazánek, Ph.D.

Ing. Jan Luxa, Ph.D.

PROGRAM

11:00 **zahájení**

11:45 [Dominik Chmelař](#) (B3, Ing. Vlastimil Mazánek, Ph.D.)

Použití germananu jako impedančního senzoru pro detekci těkavých látek

12:00 [Lukáš Hrubčík](#) (B3, Ing. Jiří Šturala, Ph.D.)

Fotomodifikace černého fosforu karbonyly přechodných kovů.

12:15 [Bc. Jan Konečný](#) (B1, Ing. Jiří Šturala, Ph.D.)

Fotochemická modifikace germananů karbonyly přechodných kovů

12:30 [Johana Melzerová](#) (B3, Ing. Vít Jakeš, Ph.D.)

LiAl₅O₈:V jako potenciální materiál pro detekci neutronů

12:45 [Jakub Volf](#) (B3, doc. Ing. Pavla Nekvindová, Ph.D.)

Fotoluminiscenční vlastnosti křemičitanových, boritokřemičitanových a boritanových skel dopovaných Ce³⁺ a Mn²⁺

13:00 [Daniela Štefanková](#) (B3, Ing. Vilém Bartůněk, Ph.D.)

Príprava a charakterizácia nanočastíc amorfného selénu

vyhlášení výsledků

Použití germananu jako impedančního senzoru pro detekci těkavých látek

Dominik Chmelař (B3)

Školitel: Ing. Vlastimil Mazánek, Ph.D.

Germanan je plně hydrogenovaný germanen, což je materiál, který je analogem grafenu z germania. Na povrch germananu se mohou adsorbovat různé plynné látky a tím ovlivňovat jeho vodivost. Důvodem k této dobré sorpci je sp^3 hybridizace germananu. Sorpční vlastnosti či odezva na adsorbované látky se dá ovlivnit pomocí kovalentních modifikací germananu. Výchozí substituent je u germananu vodík, ale může se modifikovat methylovými a jinými skupinami. Kromě elektrochemických vlastností, tyto modifikace upravují také stabilitu materiálu. Cílem této práce je syntéza germananů s různými substituenty, následné analyzování jejich vlastností a jejich možného využití jako elektrochemických senzorů. Germanany použité v této práci byly syntetizovány selektivním leptáním vápníku z $CaGe_2$. U materiálů byla ověřena jejich morfologie a chemické složení. Takto připravené materiály následně byly nanесeny na prstové interdigitalní elektrody. Detekční schopnosti připravených materiálů byly testovány pomocí elektrochemické impedanční spektroskopie.

Fotomodifikace černého fosforu karbonyly přechodných kovů.

Lukáš Hrubčík (B3)

Školitel: Ing. Jiří Šturala, Ph.D.

Černý fosfor patří mezi jednoprvkové 2D vrstevnaté materiály. Na rozdíl od grafenu a silicenu je struktura černého fosforu zprohýbaná. Navíc nabízí velmi široce rozprostřený zakázaný pás po elektromagnetickém spektru, který je ovlivněn jak substitucí, tak počtem vrstev. Hlavní nedostatky černého fosforu jsou především špatná ovlivnitelnost elektrické vodivosti a nestálost na vzduchu. Snažíme se tyto vlastnosti ovlivnit pomocí navázání komplexů přechodných kovů hlavně ve formě $M(CO)_6$ na volné elektronové páry za iniciace UV zářením. Doufáme, že tyto nově vzniklé materiály by mohly sloužit jako např. jako katalyzátory nebo sensory.

Fotochemická modifikace germananů karbonyly přechodných kovů

Bc. Jan Konečný (B1)

Školitel: Ing. Jiří Šturala, Ph.D.

Vrstevnatým materiálům se v dnešní době věnuje velká pozornost kvůli jejich specifickým vlastnostem, např. velký specifický povrch, katalytické a další vlastnosti, kterých potenciálně lze využít v nejrůznějších odvětvích, např. v elektronice, pro přípravu kompozitních materiálů pro baterie, sensory apod. Tyto vlastnosti se dají výrazně ovlivnit a přizpůsobit zamýšlené aplikaci pomocí chemické modifikace původního materiálu. Tato práce se zabývá fotochemickou modifikací germananů, vrstevnatých analogů grafenu založených na germaniu, pomocí karbonylů přechodných kovů ($M(CO)_6$), kdy vznikají tzv. polosendvičové komplexy mezi benzylem připojeným na germanan a kovem M. Reaktivita benzylní germananu se srovnává s reakcí bez ozařování, porovnává se vliv použitého rozpouštědla a také rozdíl použitého germananu (benzyl, methyl, H).

LiAl₅O₈:V jako potenciální materiál pro detekci neutronů

Johana Melzerová (B3)

Školitel: Ing. Vít Jakeš, Ph.D.

Detekci neutronů pomocí detektorů na bázi scintilátorů můžeme považovat za dvoukrokový proces. Nejprve dojde k interakci neutronů s atomovými jádry v materiálu za vzniku nových jader a ionizačního záření a následně detekci tohoto záření scintilačním materiálem. Některé izotopy mají vysoký účinný průřez pro zachyt neutronů a hodí se tak do složení scintilačního materiálu pro takový detektor. Jedním z takových izotopů je ⁶Li a fáze pseudobinárního systému Li₂O–Al₂O₃ jsou tedy možnými kandidáty pro vývoj detektorů neutronů. V této práci jsme se zaměřili na přípravu aluminátu LiAl₅O₈, který jsme dopovali vanadem na pozici hliníku v rozmezí 0,05 – 1 % (tj. V_xLiAl_{5-x}O₈, kde $x = 0,0025 - 0,05$). Luminiscence V^{IV} bude využita pro detekci ionizačního záření po absorpci neutronů. Všechny vzorky jsme připravili metodou sol-gel podle Pechiniho, abychom dosáhli co největší homogenity vzorku. Vzorky jsme následně analyzovali pomocí XRD pro zjištění fázového složení. Naším cílem bylo získat vzorky, které budou monofázové. Dalším analyzovaným faktorem byla radioluminiscence, kde jsme pozorovali zřetelný vliv koncentrace vanadu na intenzitu záření vzorku.

Fotoluminiscenční vlastnosti křemičitanových, boritokřemičitanových a boritanových skel dopovaných Ce^{3+} a Mn^{2+}

Jakub Volf (B3)

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

Práce je zaměřena na návrh a přípravu skla s absorpcí v zelené (cca 550 nm) a ultrafialové oblasti a fotoemisí v modré (cca 430 nm) a červené (cca 675 nm) oblasti spektra. Motivací je využití takového materiálu pro transformaci dopadajícího slunečního světla při pěstování řas za účelem podpory a zvýšení jejich růstu v bioreaktorech. Jako zajímavá se pro tyto účely ukázala kombinace iontů ceru a manganu. V laboratoři byla utavena čtyři základní skla s konstatním obsahem těchto iontů – sklo křemičitanové, sklo boritanové a jejich kombinace. U připravených skel byla měřena absorpční spektra, excitační a emisní spektra ve viditelné a UV oblasti, index lomu, Ramanova spektra. Metodou ESCA byl zkoumán také oxidační stav přidaných iontů. Z prvních výsledků je patrné, že vyšší intezitu fotoluminiscence vykazují a pro transformaci spektra jsou vhodnější boritá skla.

Príprava a charakterizácia nanočastíc amorfného selénu

Daniela Štefanková (B3)

Školiteľ: Ing. Vilém Bartůněk, Ph.D.

Svet nanočastíc sám o sebe za posledné desaťročia priťahuje značnú pozornosť vedeckých sfér. Veľmi často nanočastice vykazujú zaujímavé vlastnosti v porovnaní s ich makroformami – zmena farby a ďalších fyzikálnych a chemických vlastností, v niektorých prípadoch aj rozdielna toxicita. Nanočastice amorfného selénu sa zvyčajne pripravujú veľmi jednoduchou redukčnou reakciou medzi seleničitanom sodným a kyselinou askorbovou. Napriek značne jednoduchému a rozšírenému postupu prípravy zatiaľ nie je úplne zmapovaný mechanizmus danej reakcie. V tejto práci som zvolila postup prípravy z rovnakých reaktantov, avšak samotnú reakciu som ovplyvňovala rôznymi dodatočnými elementami a dejmi – rôzne pomery prídavkov reaktantov, zmena pH reakčnej zmesi, prídavok kyseliny chlorovodíkovej kvôli posúdeniu zmeny kyslosti na priebeh reakcie. Opticky bolo na prvý pohľad jasné, že reakčné podmienky značne ovplyvňujú výsledky reakcie či už z časového hľadiska alebo samotnej štruktúry častíc. Pripravené nanočastice som charakterizovala pomocou UV-VIS, SEM, XRF a optickej mikroskopie a výsledky zoradila do prehľadnej tabuľky tak, aby sa dal daný postup charakterizovať, prípadne štandardizovať a optimalizovať pre vybrané sféry využitia.

Ústav anorganické chemie - S3

MÍSTO: TEAM'S - SVK

KOMISE

Doc. Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D. (předseda)

Prof. Dr. Ing. David Sedmidubský

Ing. Tomáš Štícha

Ing. Jindřich Vítek

Ing. Hana Kotoučová, Ph.D.

Ing. Jiří Šturala, Ph.D.

PROGRAM

14:15 **zahájení**

14:00 [Bc. Lukáš Blažek](#) (M2, Ing. Ladislav Nádherný, Ph.D.)

Nanostrukturované ferrity dopované lanthanoidy pro magnetické aplikace

14:15 [Bc. Darya Ivanova](#) (M1, Ing. Vlastimil Mazánek, Ph.D.)

Synthesis of modified germanane and its application in a gas sensing

14:30 [Bc. Karla Jeníčková](#) (M2, doc. Ing. Pavla Nekvindová, Ph.D.)

Nanočástice zlata ve struktuře ZnO

14:45 [Bc. Adéla Jiříčková](#) (M2, Doc. Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.)

Grafenem vyztužené keramické kompozity na bázi Al_2O_3

15:00 [Bc. Anna-Marie Lauermannová](#) (M2, Doc. Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.)

Unikátní vlastnosti kompozitních materiálů na bázi reaktivního oxidu hořečnatého

15:15 [Bc. Lucie Speichalová](#) (M2, Ing. Jan Luxa, Ph.D.)

Elektrochemická exfoliace InSe

vyhlášení výsledků

Nanostrukturované ferrity dopované lanthanoidy pro magnetické aplikace

Bc. Lukáš Blažek (M2)

Školitel: Ing. Ladislav Nádherný, Ph.D.

Prezentovaná práce se zabývá přípravou a charakterizací nanostrukturovaného CoFe_2O_4 dopovaného lanthanoidy s využitím pro magnetické aplikace. Cílem práce je studovat metody přípravy těchto materiálů a následně dopováním lanthanoidy manipulovat s magnetickými vlastnostmi s cílem dosažení maximálního magnetokalorického efektu. Studovaný materiál nachází aplikační uplatnění především v magnetokalorických chladících zařízeních. Pro přípravu byly zvoleny sol-gelové metody s použitím různých chelatčních činidel. Byl studován vliv chelatačního činidla, způsobu gelatace, tlaku lisování tablet a teploty žíhání. Připravený materiál byl charakterizován z hlediska strukturní a fázové analýzy, velikosti částic, termického a magnetického chování. Podařilo se připravit nanostrukturovaný fázově čistý CoFe_2O_4 a také lanthanoidy dopovaný materiál. Optimalizací metody přípravy se podařilo několikanásobně snížit dobu přípravy.

Synthesis of modified germanane and its application in a gas sensing

Bc. Darya Ivanova (M1)

Školitel: Ing. Vlastimil Mazánek, Ph.D.

As a graphene analogue, germanene has been rapidly gaining popularity over the past few years especially for its distinctive chemical, thermal and electric properties. The synthesis of fully hydrogenated germanene is mainly based on chemical methods that are used to produce large layered crystals of by selective etching of calcium from its germanide which are also known as the Zintl phases in aqueous HCl. The layers are then obtained via mechanical exfoliation of the obtained re-stacked crystals. The purpose of this work was to investigate the possible application of germanane modified by organic residues for gas sensing. The tested substituents were chosen with different functional groups and chain length to show how they affect the physicochemical and electrochemical properties of germanane such as band gap or conductivity. Modified derivatives were synthesized by chemical exfoliation of layered CaGe_2 and their structure, composition and electrochemical properties have been characterized using scanning electron microscopy, infrared and Raman spectroscopy as well as electrochemical impedance spectroscopy to show the nanomaterials' abilities to detect a presence of volatile organic compounds.

Nanočástice zlata ve struktuře ZnO

Bc. Karla Jeníčková (M2)

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

Do tří různých krystalografických orientací wurtzitického ZnO byly implantovány Au^+ ionty různými energiemi. Připravené vzorky byly následně žíhány v kyslíkové atmosféře při 600 °C po dobu 1 h. Zkoumána byla pozice zlata ve struktuře ZnO a také strukturní změny spolu s defekty ve struktuře ZnO vzniklé implantací. Vzorky byly analyzovány pomocí TEM, HRTEM, RBS, RBS/C, Ramanovou spektroskopií a fotoluminiscenčním měřením. Výsledky ukazují, že ionty zlata se nedokáží obklopit kyslíkovými ionty v určitých koordinacích, ani vytvořit vazby s kyslíkem během žíhání. Zlato v ZnO se nachází v náhodných intersticiálních pozicích a tvoří kovové klastry a nanočástice o velikosti 2 až 20 nm. Výsledná krystalová struktura zlata není kubická, nýbrž hexagonální s mřížkovým parametrem 0,25 nm. Navíc implantace zlata vede k tvorbě zinkových a kyslíkových intersticiálů, které se liší charakterem podle krystalové orientace ZnO, což způsobí odlišnosti ve fotoluminiscenčním spektru vrstev. Předpokládáme, že implantace Au význaně změní vlastnosti ZnO jako jsou např. nelineární optické vlastnosti, elektrická vodivost a biologická reaktivita. Tyto změny budou zkoumány v budoucnu.

Grafenem vyztužené keramické kompozity na bázi Al_2O_3

Bc. Adéla Jiříčková (M2)

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

V této práci byl zkoumán vliv modelu uspořádání zrn v materiálu a přídavku oxidu grafenu do žárovzdorných materiálů na bázi Al_2O_3 -C s nízkým obsahem uhlíku na fyzikální a mechanické vlastnosti. Na jedné straně vzorky obsahovaly hrubá zrna Al_2O_3 povlakována suspenzí oxidu grafenu. Na straně druhé jsou vzorky, kde byl grafit buď zahrnut do modelu jako složka lubrikující matrice nebo do modelu vystupující jako kvazi-sférická součást Al_2O_3 agregátů. Oxid grafenu byl analyzován pomocí rentgenové fotoelektronové spektroskopie, energiově disperzní spektroskopie, elementární analýzy, skenovací elektronové mikroskopie a dalších analytických metod. Všechny vzorky byly připraveny ve formě trámečků. Následně byla vypočítána a změřena objemová hustota a pravá hustota, otevřená a totální porozita, Youngův modul pružnosti a pevnost v ohybu trámečků. Připravené materiály najdou uplatnění hlavně v ocelářském průmyslu při filtrování oceli od nečistot, ale také jako součástky strojů, které se používají při manipulaci s horkou ocelí.

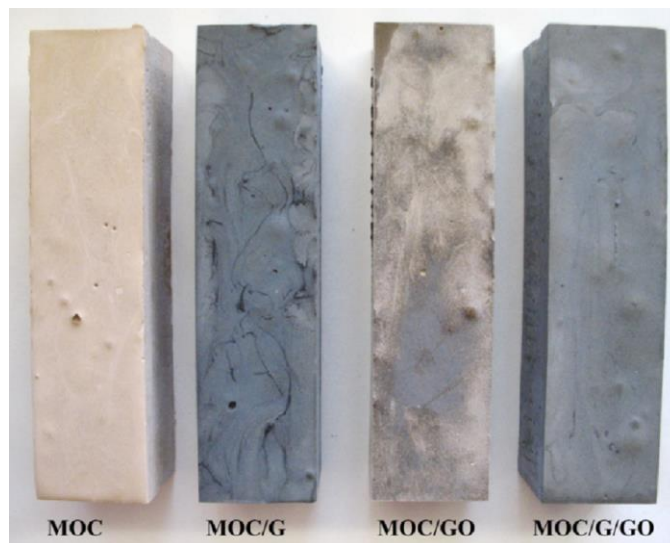


Unikátní vlastnosti kompozitních materiálů na bázi reaktivního oxidu hořečnatého

Bc. Anna-Marie Lauermannová (M2)

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

V této práci byly připraveny a charakterizovány kompozitní materiály na bázi reaktivního oxidu hořečnatého. Jako matrice byla využita fáze $\text{Mg}_3(\text{OH})_5\text{Cl}\cdot\text{H}_2\text{O}$ (MOC), jako aditiva byly využity uhlíkové nanomateriály (grafen, grafit oxid, uhlíkové nanotrubičky), křemelina, drcený porcelánový odpad a elektrárenský popílek. Rovněž byly připraveny referenční vzorky fází MOC bez obsahu aditiv i jejich bromované analogy. U všech připravených vzorků bylo studováno fázové a chemické složení pomocí rentgenové difrakční analýzy, energiově disperzní spektroskopie a rentgenové fluorescenční analýzy. Mikrostruktura byla analyzována pomocí skenovací elektronové mikroskopie a optické mikroskopie. Tepelná stabilita připravených kompozitních materiálů byla vyhodnocena na základě měření pomocí simultánní termické analýzy v kombinaci s hmotnostní spektrometrií. Součástí studie byla i analýza vzniku uhličitánů na povrchu vzorků MOC v důsledku absorpce atmosférického CO_2 . Z výsledků práce je zřejmé, že připravené materiály prokazují vysokou pevnost a odolnost. Tento typ materiálů vykazuje široký aplikační potenciál, zejména ve stavebním průmyslu v oblastech s extrémními podmínkami.



Elektrochemická exfoliace InSe

Bc. Lucie Spejchalová (M2)

Školitel: Ing. Jan Luxa, Ph.D.

Se vzrůstajícím nárokem na technologie dnešní doby se do popředí vědeckého výzkumu dostávají zejména 2D nanomateriály, konkrétně např. grafen, černý fosfor nebo chalkogenidy přechodných i nepřechodných kovů. Do této skupiny patří také indium selenid (InSe), jehož hlavní výhodou je vysoká rychlost nosičů náboje v rámci jedné vrstvy a možnost měnit velikost jeho zakázaného pásu, která je přímo závislá na počtu vrstev materiálu. Potenciální aplikace pro InSe jsou zejména v oblasti optoelektroniky a elektroniky, konkrétně ve fotodetektorech, solárních článcích nebo tranzistorech řízených polem. Vrstevnatý InSe lze získat cenově i technologicky nenáročnou exfoliací, a to mechanickou, chemickou nebo elektrochemickou. Tato práce se zabývá optimalizací procesu elektrochemické exfoliace InSe. Byl studován vliv podmínek na rychlost a efektivitu exfoliace; zejména se jedná o okolní atmosféru, koncentraci a složení elektrolytu, a v neposlední řadě o velikost přiloženého potenciálu na exfoliovaný krystal.

Ústav anorganické technologie (105)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Miloslav Lhotka, Ph.D.

SEZNAM SEKČÍ

1. [Anorganická technologie I.](#)
2. [Anorganická technologie II.](#)

Anorganická technologie I.

MÍSTO: ONLINE-MS TEAMS

KOMISE

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

doc. Ing. Tomáš Bystroň, Ph.D.

Ing. Šárka Paušová, Ph.D.

Ing. Roman Kodým, Ph.D.

Ing. Jakub Mališ, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:00 [Nela Adamová](#) (B3, doc. Ing. Martin Paidar, Ph.D.)

Příprava a vlastnosti symetrické cely Ni/YSZ/Ni

09:15 [Bc. Jan Dismas Buriánek](#) (M1, doc. Ing. Tomáš Bystroň, Ph.D.)

Elektrochemická syntéza diaryljodoniových solí anodickou oxidací

09:30 [Bc. Filip Dostál](#) (M1, doc. Ing. Martin Paidar, Ph.D.)

Vodivost kyslíkové elektrody pro SOFC

09:45 [Bc. Barbora Gabrielová](#) (B1, doc. Ing. Tomáš Bystroň, Ph.D.)

Anodická oxidace aktivních látek na elektrodě ze skelného uhlíku.

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

Optimalizace provozních parametrů anodového okruhu svazku palivových článků

10:15 [Bc. Martin Jirásko](#) (B1, doc. Ing. Tomáš Bystroň, Ph.D.)

Anodická oxidace derivátů jodbenzenu

10:30 [Bc. Veronika Marková](#) (M2, Ing. Jakub Mališ, Ph.D.)

Porovnání vlastností CCM a CCE pro palivové články typu PEM

10:45 [Michal Sončík](#) (B3, doc. Ing. Tomáš Bystroň, Ph.D.)

Využitie elektrochémie na prípravu aktívnych farmaceutických preparátov

vyhlášení výsledků

Příprava a vlastnosti symetrické cely Ni/YSZ/Ni

Nela Adamová (B3)

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

Vysokoteplotní palivové články s keramickými oxidy (SOCs) představují významnou technologii v konceptu vodíkové ekonomiky. Mezi hlavní výhody patří zejména možnost reversibilního provozu v jednom zařízení. Vzhledem k provozní teplotě SOCů (600–1000 °C) je potřeba používat materiály, které vykazují dobrou chemickou a zejména tepelnou stabilitu. SOCů obsahují pevný elektrolyt ZrO_2 dopovaný Y_2O_3 (YSZ) a elektrody založené na směsi kovu a keramiky (NiO nebo Ni-YSZ). V symetrických článcích Ni/YSZ/Ni dochází na katodě k redukci vodní páry na vodík a kyslíkový iont. Kyslíkový iont je následně transportován elektrolytem k anodě. Na anodě pak v přítomnosti vodíku probíhá vývoj vodní páry. Cílem této práce je připravit cely s NiO elektrodami a různými YSZ elektrolyty. Pro přípravu cel byl využit komerční prášek YSZ nebo YSZ prášek připravený doutnající spalovací syntézou. Výsledné elektrolyty byly charakterizovány s ohledem na složení a porozitu. Na připravený elektrolyt byly nanášeny Ni elektrody metodou sítotisku. Připravené cely byly následně charakterizovány v plynných směsích o různém poměru $\text{H}_2:\text{N}_2:\text{H}_2\text{O}_{(\text{g})}$. Získané výsledky umožňují hlubší pochopení vlivu koncentrace dopantu Y_2O_3 v elektrolytu a mechanismu reakcí na Ni elektrodách.

Elektrochemická syntéza diaryljodoniových solí anodickou oxidací

Bc. Jan Dismas Buriánek (M1)

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

Náplní práce je rešerše literatury, shrnující využití elektrochemické syntézy pro přípravu diaryljodoniových solí anodickou oxidací vhodných prekurzorů. Úvodem jsou představeny diaryljodoniové soli jako perspektivní činidla v organické syntéze a na konkrétních příkladech jsou ukázány jejich výhody oproti klasickým oxidačním činidlům. Dále jsou popsány možné přípravy diaryljodoniových solí běžnými chemickými přeměnami. Ty jsou porovnány s postupy elektrochemické syntézy poskytující řadu výhod. Následně je ukázáno několik konkrétních elektrochemických příprav diaryljodoniových solí včetně popisu reakční aparatury, použitých reaktantů, rozpouštědel a podmínek elektrosyntézy. Též jsou diskutovány výtěžky elektrochemické syntézy diaryljodoniových solí. Závěrem je nastíněna metodika, kterou lze použít při hledání optimálních podmínek reakce, a která by mohla být použita pro převedení elektrochemické syntézy diaryljodoniových solí do většího, průmyslového měřítko.

Vodivost kyslíkové elektrody pro SOFC

Bc. Filip Dostál (M1)

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

Vysokoteplotní palivové články (SOFC) jsou elektrochemická zařízení sloužící k účinné přeměně chemické energie na elektrickou s možností použití uhlovodíků jako paliva. Provozní teplota se pohybuje v rozmezí 600 – 1000 °C. Z důvodu takto vysokých provozních teplot musí být materiál elektrod i elektrolyt odolný vůči teplotní degradaci. Tato práce je cílena na kyslíkovou elektrodu, která byla připravena nanesením směsného inkoustu na korundovou destičku a následně kalcinována za teploty 1150 °C. K přípravě inkoustu byl použit práškový $(\text{La}_{0,80}\text{Sr}_{0,20})_{0,95}\text{MnO}_{3-x}$ (LSM), který vykazuje výrazně vyšší elektronovou než iontovou vodivost. Další použitou komponentou byl yttriem stabilizovaný oxid zirkonia (YSZ), který zvyšuje aktivní plochu kontaktu elektronově a iontově vodivé fáze. Přídavek YSZ částečně předchází delaminaci elektrody v SOFC. Klíčovým parametrem elektrod je jejich elektronová a iontová vodivost. Vodivost elektrod byla měřena nepřímo pro několik typů elektrod s odlišným poměrem LSM/YSZ metodou elektrochemické impedanční spektroskopie. Měření vodivosti proběhlo nejprve za laboratorní teploty a následně v intervalu 400 – 800 °C. Získané poznatky vodivosti elektrod v závislosti na teplotě a poměru složek mají významné uplatnění pro pochopení rozložení reakční zóny na elektrodě.

Anodická oxidace aktivních látek na elektrodě ze skelného uhlíku.

Bc. Barbora Gabrielová (B1)

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

Elektrochemické reakce aktivních látek jsou založeny na přenosu jednoho či více elektronů mezi molekulou reaktantu a elektrodou. Tudíž tyto reakce je možné provádět bez přítomnosti škodlivých oxidačních a redukčních činidel, vhodnou úpravou potenciálu můžeme navíc ovlivňovat selektivitu procesu pro jednotlivé produkty a další parametry. Cílem této práce bylo prozkoumat vliv složení elektrolytu v případě anodické oxidace alkoholu na aldehyd a karboxylovou kyselinu, která je dále využívána při syntéze farmakologicky aktivní látky. Při práci byla použita elektroda ze skelného uhlíku. Na ní byly naměřeny cyklické voltamogramy studovaných látek v roztocích o různém složení. Jako základní elektrolyty byly testovány kyselina octová, chloristan sodný a uhličitan sodný. Na základě naměřených voltamogramů byly provedeny vsádkové elektrolýzy i elektrolýzy za použití průtočného elektrolyzéru. Produkty byly analyzovány metodou hmotnostní spektrometrie.

Optimalizace provozních parametrů anodového okruhu svazku palivových článků

Bc. Miroslav Hala (M2)

Školitel: Ing. Jakub Mališ, Ph.D.

V PEM palivových článcích dochází na anodě k reakci, při které z vodíku vznikají protony a elektrony. Elektrony prochází elektrickým obvodem. Protony procházejí selektivní membránou k anodě, kde reagují s přiváděným kyslíkem za vzniku vody. Zásobování svazků palivových článků reaktanty je komplexní problém, který ovlivňuje jejich výkon, účinnost a životnost. Režimů přivádění vodíku existuje několik. Průtočný režim je konstrukčně nejjednodušší, ale při provozu v tomto režimu dochází k velkým ztrátám vodíku. Těm lze zabránit provozem v tzv. dead-end režimu, kdy je výstup ze svazku uzavřen a tlak plynu je v anodových prostorech udržován pomocí zpětného ventilu. Nevýhodou tohoto režimu je hromadění inertních plynů v koncových článcích svazku, což způsobuje nerovnoměrnou distribuci napětí na jednotlivých článcích. Tento jev můžeme eliminovat využitím odfuků nebo recirkulace vodíku. Tato práce se zabývá optimalizací provozních parametrů a režimu přivádění vodíku s cílem rovnoměrného rozložení napětí na svazku.

Anodická oxidace derivátů jodbenzenu

Bc. Martin Jirásko (B1)

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

Hypervalentní sloučeniny jodu jsou specifická oxidační činidla využívaná k oxidaci alkoholů na příslušné ketony či aldehydy. Dále se využívají v syntéze karbazolů, chinolinonů a pyrrolidonů. Jejich hlavní výhodou je vysoká variabilita výstupu reakce v závislosti na změně reakčních podmínek, jako je například teplota. Poptávka organických chemiků po těchto látkách je vysoká a dosavadní výroba těchto oxidačních činidel vyžaduje manipulaci s nebezpečnými, toxickými a hlavně drahými sloučeninami. Levnější a bezpečnější alternativou může být jejich elektrochemická syntéza. Pomocí elektrolýzy při konstantním potenciálu lze syntetizovat hypervalentní sloučeniny jodu bez vážných bezpečnostních rizik. Cílem této práce je ověření možnosti generace jodosylbenzoových kyselin z příslušných jodbenzoových kyselin v průtočném elektrochemickém reaktoru. V případě oxidace 2-jodbenzoové kyseliny byla také provedena optimalizace koncentrace H_2SO_4 . Posledním cílem této práce je navržení metody separace vzniklé hypervalentní sloučeniny z reakční směsi. V případě úspěšné separace by tak bylo možné využít vzniklou jodosylbenzoovou kyselinu nejen jako oxidační činidlo v reakční směsi, kde je použití limitováno stabilitou látek v silně kyselém prostředí, ale i v prostředí jiném.

Porovnání vlastností CCM a CCE pro palivové články typu PEM

Bc. Veronika Marková (M2)

Školitel: Ing. Jakub Mališ, Ph.D.

Technologie palivových článků typu PEM představuje vhodný zdroj elektrické energie pro řadu mobilních a stacionárních aplikací. Hlavním komponentem takového typu palivového článku je MEA, skládající se z anody, katody a membrány. Jako dva hlavní způsoby přípravy MEA se používá CCE (Catalyst-Coated Electrode) v kombinaci s membránou nebo CCM (Catalyst-Coated Membrane) v kombinaci s plynově difuzní vrstvou. V případě CCE je katalyzátor nanesen na povrch plynově difuzní vrstvy (GDL) za vzniku plynově difuzní elektrody. Oproti tomu se příprava CCM liší v tom, že katalyzátor je různými způsoby nanesen přímo na povrch membrány, načež se na katalytickou vrstvu následně přikládá plynově difuzní vrstva. Jako vhodnou metodou pro přípravu CCM se jeví ultrasonické sprejové nanášení. V tomto procesu přípravy CCM je nutné optimalizovat nejrůznější parametry, jako teplotu nanášení či složení katalytického inkoustu. Teplota nanášení ovlivňuje kvalitu distribuce katalyzátoru na povrch membrány, oproti tomu složení inkoustu výrazně ovlivňuje následnou kvalitu třífázového kontaktu, kdy částice katalyzátoru musejí být v dostatečném kontaktu jak s iontově, tak i elektronově vodivou fází. Cílem práce je optimalizace teploty nanášení při přípravě CCM a porovnání vlastností s komerčně dostupnými CCE.

Využitie elektrochémie na prípravu aktívnych farmaceutických preparátov

Michal Sončík (B3)

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

Elektroorganická syntéza sa dostáva čoraz častejšie do popredia, ide pritom o reakciu, pri ktorej nepotrebujeme žiadne oxidačné či redukčné činidlá, reakcia sa dá veľmi rýchlo zastaviť a nevznikajú pri nej nežiadúce vedľajšie produkty vzniknuté reakciou redukčných činidiel, ktorých sa častokrát potrebujeme zbavovať, čo značne predražuje celý proces výroby a spôsobuje to značnú záťaž na životné prostredie. Cieľom našej práce bolo nahradiť enzymatickú redukciu bromacetofenonu na odpovedajúci alkohol elektrochemickou syntézou a tým urobiť tento proces viac cenovo dostupným. Pri elektrosyntéze sa hlavne zameriame na kroky spojené s redukciou ketónu na alkohol. Taktiež sa budeme opierať o základné elektrochemické metódy, hlavne o cyklickú voltametriu pomocou ktorej budeme skúmať závislosť potenciálu na elektrickom prúde v rôznych potenciálových intervaloch. Taktiež je ešte potrebné zvoliť a doladiť správne podmienky pre chemickú reakciu ide hlavne o voľbu rozpúšťadla, vodivej látky, pH a teploty čo bude predmetom ďalšieho skúmania. Poslednou časťou bude uskutočnenie preparatívnej vsadkovej alebo prietochnej elektrolýzy.

Anorganická technologie II.

MÍSTO: ONLINE-MS TEAMS

KOMISE

prof. Dr. Ing. Josef Krýsa (předseda)

doc. Dr. Ing. Vlastimil Fíla

Ing. Ivona Sedlářová, Ph.D.

Ing. Martin Zlámal, Ph.D.

Ing. Miloslav Lhotka, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

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

Příprava a charakterizace membrán na bázi 6FDA-bisP – separace CO₂/CH₄.

09:15 [Bc. Tomáš Imrich](#) (M2, prof. Dr. Ing. Josef Krýsa)

Polovodičové fotoanódy na báze Fe₂O₃ pro fotoelektrochemické aplikace

09:30 [Bc. Jan Křenovský](#) (M1, Ing. Jakub Mališ, Ph.D.)

Charakterizace perfluorovaných sulfonovaných membrán pro palivové články typu PEM

09:45 [Bc. Jakub Rusek](#) (M2, prof. Dr. Ing. Josef Krýsa)

Modifikace nanostrukturovaných povrchů TiO₂ oxidem ceru.

10:00 [Bc. Filip Stankuš](#) (M1, Ing. Miloslav Lhotka, Ph.D.)

Stanovení provozních parametrů technologické jednotky alginátové granulace

10:15 [Bc. Jan Stárek](#) (M2, Ing. Martin Zlámal, Ph.D.)

Odstraňování huminů z vody pomocí ultrafiltrace.

10:30 [Bc. Zoran Zwaan](#) (M1, Ing. Martin Zlámal, Ph.D.)

Použití ultrafilrace pro zpracování bazénové vody s obsahem produktů chlorace a oxybenzonu

vyhlášení výsledků

Příprava a charakterizace membrán na bázi 6FDA-bisP – separace CO₂/CH₄.

Bc. Kirill Iablochkin (M2)

Školitel: doc. Dr. Ing. Vlastimil Fíla

Bioplyn je jedním z alternativních zdrojů energie. Metan vyrobený z bioplynu lze použít jak pro výrobu energie, tak i v chemickém průmyslu. Pro úpravu bioplynu na biometan lze využít řadu separačních technik. Absorpce a adsorpce jsou účinnými technikami používanými při čištění plynu, ale vyžadují velké množství energie a větší prostor pro zařízení. Membránová separace, vzhledem ke své nižší energetické a prostorové náročnosti představuje konkurenceschopnou alternativu k těmto klasickým separačním metodám. Vývoj nových membránových materiálů s vysokou separační účinností a zároveň vysokou chemickou, termickou a mechanickou odolností je zájmem řady průmyslových výrobců. V rámci této práce byl syntetizován polymer 6FDA-bisP, který byl následně použit k přípravě membrán vhodných pro separaci CO₂ z bioplynu. Připravené membrány byly charakterizovány pomocí permeačních měření v binární směsi CO₂/CH₄. Byl sledován vliv složení vstupní směsi a tlaku na permeabilitu a selektivitu připravených membrán.

Polovodičové fotoanódy na báze Fe_2O_3 pre fotoelektrochemické aplikácie

Bc. Tomáš Imrich (M2)

Školiteľ: prof. Dr. Ing. Josef Krýsa

V záujme rozvoja čistých zdrojov energie sa venuje veľká pozornosť vodíku a jeho výrobe z obnoviteľných zdrojov. Jednu z metód predstavuje fotoelektrochemický rozklad vody pomocou slnečného žiarenia, kde jedna (fotoanóda) alebo obe elektródy sú ožarované. Na katóde sa generuje vodík, na anóde prebieha vylučovanie kyslíku alebo iná vhodná oxidačná reakcia. Fotoanódy sú tvorené n-polovodičovými materiálmi, najmä na báze primárnych oxidov Ti, W a Fe, pričom táto práca popisuje prípravu a vlastnosti titánom dopovaného hematitu, $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$. Metódou prípravy bola zvolená sprejová pyrolýza umožňujúca rovnomerné nanášanie veľkých plôch. Ako prekursor bol použitý metanolový roztok acetylacetonátu železa a titánu. Kľúčovým parametrom pre fotoelektrochemickú charakterizáciu fotoanód je hodnota fotoprúdu a jeho dlhodobá stabilita. Bola prevedená parametrická štúdia, ktorá dáva do súvislosti hrúbku vrstvy, množstvo Ti ako dopantu a výslednú hodnotu fotoprúdu v alkalickom elektrolyte. Pripravené vrstvy boli tiež charakterizované RTG (difrakcia), SEM a hodnotami IPCE.

Charakterizace perfluorovaných sulfonovaných membrán pro palivové články typu PEM

Bc. Jan Křenovský (M1)

Školitel: Ing. Jakub Mališ, Ph.D.

Mezi nejvýraznější trendy dnešní doby patří ekologie a zelené technologie, s nimiž souvisí nízkoemisní doprava. Nejperspektivnějším odvětvím v oblasti dopravy se jeví „proton exchange membrane“ (PEM) palivové články. Největší část, již tak vysoké pořizovací ceny, tvoří perfluorovaná sulfonovaná membrána. Slouží nejen jako elektrolyt umožňující transport protonů, ale také jako separátor anodové a katodové části. V posledních letech se na trhu objevilo několik výrobců, využívající různé ionomery a aplikující nejrozumnější výrobní postupy. Konkurenční boj vede k utajování většiny klíčových informací o produktech, ačkoliv jejich znalost je pro zvolení vhodné membrány pro danou aplikaci klíčová. Cílem práce je charakterizovat a porovnat jednotlivé typy membrán od výrobců Chemours, Fumatech, Solvay, Dongyue a Xergy.

Modifikace nanostrukturovaných povrchů TiO₂ oxidem ceru.

Bc. Jakub Rusek (M2)

Školitel: prof. Dr. Ing. Josef Krýsa

Fotokatalýza představuje perspektivní metodu, která může být použita při čištění životního prostředí, např. odstranění barviv a pesticidů z odpadních vod. Pro tyto účely je nejčastěji používaným fotokatalyzátorem oxid titaničitý. Nanočástice TiO₂ vykazují vysokou fotoaktivitu, ale je nutná jejich imobilizace do formy vrstev. Nevýhodou je nízká účinnost při odbourávání málo rozpustných látek ve vodě. Výzkum je proto zaměřen na přípravu nanostrukturovaných vrstev TiO₂ a modifikaci jejich povrchu. Cílem této práce byla příprava 1-D nanotubicových a 3-D nanočásticových vrstev TiO₂ anodickou oxidací Ti a elektroforetickou depozicí ze suspence částic v metanolu a modifikace povrchů oxidy ceru za účelem zvýšení účinnosti fotokatalytického odbourávání herbicidu Monuronu. V první fázi byly charakterizovány morfologické vlastnosti vrstev pomocí SEM a fotoelektrochemické (PEC) vlastnosti měřením účinnosti převodu fotonů na elektrony (IPCE). Následně byla studována fotokatalytická degradace Monuronu ve vodě a vliv tloušťky nanoseného oxidu ceru na fotoaktivitu a PEC vlastnosti vrstev TiO₂. Bylo zjištěno, že nanotubicová vrstva vykazuje lepší PEC vlastnosti, naopak nanočásticová vrstva vykazuje vyšší fotokatalytickou aktivitu, což lze vysvětlit jejich rozdílnou morfologií.

Stanovení provozních parametrů technologické jednotky alginátové granulace

Bc. Filip Stankuš (M1)

Školitel: Ing. Miloslav Lhotka, Ph.D.

Tvarování částic je v průmyslových technologiích velice důležitou operací. Aglomerační procesy zpravidla vedou kromě zvětšení částic ke zúžení distribuce velikosti částic a využívají prachový podíl, který je obvykle odpadem. Pro tvarování částic v našem případě byla zvolena sprejová alginátová granulace, která probíhá v kapalně fázi a je vhodná pro citlivější látky vůči otěru a vysokým teplotám. Hlavním činidlem, které se využívá pro tento proces, je alginát sodný. Tato látka reaguje s Ca^{2+} ionty, s nimiž po interakci vytváří kulovité částice, které jsou složeny z gelové matrice, ve které mohou být zapouzdřeny práškovité látky. Po vysušení vznikají kulovité částice, které jsou velikostně větší než původní částice práškového materiálu. Cílem této práce bylo stanovit optimální provozní parametry alginátové granulace a zároveň provést hmotnostní bilanci aktivní látky ke zjištění efektivity celého procesu a nalezení kritických míst technologie.

Odstraňování huminů z vody pomocí ultrafiltrace.

Bc. Jan Stárek (M2)

Školitel: Ing. Martin Zlámal, Ph.D.

Huminové látky jsou přírodní organické sloučeniny vzniklé rozkladem půdní organické hmoty. Pod tímto pojmem se skrývá velké množství organických látek s molekulovou hmotností od jednotek do stovek kDa a rozdílnou rozpustností. Tyto látky se běžně vyskytují v odpadních vodách. Během desinfekce v procesu úpravy vody mohou huminové látky oxidovat do prekursorů karcinogenních a mutagenních sloučenin. Dále dobře tvoří komplexy s těžkými kovy a zadržují je v odpadních vodách. Z těchto důvodů je snaha tyto sloučeniny z odpadních vod odstranit. Tato práce se zabývá studiem možností využití ultrafiltrace na přečištění vody obsahující směs huminových látek a současnou analýzou vody před a po filtraci. Membrána se postupem času zanáší, proto se tato práce zabývá i předúpravou vstupní vody a následnou regenerací membrány. V první řadě je na membránu dávkováno aditivum, které se naadsorbuje na povrch membrány. Aditivum chrání membránu a adsorbuje nečistoty. Během zpětného proplachu pak proud vody odstraní aditivum společně s nečistotami. V druhé řadě je pak upraven roztok využíváný na chemické čištění. Běžně používaný chlornan sodný je nahrazen peroxidem vodíku v mírně alkalickém prostředí a jsou srovnávány negativní účinky těchto promývacích roztoků na membránu.

Použití ultrafiltrace pro zpracování bazénové vody s obsahem produktů chlorace a oxybenzonu

Bc. Zoran Zwaan (M1)

Školitel: Ing. Martin Zlámal, Ph.D.

Látky se schopností blokovat, odrážet, lámat nebo rozptylovat UV záření nazýváme UV filtry a mohou být organického i anorganického charakteru. Příkladem může být například oxybenzon či oxidy titaničitý a zinečnatý, které jsou v modernějších produktech obsaženy ve formě nanočástic. Jsou klíčovou složkou opalovacích krémů, které sice nabízejí spolehlivou ochranu před UV zářením a jeho negativními účinky, ale vzhledem ke způsobu jejich užívání nedochází k jejich metabolické přeměně. Chemikálie a zejména UV filtry jsou do prostředí vylučovány v původní podobě, ať už se jedná o uvolňování do vody bazénové, povrchové, či odpadní. Přítomnost látek působících jako UV filtry v mořské vodě je škodlivá hned z několika důvodů. Jednak mohou blokovat průchod UV paprsků, esenciálních pro život korálů a vodních rostlin, zadruhé dochází k lokálnímu ohřívání vody při absorpci světla, čímž mohou narušit citlivou rovnováhu ekosystému. Organické UV filtry představují obecně méně významnou ekologickou hrozbu, proces jejich odstranění je zato snazší. V práci bude diskutováno odstraňování UV filtrů z bazénové vody využitím procesu ultrafiltrace (UF), jak samostatně, tak ve spojení s vhodnými způsoby předúpravy či dodatečného čištění.

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 - restaurování](#)
4. [Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství](#)

Kovové materiály I.

MÍSTO: ONLINE

KOMISE

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

doc. Ing. Alena Michalcová, Ph.D.

Ing. Petr Dvořák, Ph.D.

Ing. Jiří Kubásek, Ph.D.

PROGRAM

09:45 **zahájení**

09:45 [Bc. Klára Borkovcová](#) (M2, Ing. Nguyen Hong Vu, Ph.D.)

Příprava stříbrných nanočástic na kompozitní membrány používané pro plynovou separaci

09:50 [Petra Havlíková](#) (M1, doc. Ing. Jaroslav Fojt, Ph.D.)

Depozice apatitu z vápníkem přesycených metastabilních roztoků modelující tělní prostředí

09:55 [Bc. Adéla Lukášová](#) (M1, doc. Ing. Jaroslav Fojt, Ph.D.)

Elektrochemická příprava bioaktivních povrchů s antibakteriálními vlastnostmi

10:00 [Bc. David Nečas](#) (M2, doc. Ing. Jaroslav Fojt, Ph.D.)

Elektrochemická odezva modifikovaných povrchů titanu

10:05 [Bc. Jakub Vlášek](#) (M1, doc. Ing. Pavel Novák, Ph.D.)

Metalotermická redukce hlubokomořských konkrací

10:10 [Bc. Alena Špačková](#) (M2, doc. Ing. Jaroslav Fojt, Ph.D.)

Korozní chování NiTi

vyhlášení výsledků

Příprava stříbrných nanočástic na kompozitní membrány používané pro plynovou separaci

Bc. Klára Borkovcová (M2)

Školitel: Ing. Nguyen Hong Vu, Ph.D.

Tato práce se zabývá nejvhodnější přípravou nanočástic stříbra a jejich vhodnou aplikací na kompozitní membránu z uhlíkových nanotubic, které mají díky stříbru antimikrobiální vlastnosti. Toho může být využito při filtraci a odstraňování nečistot z kapaliny membránou protékající či pro plynovou separaci. Jako nejlepší způsob přípravy nanočástic stříbra je příprava z AgNO_3 se stabilizátorem citrátem sodným za teploty varu. Dále bylo zkoušeno několik způsobů aplikací nanočástic stříbra na kompozitní membránu, kdy nejlepší homogenita bylo dosaženo usazováním nanočástic na membráně v nádobce o dvojnásobném průměru nežli membrána a její zatížení předmětem o nízké výšce. Všechny připravené membrány byly pozorovány skenovací elektronovou mikroskopií. Tloušťka pokrytí membrány nanočásticemi byla dána koncentrací roztoku s nanočásticemi stříbra.

Depozice apatitu z vápníkem přesycených metastabilních roztoků modelující tělní prostředí

Petra Havlíková (M1)

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

β -slitiny titanu se jeví jako atraktivní materiály pro implantáty, které by mohly nahradit čistý titan a jeho α - β slitiny. Youngův modul pružnosti β -slitin se pohybuje okolo 60 GPa, je mnohem nižší než u α - β slitin, a více se blíží Youngově modulu kosti. Aby docházelo k osseointegraci, tedy k lepšímu přirůstání implantátu ke kosti, lze pokrýt povrch β -slitin hydroxyapatitovou vrstvou. Hydroxyapatit (HA) je hlavní minerální složkou lidské kosti, kde poměr Ca/P je 1,67. HA se dá získat například ze simulované tělní tekutiny (SBF), která je anorganickým modelem krevní plazmy. SBF se primárně používá ke zjištění bioaktivity materiálů. Lze ji však i použít jako elektrolyt při elektrochemické depozici fosforečnanu vápenatého. V této práci byla použita β -slitina titanu Ti-36Nb-6Ta, která má Youngův modul pružnosti 55 GPa. Elektrochemickou depozicí ze simulované tělní tekutiny byla na povrch této slitiny nanášena Ca-P vrstva. Studován byl vliv podmínek depozice, zejména teplota a koncentrace elektrolytu, na výsledné složení a morfologii vrstvy. Dále byl sledován vliv stavu povrchu. Bylo zjištěno, že vrstva deponovaná na nanostrukturovaný povrch vykazuje vyšší soudržnost se základním materiálem a svým složením se více blíží kostnímu apatitu.

Elektrochemická příprava bioaktivních povrchů s antibakteriálními vlastnostmi

Bc. Adéla Lukášová (M1)

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

Tato práce se zabývá modifikací povrchu komerčně čistého titanu k dosažení vyšší bioaktivity a antibakteriálního účinku. Bioaktivita umožňuje snazší osseointegraci implantátu a antibakteriální vlastnosti povrchu snižují riziko infekčních komplikací. V běžné praxi se pro zvýšení bioaktivního chování materiálu nanáší hydroxyapatitová vrstva. Hydroxyapatit je hlavní anorganická složka kosti, s poměrem Ca:P 1,67. Jednou z možností jeho nanesení na povrch je elektrochemická depozice. V rámci práce byly připraveny povlaky na bázi Ca/P se stříbrem a mědí. Kombinované povlaky byly připravené v galvanostickém režimu při proudové hustotě $-1\text{mA}/\text{cm}^2$ a délce depozice 10 minut. Jako elektrolyt byl použit vodný roztok $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$ a KH_2PO_4 . Připravené povlaky byly podrobeny expozičním testům. Během exponování vzorků ve fyziologickém roztoku docházelo k rozpouštění připravených povlaků. Při tomto rozpouštění dochází k uvolňování vápenatých a hydrogenfosforečnanových iontů. To umožňuje precipitaci apatitu na povrchu. Expozicí v simulované tělní tekutině došlo k precipitaci apatitu, která potvrdila bioaktivní chování připravených Ca/P/Ag a Ca/P/Cu povlaků.

Elektrochemická odezva modifikovaných povrchů titanu

Bc. David Nečas (M2)

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

Slitina Ti-6Al-4V je jedním z nejpopulárnějších kovových materiálů pro chirurgické aplikace. Problematikou všech implantátů jsou zánětlivá onemocnění, která mohou vznikat po operaci. Většinou bývají velmi špatně detekovatelná a mohou vést k výrazným zdravotním komplikacím vedoucím až k reoperaci. Zánět je provázen změnami v okolní tkáni. Tyto změny mohou být jak biologické, tak fyzikální povahy. Mezi nejvýznamnější děje lze zařadit změnu teploty a pokles pH. Tyto veličiny je možné detekovat pomocí implantovatelného senzoru. Předmětem této práce bylo zkoumání vlivu změny pH na elektrochemické vlastnosti různých povrchových úprav Ti-6Al-4V. Na povrchu 3D tištěných vzorků byly připraveny nanostruktury, redukované nanotrubky a anodická kompaktní vrstva. Všechny tyto úpravy byly porovnávány s čistým, neupraveným povrchem. Změny vlastností byly pozorované pomocí elektronové impedanční spektroskopie. Pomocí této metody lze zkoumat objemové a mezifázové elektrochemické vlastnosti látek zapojených do elektrického obvodu. Samotné měření pak probíhalo ve fyziologickém roztoku. Bylo zjištěno, že elektrochemické vlastnosti povrchů se při různém pH měnily jen u redukovaných nanotrubek a kompaktního povlaku. Neupravený povrch a nanostruktura nevykazovaly žádné výrazné rozdíly.

Metalotermická redukce hlubokomořských konkrecí

Bc. Jakub Vlášek (M1)

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

Hlubokomořské konkrece jsou potenciálním zdrojem manganu a dalších hodnotných kovů a jejich důležitost v budoucnosti poroste s vyčerpáním pozemních nalezišť. Tato práce zkoumá možnosti jejich zpracování pomocí metalotermie. Je zkoumána redukce žíhaných konkrecí hliníkem a křemíkem ve stechiometických poměrech a v přebytcích redukovačů. U všech vzorků bylo popsáno fázové složení, mikrostruktura, prvkové složení jednotlivých fází a byla měřena mikrotvrdost kovových oblastí a strusky. Při redukci křemíkem vznikaly silicidové fáze a fáze systému Fe-Ni, které byly vzájemně nemísitelné a výrazně se lišily tvrdostí. Výťažnost redukce křemíkem byla také nižší a tudíž se jeví jako méně vhodná pro zpracování konkrecí. Redukce hliníkem vedla k výrazně lepším výsledkům, množství vyredukovaného kovu bylo vyšší a kovové fáze byly tvrdší, zároveň nedocházelo k jejich odmísení. Nicméně při vysokém přebytku hliníku vznikaly rozsáhlé fáze velmi tvrdého SiC, který by spolu s tvrdou struskou založenou na Al_2O_3 mohl být problémem pro další zpracování.

Korozní chování NiTi

Bc. Alena Špačková (M2)

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

Nitinol je slitina titanu a niklu, která se řadí mezi slitiny s tvarovou pamětí. Kromě této unikátní vlastnosti má Nitinol i vynikající mechanické vlastnosti, biokompatibilitu a dobrou korozní odolnost. Díky těmto vlastnostem se Nitinol řadí mezi významné kovové materiály, které se využívají v medicínských aplikacích především v oblasti ortodontie, ortopedie a chirurgie. V této práci byly zkoumány nitinolové dráty od tří různých výrobců. Ke stanovení chemického složení povrchů vzorků byla použita metoda rentgenové fotoelektronové spektroskopie (XPS). Materiály byly následně podrobeny potenciodynamické obousměrné polarizaci. Tato měření byla prováděna ve fosfátem pufrovaném solném roztoku (PBS). Cyklická polarizace byla u vzorků provedena za různých kombinovaných podmínek – bez uzlu, s uzlem (uzel imitoval štěrbinu), za přístupu vzduchu (přítomnost kyslíku) a za přístupu dusíku (nepřítomnost kyslíku). U porušených vzorků byla v místech porušení provedena analýza chemického složení pomocí skenovacího elektronového mikroskopu (SEM) vybaveného EDS detektorem. Analýza chemického složení vzorků po prasknutí objevila u všech vzorků v místech porušení zvýšený obsah hliníku. Ten by mohl být příčinou praskání nitinolových drátů.

Kovové materiály II.

MÍSTO: ONLINE

KOMISE

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

doc. Ing. Jaroslav Bystrianský, CSc.

Ing. Hong Ng. Vu, Ph.D.

Ing. Filip Průša, Ph.D.

PROGRAM

10:30 **zahájení**

10:30 [Eliška Chmelíková](#) (M2, doc. Ing. Pavel Novák, Ph.D.)

Možnosti metalotermické redukce hlubokomořských konkrací křemíkem a titanem

10:35 [Bc. Dominik Dragoun](#) (M1, doc. Ing. Pavel Novák, Ph.D.)

Tepelné zpracování nástrojové oceli legované titanem připravené metodou práškové metalurgie

10:40 [Bc. Nikola Macháčková](#) (M2, Ing. Jiří Kubásek, Ph.D.)

Kompozity Zn-WE43 připravené metodou SPS

10:45 [Bc. Markéta Straková](#) (M2, doc. Ing. Pavel Novák, Ph.D.)

Nové slitiny Ti-Mn pro lékařské aplikace

10:50 [Anna Teichmanová](#) (M1, doc. Ing. Alena Michalcová, Ph.D.)

Struktura kompozitního materiálu s hliníkovou maticí připraveného práškovou metalurgií

10:55 [Bc. Kristýna Zabalová](#) (M1, Ing. Jiří Kubásek, Ph.D.)

Vliv vlastností atomizovaného prášku na mechanické a korozní chování kompaktizovaných slitin Mg-Y-RE-Zr

vyhlášení výsledků

Možnosti metalotermické redukce hlubokomořských kongrecí křemíkem a titanem

Eliška Chmelíková (M2)

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

Tato práce se zabývá možnostmi metalotermické redukce hlubokomořských kongrecí křemíkem a titanem a následnou charakterizací takto vzniklých materiálů. Kongrece, jenž obsahují mangan, železo, nikl, měď a dále například kovy vzácných zemin, mívají zpravidla pouze několik centimetrů v průměru a vyskytují se na dně oceánů (v hloubkách od 3 000 až 6 000 metrů pod hladinou). Z těchto hlubokomořských kongrecí byl v rámci této práce prostřednictvím silikotermické redukce vytvořen zcela nový materiál, jehož vlastnosti byly dále zkoumány. Rovněž byla testována redukce titanem. Uvažované postupy redukce vedou ke vzniku nových unikátních slitin a oproti dosavadním postupům zpracování kongrecí (extrakce jednotlivých kovů) a také šetří náklady. Získané slitiny mohou nalézt uplatnění v technické praxi jako konstrukční materiály, jako funkční materiály (Heuslerovy slitiny) nebo jako biomateriál (slitiny na bázi Ti-Mn).

Tepelné zpracování nástrojové oceli legované titanem připravené metodou práškové metalurgie

Bc. Dominik Dragoun (M1)

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

V rámci hledání alternativ k legujícím prvkům současných nástrojových ocelí, jejichž cena je mnohdy vysoká a dostupnost složitá, byla připravena nová nástrojová ocel legovaná titanem. Ocel byla připravena metodou práškové metalurgie s využitím mechanického legování a slinování v plazmatu. Byla pozorována mikrostruktura, stanoveno fázové složení a tvrdost po každém kroku tepelného zpracování. Na základě získaných výsledků byly navrženy vhodné parametry tepelného zpracování.

Kompozity Zn-WE43 připravené metodou SPS

Bc. Nikola Macháčková (M2)

Školitel: Ing. Jiří Kubásek, Ph.D.

V dnešní době jsou zkoumány a vyvíjeny různé biodegradovatelné materiály, zejména na bázi zinku či hořčíku. Ty jsou využívány pro výrobu implantátů v lékařských aplikacích, které vyžadují, aby po splnění požadované funkce byly odstraněny z těla pacienta (např. stenty, fixátory zlomenin). Samotný čistý zinek a hořčík nedosahují požadovaných mechanických vlastností, a proto je nutné uvažovat jejich slitiny či kompozitní materiály. Mezi studované materiály se řadí slitiny Zn-Mg, které se vyznačují relativně příznivými mechanickými i korozními vlastnostmi pro podobné aplikace. Tato práce se zaměřila na přípravu kompozitních materiálů se zinkovou maticí a výztuží v podobě slitiny hořčíku Mg-4Y-3RE metodou sintrace v plazmatu (SPS), jejichž odlišná mikrostruktura by mohla vést ke zlepšení mechanických vlastností v porovnání s klasickými slitinami Zn-Mg. Byly připraveny 3 kompozitní materiály s obsahy 2,5, 5 a 10 hm. % slitiny Mg-4Y-3RE. S rostoucím obsahem slitiny hořčíku ve struktuře docházelo ke zvýšení obsahu fáze Mg_2Zn_{11} a tedy ke zvýšení tvrdosti a meze kluzu. Množství výztuže ovlivnilo nejen mechanické vlastnosti, ale i korozní rychlost, přičemž nejnižší korozní rychlost vykazoval materiál Zn-5WE43.

Nové slitiny Ti-Mn pro lékařské aplikace

Bc. Markéta Straková (M2)

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

Titan a jeho slitiny mají vhodnější kombinaci mechanických vlastností a biokompatibility než jiné kovové materiály používané jako implantační biomateriály. Díky vysoké měrné pevnosti, vysoké korozní odolnosti a dobré biokompatibilitě jsou slitiny titanu atraktivní pro lékařské aplikace. Mechanické a tribologické vlastnosti běžné slitiny titanu (Ti-6Al-4V) však neumožňují její efektivní využití na chirurgické nástroje. V posledních letech se výzkum slitin titanu soustředil na vývoj slitin obsahujících netoxické legující prvky pro lidský organismus, nízkým Youngovým modulem a dobrou biokompatibilitou. Z tohoto důvodu byl jako legující prvek vybrán mangan, který má vyšší dostupnost a nižší cenu. V rámci této práce byly předmětem studia binární slitiny Ti-10Mn, Ti-18Mn a Ti-30Mn připravené mechanickým legováním a slinováním v plazmatu (SPS). S rostoucím obsahem manganu se zvyšoval podíl intermetalických fází, rostla tvrdost, ale i křehkost slitin Ti-Mn. U slitiny Ti-30Mn byla naměřena tvrdost 1234 ± 4 HV₁, která spadá do hodnot tvrdosti potřebné pro uvažované aplikace. Problémem u této slitiny by mohla být vysoká křehkost. Z pohledu mechanických zkoušek lze slitinu Ti-30Mn zařadit mezi kandidáty na biomateriály uvažované pro aplikace na chirurgické nástroje.

Struktura kompozitního materiálu s hliníkovou maticí připraveného práškovou metalurgií

Anna Teichmanová (M1)

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

Využití samohojivých tzv. self-healing materiálů má v průmyslu velký potenciál, především pro aplikace, kde jsou součástí těžko vyměnitelné nebo je výměna příliš nákladná. V této práci byl zkoumán mechanismus uzdravování pomocí vzniku intermetalických fází u kompozitního materiálu připraveného slinováním v plazmatu z práškové směsi rychle ztuhlé slitiny AlCr6Fe2Si1 a 5 hm. % Ni. Důraz byl kladen převážně na kinetiku vzniku intermetalických fází mezi niklovými částicemi a hliníkovou maticí při různých režimech žíhání - při teplotách 400-550 °C po dobu 0,1-100 h. Výrazné samohojivé chování materiálu bylo prokázáno pro teploty 500-550 °C již od 1 hodiny žíhání. Při těchto teplotách vznikala kromě fází Ni_2Al_3 a NiAl (které vznikaly od 450 °C) také fáze NiAl_3 , která se od ostatních odlišuje svou morfologií – vytváří tenké dendritické struktury, které prorůstají materiálem a díky svému většímu objemu je fáze NiAl_3 tímto mechanismem schopná uzavírat drobné trhliny v rámci nanometrů. S rostoucí teplotou a současně s delšími časy žíhání rostl objem vznikajících intermetalických fází a kromě zvyšujících se schopností self-healing chování rostla také celková tvrdost materiálu, která ve své maximální hodnotě dosahovala až $\text{HV}_1 = 113,2 \pm 13,7$.

Vliv vlastností atomizovaného prášku na mechanické a korozní chování kompaktizovaných slitin Mg-Y-RE-Zr

Bc. Kristýna Zobalová (M1)

Školitel: Ing. Jiří Kubásek, Ph.D.

Slitina Mg–Y–RE–Zr je původem slévárenská slitina, která je uvažována pro výrobu biodegradabilních implantátů. Problémem u slitin hořčíku je vysoká korozní rychlost spojená s uvolněním nadměrného množství vodíku. Korozní rychlost lze prokazatelně snížit využitím postupů práškové metalurgie k přípravě materiálu. Materiály na bázi hořčíku připravené touto metodou se totiž obecně vyznačují jemnější a homogennější strukturou, která má pozitivní dopad na sníženou korozní rychlost a lepší mechanické vlastnosti. V rámci práce byl pozorován vliv velikosti částic výchozího prášku slitiny Mg–Y–RE–Zr a jeho následného chemického zpracování v HF na mechanické a korozní vlastnosti materiálů připravených lisováním za studena a následnou extruzí. Mechanické vlastnosti materiálů byly hodnoceny na základě měření tvrdosti dle Vickerse, zkoušek v tlaku a tahu. Korozní rychlost ve fyziologickém roztoku byla stanovena elektrochemickými polarizačními metodami. Produkty práškové metalurgie se vyznačovaly dobrými mechanickými i korozními vlastnostmi, převyšujícími konvenčně vyráběné slitiny o stejném složení. Velikost částic prášku neměla zásadní dopad na pozorované vlastnosti. Přestože chemické zpracování prášků v HF vedlo ke zhoršení tažnosti produktů, korozní rychlost materiálu se významně snížila.

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**

09:00 [David Dušek](#) (B4, Ing. Tereza Jamborová)

Soubor ostruh

09:05 [Bc. Matouš Hons](#) (M1, Ing. Šárka Msallamová, Ph.D.)

Restaurování velocipedu Hillman, Herbert & Cooper

09:10 [Olga Hrubá](#) (B3, Ing. Šárka Msallamová, Ph.D.)

Věčné světlo

09:15 [Jan Jeníček](#) (B3, Ing. Tereza Jamborová)

Restaurování kuchyňských vah

09:20 [Bc. Andrei Kazanskii](#) (B1, doc. Ing. Milan Kouřil, Ph.D.)

Využití elektrochemických metod pro určení korozního stavu olova.

09:25 [Rozálie Poslušná](#) (B2, Ing. Šárka Msallamová, Ph.D.)

Restaurování Československé šavle vzor 24

vyhlášení výsledků

Soubor ostruh

David Dušek (B4)

Školitel: Ing. Tereza Jamborová

Tématem práce je průzkum a konzervování souboru 22 ostruh z různých historických období. Jde o soukromou sbírku bez jakýchkoliv dochovaných informací z nálezové situace. Na základě tvaru se podařilo identifikovat ostruhy z doby římské, velkomoravské, románské, ze 14. a 15. století a z 20. století. Většina ostruh ze souboru byla v minulosti již neodborně čištěna. Původní vrstva korozních produktů a půdních nečistot zůstala pouze na dvou kusech. Z ostatních byla tato vrstva hrubě odstraněna, mnohdy až na kovové jádro. Na takto očištěných ostruhách vznikla vrstva druhotné koroze. Na většině ostruh je mechanické poškození v podobě prasklin a odlomených částí. Během restaurátorského zásahu byly korozní produkty odstraněny mechanicky mikrotryskáním balotinou. Očištěné ostruhy byly několik týdnů desalinovány v destilované vodě. Ostruhy s příliš obnaženým kovovým jádrem byly pasivovány lihovým roztokem taninu. Všechny ostruhy byly na závěr sušeny při teplotě 110 °C po dobu 5 hodin. Poté byly okamžitě za podtlaku konzervovány 10% Paraloidem B72. Křehká místa byla zesílena epoxidovou pryskyřicí a retušována obarveným voskem. Na závěr byl povrch opatřen vrstvou mikrokrytalického vosku.



Restaurování velocipedu Hillman, Herbert & Cooper

Bc. Matouš Hons (M1)

Školitel: Ing. Šárka Msallamová, Ph.D.

Práce pojednává o problematice restaurování, výrobě replik dílů a následné konzervaci jedinečné technické památky, a taktéž se zabývá uzmělecko historickým průzkumem památky. Jedinečné především konstrukčním řešením bicyklu, který je jedním z mezníků ve vývoji jízdního kola tak, jak ho známe dnes.

Věčné světlo

Olga Hrubá (B3)

Školitel: Ing. Šárka Msallamová, Ph.D.

Tato práce se zabývá restaurováním a konzervací lampy věčného světla z kostela Nanebevzetí Panny Marie v Blatné. Datovat ji lze do druhé poloviny 19. století, protože je na jednom z ozdobných prvků vyryt rok 1858. Celé věčné světlo je vytvořeno z mosazi. Misky tvořící hlavní tělo lampy, trn, květinový závěsný systém a řetězy závěsného systému byly navíc postříbřeny. Většina podložek konstrukčního systému byla železná. Uvnitř lampy byl nalezen záznam o prvním restaurování v podobě podpisu restaurátora, místa a roku konání zásahu, který byl zachován. Z lampy byly odstraněny organické nečistoty pomocí organických rozpouštědel (toluen a xylen) a druhotný nátěr pomocí 5% roztoku NaOH, aby byl obnoven původní vzhled. Dále byla odstraněna koroze vzniklá na konstrukčních spojích předmětu a bylo sníženo riziko jejího opětovného vzniku nahrazením originálních železných podložek podložkami z odpovídajícího originálního materiálu, mosazi, spoj byl dále izolován podložkou z polymerního materiálu. Všechna mechanická poškození byla opravena. Druhotné opravy z původních konzervací byly zachovány. Na závěr byl předmět konzervován 10 % roztokem Paraloidu B48-N rozpuštěném v xylenu.

Restaurování kuchyňských vah

Jan Jeníček (B3)

Školitel: Ing. Tereza Jamborová

Předmětem restaurování byly balanční váhy s převodovým řešením typu Bérangère. Tyto váhy s rostlinnými motivy, vyvažovacími jazýčky v podobě šípů, mosaznými miskami a bílou povrchovou barvou (zinková běloba) a mosazným nátěrem byly vyrobeny okolo roku 1925. Restaurátorským zásahem váhy získaly vzhled, který se blíží jejich původnímu vzezření, ale zároveň jsou na nich ponechány známky stáří. Bylo sníženo riziko vzniku korozního praskání u mosazných misek pomocí žihání; koroze litinových a ocelových částí byla omezena pomocí pasivní vrstvy (tanát B). Bílá povrchová barva byla zbavena nečistot (podobně i mosazný nátěr). Na větších plochách, kde se bílá barva nedochovala, byla provedena retuš akrylovou barvou. Celý předmět byl natřen vrstvou Paraloidu B72.



Využití elektrochemických metod pro určení korozního stavu olova.

Bc. Andrei Kazanskii (B1)

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

Historické olověné předměty, např. pečete, bývají po dlouhodobé expozici v depozitářích nebo archivech pokryty vrstvou korozních produktů na bázi uhličitánů. Restaurátoři stojí před otázkou, zda tato vrstva nevytváří pro podkladové olovo korozní prostředí, v němž je udržován cyklickým korozním mechanismem nežádoucí obsah kyseliny octové. V takovém případě by bylo nutné přijmout rychlé protikorozní opatření, např. odstranění vrstvy korozních produktů. Cílem práce je ověřit využitelnost jednoduchých elektrochemických metod pro určení, zda je vrstva korozních produktů s obsahem kyseliny octové vůči olovu agresivní. Testovanými elektrochemickými metodami bylo měření proudu v článku a polarizačního odporu olova.

Restaurování Československé šavle vzor 24

Rozálie Poslušná (B2)

Školitel: Ing. Šárka Msallamová, Ph.D.

Předmětem této práce je restaurování československé důstojnické šavle vzor 24 vyrobené firmou Wlaszlovits Štós. Cílem bylo částečné odstranění korozních produktů na ocelových částích šavle, tj. čepel, hřbet, kroužek a šroubek rukojeti a následná stabilizace zbylých korozních produktů, které nemohly být odstraněny z důvodu ztráty niklové vrstvy, kterou byla čepel historicky povrchově upravena. Dalším z cílů bylo sjednocení povrchu koše šavle vyrobeného ze slitiny mědi a niklu. Součástí práce bylo také vytvoření chybějící dřevěné rukojeti. Jako srovnávací historický materiál byly použity fotografie šavle stejného typu z HVÚ Praha. Ocelové části byly poté zakonzervovány karnaubským voskem a koš šavle natřen vrstvou Paraloidu B72.

Ústav skla a keramiky (107)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Tereza Uhlířová, Ph.D.

SEZNAM SEKČÍ

1. [Anorganické nekovové materiály I](#)
2. [Anorganické nekovové materiály II](#)

Anorganické nekovové materiály I

MÍSTO: ONLINE

KOMISE

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

Ing. Diana Horkavcová, Ph.D.

doc. Dr. Ing. Martin Míka

PROGRAM

09:15 **zahájení**

09:15 [Zuzana Bednářová](#) (M1, doc.Ing. Alexandra Kloužková, CSc.)

Kinetika rozkladu jemně mletých Ca surovin

09:30 [Bc. Barbora Brozmanová](#) (M2, doc.Ing. Alexandra Kloužková, CSc.)

Kaoliny - nosiče pro léčiva

09:45 [Tomáš Doležal](#) (B3, Ing. Martina Šídlová, Ph.D.)

Pucolánová aktivita metakaolinů a jiných pucolánů pomocí Frattiniho testu

10:00 [Bc. Karolína Holíková](#) (M2, Ing. Eva Gregorová, CSc.)

Vliv velikosti částic korundu na složení vypáleného keramického střepu v soustavě $Al_2O_3-SiO_2$

10:30 [Bc. Aneta Kopecká](#) (M2, prof. Dr. Dipl. Min. Willi Pabst)

Příprava a reologická charakterizace boehmitových solí

10:45 [Bc. et Bc. Karolína Králová](#) (M2, doc.Ing. Alexandra Kloužková, CSc.)

Určení jílových surovin v nízkopálené keramice

11:00 [Linda Semrádová](#) (M2, Ing. Eva Gregorová, CSc.)

Teplotní závislost Youngova modulu kompozitní keramiky $Al_2O_3-ZrO_2$

11:15 [Bc. Petra Šimonová](#) (M2, Ing. Eva Gregorová, CSc.)

*Změna elastického chování keramiky v soustavě $\text{CaO-Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$ v průběhu
tepelného zpracování*

vyhlášení výsledků

Kinetika rozkladu jemně mletých Ca surovin

Zuzana Bednářová (M1)

Školitel: doc.Ing. Alexandra Kloužková, CSc.

Ve své práci se zabývám vlivem zdroje a doby mletí vápence na fázové složení v keramickém střepe. Důvodem je snaha podpořit krystalizaci anortitu u vápenatých směsí pro keramické obkladačky. Ten by na základě předešlého zkoumání mohl zlepšit vlastnosti výrobku, především eliminovat rozměrové změny při výpalu a snížit vlhkostní roztažnost. V předloženém příspěvku prezentuji první krok výzkumu, jímž je vyhodnocení aktivační energie rozkladu pro různé vzorky vápence na základě výsledků z termické analýzy. Pro výpočet byla použita řada rovnic, které byly aplikovány jak na data z diferenciální termické analýzy, tak ze současně naměřené termogravimetrie. Zkoumány byly surové vápence od dvou výrobců a jejich vzorky s různou dobou mletí, které byly zpracovány analogicky jako keramické směsi pro výrobu vzorků k následujícím analýzám střepevé hmoty. Výsledkem je porovnání použitých rovnic výpočtu aktivační energie a zhodnocení efektu mletí na kinetiku rozkladu. Kromě simultánní termické analýzy byly v práci použity metody laserová difrakce, elektronové mikroskopie, rentgenové fluorescence a difrakce.

Kaoliny - nosiče pro léčiva

Bc. Barbora Brozmanová (M2)

Školitel: doc.Ing. Alexandra Kloužková, CSc.

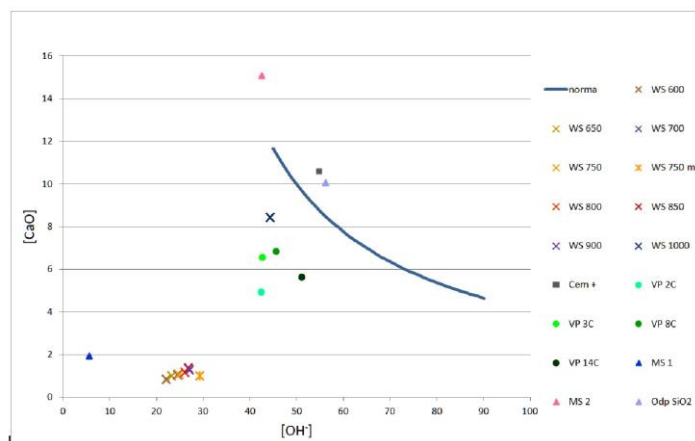
Práce je zaměřena na hodnocení kaolinů z hlediska jejich použitelnosti jako nosičů pro léčiva. Soubor českých kaolinů byl podroben zkouškám/analýzám, které jsou nezbytné pro posouzení jejich vhodnosti použití ve farmaceutickém průmyslu. Bylo sledováno chemické složení, mineralogické složení, distribuce velikosti částic, chování vzorků při tepelném zatížení, sorpční schopnosti, měření pH a sedimentačního objemu. Z kaolinů, které dle výsledků byly vhodné pro další testování, byly vylisovány tablety, na nichž byly prováděny lékopisné zkoušky: test na oděr, rozpadavost a pevnost tablet. Na základě výsledků uvedených měření lze označit dva kaoliny jako perspektivní anorganické nosiče pro léčiva ve farmacii.

Pucolánová aktivita metakaolinů a jiných pucolánů pomocí Frattiniho testu

Tomáš Doležal (B3)

Školitel: Ing. Martina Šídlová, Ph.D.

Pucolány jsou křemičité a hlinité materiály, které se používají při přípravě směsných cementů. V přítomnosti vody a $\text{Ca}(\text{OH})_2$ jsou schopny tvořit pojivovou C-S-H fázi, jež je nositelem pevnosti v zatvrdlém cementu. Náhrada cementu má významný vliv na snižování emisí CO_2 . Pro optimální využití pucolánů je nutné znát jejich pucolánovou aktivitu. V této práci byla stanovena pucolánová aktivita vybraných surovin pomocí Frattiniho testu, ve smyslu normy ČSN EN 196-5. Reakční směs cement-pucolán byla připravena v poměru 3:1. Vybranými pucolány byl kaolinitický jíl (WS) pálený na 600 – 1000 °C, vysokoteplotní popílký z uhelných elektráren (VP), komerční mikrosiliky (MS) a odpadní SiO_2 . Bylo zjištěno, že pucolanita jílu WS při všech teplotách vyhovuje normě. Nejméně reaktivní se ukázal jíl WS pálený na 1000°C, což bylo pravděpodobně dáno přechodem reaktivního metakaolinitu na méně reaktivní spinelovou, resp. z části i mullitovou fázi. Mletí jílu WS 750 (d₅₀ = 10,6 μm) na WS 750 m (d₅₀ = 7,2 μm) nemělo na pucolánovou aktivitu jílu významný vliv. Vybrané VP rovněž vyhověly zkoušce pucolanity, reaktivita je však ve srovnání s vypálenými jíly (kromě WS 1000) nižší. Odpadní SiO_2 stejně jako MS 2 normu nesplňuje. Naopak komerční mikrosilika MS 1 má výrazné pucolánové vlastnosti.



Obr. 1. Diagram pro posouzení pucolánové aktivity surovin dle ČSN EN 196-5. Daná surovinová směs vyhoví zkoušce pucolanity, jestliže vynesení bod je pod křivkou koncentrace iontů vápníku (vyjádřeného jako CaO) v nasyceném roztoku při teplotě 40°C.

Vliv velikosti částic korundu na složení vypáleného keramického střepu v soustavě $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$

Bc Karolína Holíková (M2)

Školitel: Ing. Eva Gregorová, CSc.

Byly připraveny čtyři keramické směsi v soustavě $\text{SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$. Dvě směsi s hmotnostním poměrem 80:20 a 60:40 z kaolinu Sedlec Ia a tabulárního korundu T60 s deklarovanou velikostí částic 0–0,2 mm a další dvě ve stejných poměrech z kaolinu Sedlec Ia a z reaktivního korundu CT 3000 SG se střední velikostí částic 0,7 μm . Homogenizace směsí byla provedena za mokra a po jejich vysušení byly připraveny vzorky lisováním na laboratorním hydraulickém lisu ve tvaru trámečků (20 x 100 mm) a tablet (průměr 36 mm) tlakem 50 MPa. Výpal vzorků byl proveden na teploty 1100, 1200, 1300, 1400 a 1500 °C s rychlostí ohřevu 2 °C/min a s dvouhodinovou výdrží na maximální teplotě. Na vzorcích tvaru tablet byla provedena rentgenová fázová analýza. Vzorky ve tvaru trámečků byly charakterizovány pomocí objemové hmotnosti, smrštění a zdánlivé pórovitosti. V závěru práce byla proměřena teplotní závislost Youngova modulu připravených keramik a byl diskutován vliv velikosti částic korundu a přítomných fází na charakter této závislosti.

Příprava a reologická charakterizace boehmitových solů

Bc. Aneta Kopecká (M2)

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

Práce se zabývá přípravou boehmitových solů a gelů, které mohou sloužit jako základ protikorozních povlaků a ve spojení se křemičitou složkou ke studiu tvorby mullitu. Výchozí surovinou pro přípravu těchto solů, resp. gelů byl boehmitový prášek Disperal P2. Byl navržen a optimalizován způsob přípravy solů z této výchozí suroviny. Postupně byla připravena řada vzorků boehmitových solů s obsahem 5, 10, 12 a 15 hm. % prášku. Připravené soly byly charakterizovány pomocí rotačního viskozimetru při pokojové teplotě. Byly proměřeny závislosti smykového napětí na smykové rychlosti krokovým režimem (tzv. steps curve) a závislosti viskozity na čase při různých smykových rychlostech. Bylo zjištěno, že soly s vyšším obsahem prášku vykazovaly tixotropii, zatímco ty s nižším obsahem prášku vykazovaly reopexii. Dále bylo pozorováno, že soly s 12 hm. % a 10 hm. % prášku se výrazně liší svou viskozitou. Časová závislost viskozity při různých smykových rychlostech je v kvalitativní shodě s výsledky jiných autorů. Jakmile jsou soly v klidu, dochází k jejich gelaci (tj. k přechodu solu na gel). Budoucí práce v této oblasti se bude zabývat mj. charakterizací boehmitových gelů oscilační reometrií.

Určení jílových surovin v nízkopálené keramice

Bc. et Bc. Karolína Králová (M2)

Školitel: doc.Ing. Alexandra Kloužková, CSc.

Cílem práce bylo posouzení možnosti identifikace složení a typu vstupních plastických surovin u nízkopálené keramiky. Nejdříve byly připraveny modelové vzorky s řízeným mineralogickým složením. Střepové hmoty obsahovaly různá množství dehydroxylované složky ze vstupních jílových minerálů. Ty byly následně rehydroxylovány v laboratorních autoklávech. Získané produkty umělého stárnutí byly následně identifikovány pomocí rentgenové difrakční analýzy, infračervené spektroskopie a simultánní termické analýzy. Stejný postup byl aplikován na reálné vzorky, které podléhaly dlouhodobému stárnutí jak v půdním, tak depozitním prostředí. Uvedeným postupem byly prokázány dvojvrstvé a trojvrstvé jílové minerály v plastických surovinách archeologických nálezů z různých období.

Teplotní závislost Youngova modulu kompozitní keramiky Al_2O_3 - ZrO_2

Linda Semrádová (M2)

Školitel: Ing. Eva Gregorová, CSc.

Práce se zabývá přípravou částečně slinuté a hutné ATZ keramiky a její charakterizací se zaměřením na hodnoty Youngova modulu. Uniaxiálním lisováním tlakem 50 MPa prášku TZ-3Y20AB (stabilizovaného 3 mol.% Y_2O_3) byly připraveny vzorky tvaru trámečků, které byly vypáleny na teploty 1100, 1200, 1300 1400 a 1500 °C. Vzorky byly charakterizovány objemovou hmotností, zdánlivou a skutečnou pórovitostí pomocí Archimédovy metody dvojího vážení a smrštěním. Distribuce velikosti pórů byla určena rtuťovou porozimetrií. Metodou impulsní excitace byl stanoven Youngův modul, přičemž experimentální data byla porovnána s teoretickými předpověďmi závislosti Youngova modulu na pórovitosti. Teplotní závislost Youngova modulu u parciálně slinuté i hutné keramiky byla sledována od pokojové teploty do 1500 °C a zpět při chlazení na pokojovou teplotu (nárůst, resp. pokles teploty v průběhu měření 5 °C/min).

Změna elastického chování keramiky v soustavě CaO- Al_2O_3 - SiO_2 v průběhu tepelného zpracování

Bc. Petra Šimonová (M2)

Školitel: Ing. Eva Gregorová, CSc.

Cílem práce bylo pozorovat a charakterizovat změny elastického chování za pokojové teploty a v průběhu tepelného zpracování a předpovědět Youngův modulu v závislosti na změně složení a skutečné pórovitosti v soustavě CaO--- Al_2O_3 – SiO_2 . Směs na výrobu vzorků byla připravena v poměru 8 : 2 z kaolínu Sedlec Ia a z chemicky čistého CaCO_3 . Ze směsi byly nalisovány vzorky ve tvaru trámeček a tablet. Vylisované tablety a trámečky byly vypáleny na teploty od 650 do 1300 °C. Obsah krystalických fází byl určen na tabletách pomocí XRD analýzy. Byla měřena teplotní závislost Youngova modulu v průběhu tepelného zpracování keramiky v rozsahu teplot 20–1200 °C a keramiky již vypálené na určitou teplotu výpalu. Na trámečkách byly dále za pokojové teploty naměřeny vybrané elastické vlastnosti metodou impulsní excitace. Na závěr byla provedena předpověď Youngova modulu v závislosti na změně skutečné pórovitosti.

Anorganické nekovové materiály II

MÍSTO: ONLINE

KOMISE

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

Ing. Martina Šídlová, Ph.D.

Ing. Jan Macháček, Ph.D.

PROGRAM

09:15 **zahájení**

09:15 [Bc. Olga Averchenko](#) (M1, Ing. Diana Horkavcová, Ph.D.)

Vývoj titaničito-vápenato-fosforečnanových sol-gel povlaků se třemi koncentracemi selenu

09:30 [Bc. Tereza Hasalíková](#) (M2, Ing. Jan Macháček, Ph.D.)

Příprava scaffoldů z bioaktivního skla metodou stereolitografie a jejich charakterizace

09:45 [Bc. Markéta Hubená](#) (M1, prof. RNDr. Ondrej Gedeon, Ph.D., DSc.)

Změny chemické odolnosti skla na mikroskopické úrovni

10:00 [Bc. Nikola Klusoňová](#) (M2, doc. Dr. Ing. Martin Míka)

Luminiscence křemičitých skel s germaniem a bismutem

10:30 [Bc. Karolína Opavová](#) (M2, Ing. Diana Horkavcová, Ph.D.)

Tvorba a charakterizace titaničitých sol-gel povlaků s obsahem vápníku, fosforu a dvěma koncentracemi stříbra

10:45 [Bc. Tomáš Pipota](#) (M2, prof. Ing. Aleš Helebrant, CSc.)

Hybridní anorganicko-organické vrstvy na skle

11:00 [Bc. Klára Pulcová](#) (M2, Ing. Martina Šídlová, Ph.D.)

Degradace sulfátovápennatého pojiva ve směsi s cementem vlivem zmrazování a roztávání

11:15 [Bc. Michal Šafránek](#) (M2, Ing. Miroslav Rada, CSc.)

Příprava bezolovnatých skel s vyšším obsahem oxidu hlinitého s vlastnostmi křišťálových skel

vyhlášení výsledků

Vývoj titaničito-vápenato-fosforečnanových sol-gel povlaků se třemi koncentracemi selenu

Bc. Olga Averchenko (M1)

Školitel: Ing. Diana Horkavcová, Ph.D.

Biomateriály hrají důležitou roli v oblasti moderní medicíny. Implantovaný materiál nesmí vyvolat nežádoucí efekty v těle příjemce. Pro zlepšení požadovaných vlastností je potřeba materiál upravit. Nanášení povlaků je nejpoužívanější způsob povrchové modifikace implantátu. Princip metody sol-gel je založen na přechodu roztoku na sol a poté na gel. Technika tvorby multifunkčních povlaků ponořováním substrátů do solů je jednoduchá a cenově nenáročná jak v laboratoři, tak v provozu. Titaničito-vápenato-fosforečnanové sol-gel povlaky na titanovém substrátu mohou být jedním z povlaků, určených pro urychlení tvorby pevné vazby s kostí. Přídavek selenu může zlepšit antibakteriální účinky povlaku vůči různým typům bakterií, avšak nesmí být toxický vůči lidským buňkám. Vynikající adheze povlaku k substrátu zaručí delší životnost kovového biomateriálu. Existuje mnoho normovaných testů pro měření adheze, ze kterých *tape test* patří mezi nejjednodušší. Po povlečení, vysušení a vypálení titanových substrátů, byla u povlaků testována bioaktivita *in vitro* testem v roztoku SBF. Cytotoxicita byla provedena nekontaktním testem na buněčné linii myších fibroblastů L929. Adheze povlaků k substrátu byla provedena pomocí *tape testu*. Všechny povlečené substráty byly po testech vizuálně hodnoceny.

Příprava scaffoldů z bioaktivního skla metodou stereolitografie a jejich charakterizace

Bc. Tereza Hasalíková (M2)

Školitel: Ing. Jan Macháček, Ph.D.

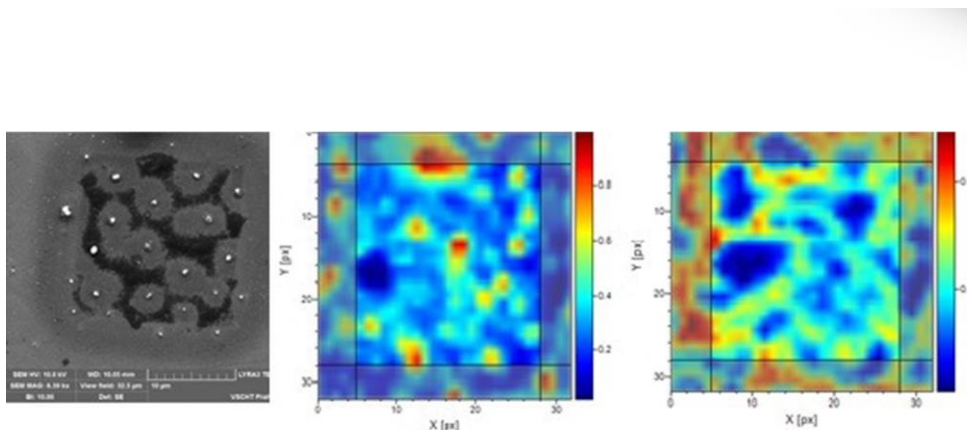
Práce se zabývá přípravou scaffoldů z bioaktivního skla metodou stereolitografie (SLA). Scaffold je pro organismus netoxický tkáňový nosič, připomínající lešení, které podpoří adhezi buněk na jeho povrch, jejich růst a proliferaci. Scaffoldy v organismu biodegradují, zatímco se vytvoří nová, v tomto případě kostní, tkáň. Pro použití metody SLA je potřebné připravit vhodnou suspenzi obsahující: pevné částice (bioaktivní sklo), fotovytvrditelnou pryskyřici, fotoiniciátor a také ztekutivno, které zamezí aglomeraci pevných částic. Tyto látky je potřeba smíchat ve vhodném poměru, aby suspenze dosáhla požadované viskozity. Tato vlastnost je pro SLA klíčová. Podstatná je také velikost pevných částic a její distribuce. Částice jsou proto mlety mokrou cestou v planetárním mlýnu s achátovými koulemi. Je vyžadována co nejmenší velikost částic, aby bylo možné dosáhnout co nejvyššího plnění pryskyřice částicemi. Ze suspenze je poté možné vytisknout scaffoldy. Vytisknutý scaffold je nutné vypálit v peci, aby došlo k rozkladu organických složek, ke slnutí částic a mj. dochází také k mírnému smrštění. Produkty SLA jsou dále charakterizovány. Od takto připravených scaffoldů se očekává vysoká pórovitost, čistota, vhodné mechanické vlastnosti a studuje se i velikost smrštění při výpalu.

Změny chemické odolnosti skla na mikroskopické úrovni

Bc. Markéta Hubená (M1)

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

Studie řeší iniciální stádia koroze skla a jeho modifikace pomocí elektronového záření, které urychluje korozi probíhající na jeho povrchu v řádu nanometrů a sleduje její nehomogenní vznik korelující s morfologií povrchu. Pokus probíhal na necínové straně skla typu Float se specifickým molárním složením. Vyleštěné sklo ozářené škálou dávek bylo vystaveno vodnému prostředí. Prvková analýza byla provedena metodou EDS a SIMS a změny pozorovány elektronovým mikroskopem. Morfologicky i dle atomového složení se ukázalo, že zvyšující se dávka ozáření snižuje chemickou odolnost povrchu vznikem agregátů a kulovitých útvarů. Povrch po ozáření a chemické expozici metodou SEM (obr. vlevo) a jeho naměřené prvkové mapy metodou SIMS (koncentrace sodíku obr. vlevo, křemíku vpravo). Na prvkových mapách se ukazuje nehomogenní složení povrchu skla po jeho expozici ve vodném prostředí, migrace alkálií vlivem ozáření elektrony a jejich role na povrchové relaxaci skla. Výsledky pokusu budou diskutovány na teoretických modelech struktury skla a demonstrovány na hloubkových profilech, povrchových prvkových mapách, mikroanalýze s porovnáním obrazu vytvořeného na SEM. Byla prokázána zejména migrace sodíku, zmenšující se odolnost skla vůči dávce ozáření a atomární změny na povrchu skla.



Luminiscence křemičitých skel s germaniem a bismutem

Bc. Nikola Klusoňová (M2)

Školitel: doc. Dr. Ing. Martin Míka

Byly připraveny 4 vzorky sodnohliníto-křemičitého skla s přídavkem oxidu zinečnatého a různým obsahem dopantů, kterými jsou oxidy germaničitý a bismutitý. Atomy bismutu byly přidány ve čtyřech různých koncentracích, a to 3 atom. %, 1,5 atom. %, 1 atom. % a 0,75 atom. %. U vzorků byla naměřena absorpce v rozmezí vlnových délek 400–800 nm. Při těchto vlnových délkách vzorky díky obsahu bismutu vykazují velmi silnou závislost absorpce na obsahu Bi. Se zvyšující se vlnovou délkou absorpce klesá, tudíž lze předpokládat vyšší propustnost světla v infračervené oblasti. Absorpce křemičitých skel s přídavkem zinku a germania je tak účinkem Bi podstatně zvýšena. Proto předpokládáme, že by měl mít přídavek bismutu pozitivní vliv na luminiscenci lanthanoidů v těchto sklech. Luminiscence by se měla projevit při vlnových délkách cca 800–850 nm a dále v blízké infračervené oblasti

Tvorba a charakterizace titaničitých sol-gel povlaků s obsahem vápníku, fosforu a dvěma koncentracemi stříbra

Bc. Karolína Opavová (M2)

Školitel: Ing. Diana Horkavcová, Ph.D.

V posledních letech se neustále zvyšují požadavky na výzkum a použití biomateriálů. Tyto materiály musí být schopné plně nahradit poškozené tkáně. Je na ně kladeno mnoho požadavků, především na biokompatibilitu a dlouhodobou funkční schopnost. Povrchovými modifikacemi lze u kovových biomateriálů dosáhnout požadovaných vlastností. Jednou z nich je antibakteriální účinek, který brání bakteriální kontaminaci a zamezuje vzniku bakteriálních infekcí. Další podstatnou vlastností je bioaktivita, která vede k lepší osseointegraci na rozhraní biomateriálu a živé tkáně. U povlaků je důležitým kritériem adheze, která udává jejich životnost a účinnost. V práci byly připraveny tři titaničité povlaky s obsahem vápníku, fosforu a dvěma různými koncentracemi stříbra na titanovém substrátu metodou sol-gel, technikou *dip-coating*. Na povlečených a vypálených vzorcích byly testovány vybrané vlastnosti a povlaky byly charakterizovány optickou a elektronovou mikroskopií. Pro získání antibakteriálního účinku bylo do solů přidáno stříbro ve formě AgNO_3 . Tento účinek byl testován vůči gram-negativní bakterii *Escherichia coli* 4 a 24 hodinovým testem. Adheze povlaků byla testována normovaným *tape testem* a bioaktivita dle normy statickým 20denním *in vitro* testem v simulované tělní tekutině.

Hybridní anorganicko-organické vrstvy na skle

Bc. Tomáš Pipota (M2)

Školitel: prof. Ing. Aleš Helebrant, CSc.

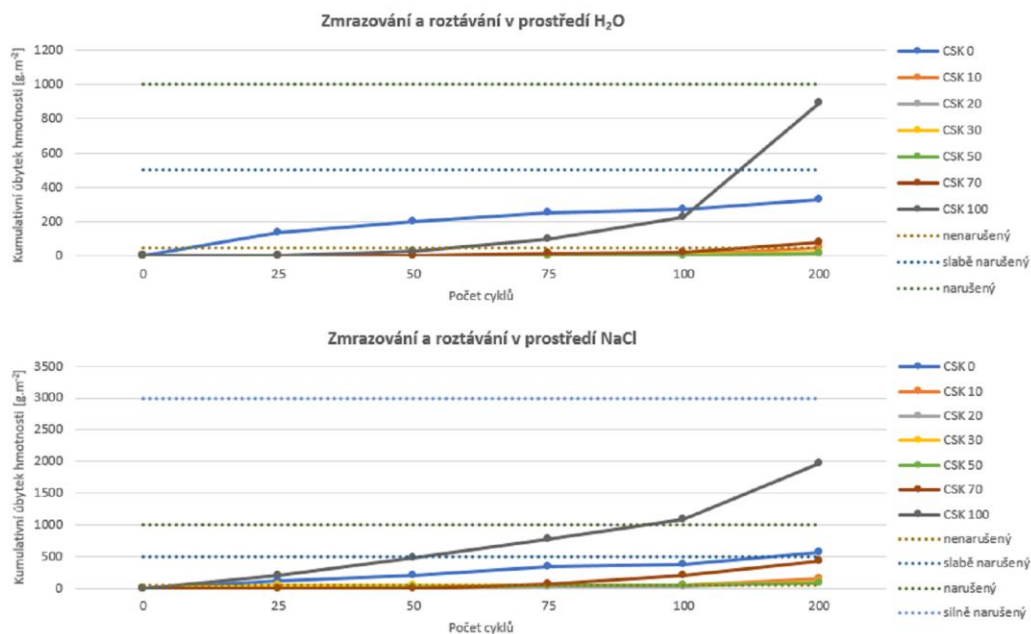
Funkční vrstvy připravené procesem sol-gel mohou mít čistě anorganickou povahu, avšak použitím organických derivátů silanu lze připravit vrstvy hybridní, které mohou upravovat více vlastností zároveň. V této práci bylo cílem připravit vrstvy na skle tak, aby zvyšovaly jeho chemickou odolnost a současně zvyšovaly jeho transmitanci, přičemž metoda jejich přípravy měla být jednoduchá a bez nutnosti použití vysoké teploty výpalu. K přípravě vrstev byl použit kyselý katalyzovaný proces sol-gel, výchozím prekurzorem byl tetraethoxysilan, který byl dále modifikován 3-(trimethoxysilyl)propylmethakrylátem (MEMO), isobutyl(trimethoxy)silanem (IBTMS) a trimethoxyfenylsilanem (PTMS). Byl ověřen způsob zvýšení transmitance vrstev použitím roztoku koloidních nanočástic SiO_2 . Vrstvy byly nanášeny na Na-Ca skla metodou dip-coating. Vzhled vrstev byl hodnocen vizuálně a optickou mikroskopií. Chemická odolnost vrstev byla ověřena modelovým testem urychleného stárnutí při 60 °C a 80% rh. Transmitance vrstev byla měřena spektrofotometricky ve VIS spektru. Výsledky ukázaly, že připravené vrstvy jsou vizuálně homogenní, transparentní a bez vad. Funkcionalizace org. prekurzory měla pozitivní vliv na chemickou odolnost vzorků, vrstvy na bázi MEMO a MEMO+IBTMS vykazovaly zároveň i zvýšenou transmitanci.

Degradace sulfátovápenatého pojiva ve směsi s cementem vlivem zmrazování a roztávání

Bc. Klára Pulcová (M2)

Školitel: Ing. Martina Šídlová, Ph.D.

Pojivové a korozní vlastnosti samotného hydraulického bezslínkového sulfátovápenatého pojiva Sorfix byly již v minulosti zkoumány. Nyní se vyskytla otázka jeho použití jako příměsi do cementů navzdory vysokému obsahu CaO a CaSO_4 . Zprvu byla provedena optimalizace množství provzdušnění, které má zásadní vliv na degradaci během zmrazování a roztávání. Následně se výzkum zabýval degradací kaší připravených ze směsí pojiva Sorfix a cementu v různých poměrech vlivem střídavého zmrazování a roztávání v prostředí H_2O a NaCl . Z výsledků vyplynula vyšší odolnost v prostředí H_2O . Dále je patrné, že odolnost byla prokazatelně nižší pro čistá pojiva obsahující 100 % cementu (CSK 0) a 100 % Sorfixu (CSK 100), oproti kaším směsným (CSK 10 – CSK 70). Zkoušené směsné kaše vykazovaly po 100 cyklech v klimatizační komoře nenarušený či slabě narušený povrch ve smyslu normy ČSN 73 1326. Při dalším cyklování byl u směsných kaší patrný jen mírný nárůst degradace ve srovnání se samotným pojivem Sorfix. Z pohledu vlivu provzdušnění lépe odolávaly kaše s nižším provzdušněním (2 %) až optimálním provzdušněním (7 %).



Příprava bezolovnatých skel s vyšším obsahem oxidu hlinitého s vlastnostmi křišťálových skel

Bc. Michal Šafránek (M2)

Školitel: Ing. Miroslav Rada, CSc.

Cílem této práce bylo připravit aluminosilikátové sklo, kterého by bylo možné využít např. k výrobě užitkového skla, bižuterie aj. Toto sklo by mělo mít podobné vlastnosti jako olovnatá křišťálová skla, avšak bez přítomnosti olova pro zajištění jeho zdravotní nezávadnosti. Důležitými parametry nově připravených skel budou především příznivé hodnoty hydrolytické odolnosti, viskozity, krystalizačních parametrů, obrusnosti, pevnosti, indexu lomu a zvuku (sonority). Prozatím byla připravena řada skel, kde se lineárně zvyšuje obsah Al_2O_3 vždy o 2 hmot. % (1,5 – 11,5 %), zatímco se zvyšuje i obsah Na_2O o 0,45 hmot. % a K_2O o 0,68 hmot. %. Molární poměr $\text{Na}_2\text{O}:\text{K}_2\text{O}$ byl udržován na hodnotě 1:1. Skla byla tavena v elektrické peci při 1530 °C (1460 °C ve sklovině). Index lomu utavených skel byl 1,524 až 1,540. Sklo s nejlepšími parametry bude použito v přípravě dalších skel s indexem lomu vyšším než 1,545. Z dosavadních výsledků vyplývá, že s rostoucím obsahem Al_2O_3 se zvyšují hodnoty povrchového napětí, disperze, Youngova modulu, hustoty i součinitele teplotní roztažnosti. Hodnoty měrného elektrického odporu a tavicích teplot klesají s přibývajícím obsahem Al_2O_3 .

Ústav chemie pevných látek (108)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Eva Bedrnová

SEZNAM SEKČÍ

1. [Analýza a vlastnosti léčiv](#)

Analýza a vlastnosti léčiv

MÍSTO: ONLINE - MS TEAMS

KOMISE

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

prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc.

doc. Ing. Barbora Doušová, CSc.

doc. Dr. Ing. Michal Hušák

Ing. Michal Šimek, Ph.D.

Ing. Eva Bedrnová

PROGRAM

08:30 **zahájení**

08:30 [Timur Babii](#) (M2, prof. Ing. František Kovanda, CSc.)

Phase composition of Ni-Cu-Mn mixed oxide catalysts.

08:45 [Bc. Dominik Danko](#) (M2, Ing. Jan Čejka, Ph.D.)

Vývoj krystalizačního procesu a zkoumání pevných fází fenpiverinium bromidu

09:00 [Bc. Jiří Harazim](#) (M2, Ing. Jan Čejka, Ph.D.)

Polymorfní screening methylprednisolonu a betamethasonu

09:15 [Bc. Jiří Nohejl](#) (M2, doc. Ing. Barbora Doušová, CSc.)

Záchyt oxoaniontů selenu v elektrárenských popílcích a jílech s vysokým obsahem železa

09:30 [Bc. Viet Trinh Vu](#) (M1, Ing. Jan Čejka, Ph.D.)

Stanovení parametrů sublimace koformerů pro screeningy pomocí společné depozice

09:45 [Bc. Simona Šajbanová](#) (M1, doc. Dr. Ing. Michal Hušák)

Verifikace určení struktur solí a kokrystalů v CSD DFT metodou.

vyhlášení výsledků

Phase composition of Ni-Cu-Mn mixed oxide catalysts.

Timur Babii (M2)

Školitel: prof. Ing. František Kovanda, CSc.

Transition metal oxides are well-known catalysts of redox reactions, e.g. in the total oxidation of volatile organic compounds. The present work deals with preparation and characterization of Ni-Cu, Ni-Mn, and Ni-Cu-Mn mixed oxides of various composition. The precursors were prepared by coprecipitation of nitrate aqueous solutions with NaOH and Na₂CO₃ and then calcined at 500 °C in air. The obtained oxides were analyzed by powder XRD. Calcination of one-component precursors containing only Ni, Cu, and Mn cations resulted in obtaining of NiO, CuO, and Mn₂O₃, respectively. Formation of NiO and CuO mixtures was observed in Ni-Cu samples with various Ni:Cu molar ratios. The Ni-Mn mixed oxides, namely Ni₆MnO₈ and NiMnO₃ were found in the Ni-Mn samples with molar ratios of 1:1 and 4:1, whereas NiMnO₃ and Mn₂O₃ were identified in the sample with Ni:Mn molar ratio of 1:4. Mixed oxides with spinel structures, together with other oxide phases (NiMnO₃, CuO), were identified in the Ni-Cu-Mn samples excepting those with high Ni or Cu content, in which mixtures of NiO, (Ni,Cu)₆MnO₈, and CuO were found.

Vývoj krystalizačního procesu a zkoumání pevných fází fempiverinium bromidu

Bc. Dominik Danko (M2)

Školitel: Ing. Jan Čejka, Ph.D.

Fempiverinium bromid se řadí mezi spazmolytika, látky tlumící bolest a uvolňující křeče. Ačkoliv se jedná o API poprvé zmíněnou v roce 1987, je známý pouze jeden polymorf, jehož struktura dosud nebyla vyřešena. Práce je proto zaměřena na polymorfni screening fempiverinium bromidu a vývoj krystalizačního procesu jeho vybraného polymorfu nebo solvátu. V první fázi výzkumu bylo vybráno 22 vhodných rozpouštědel, u kterých byla stanovena orientační rozpustnost. Nejvyšší rozpustnost byla pozorována u vody a methanolu. U 14 krystalických produktů screeningu byla analyzována stechiometrie API:solventu pomocí NMR, u 7 produktů bylo pozorováno signifikantní množství solventu, které ukazuje na možnost solvatace. RTG práškovou difrakcí byly prokázány nové fáze vzniklé volnou krystalizací, solváty z acetonu, acetonitrilu, ethanolu, dichlormethanu, anhydrát z butan-2-onu a hemihydrát z buten-2-onu s vodou v poměru 98:2, které budou dále studovány RTG strukturní analýzou. U rozpouštědel tvořících solváty byla stanovena závislost rozpustnosti na teplotě přístrojem Crystal16.

Polymorfní screening methylprednisolonu a betamethasonu

Bc. Jiří Harazim (M2)

Školitel: Ing. Jan Čejka, Ph.D.

Cílem práce je screening polymorfních i vícekomponentních forem methylprednisolonu, fluormetholonu a betamethasonu. Tyto látky patří mezi syntetické glukokortikoidy, které se nejvíce využívají při léčbě kožních onemocnění, přičemž betamethason se využívá v kombinacích s dalšími látkami (např. antibiotiky) při závažnějších onemocněních jako je např. lupénka. U těchto látek nejsou známy další formy. Výzkum byl zaměřen na solváty a kokrystaly připravované technikou odpařování rozpouštědla a také sublimací. Pro solvátový screening bylo vybráno 29 rozpouštědel, pro kokrystalizační screening 20 koformerů, převážně karboxylové kyseliny. Všechny krystalické produkty byly analyzovány metodou rentgenové difrakční analýzy monokrystalu. Pro zjištění, zda byla připravena nová forma nebo známé formy čisté látky postačuje rychlá indexace a porovnání mřížkových parametrů. Zatím se, bohužel, nepovedlo připravit novou polymorfní formu, solvát, či kokrystal.

Záchyt oxoaniontů selenu v elektrárenských popílcích a jílech s vysokým obsahem železa

Bc. Jiří Nohejl (M2)

Školitel: doc. Ing. Barbora Doušová, CSc.

Práce se zabývá zkoumáním schopnosti elektrárenských popílků, žilovského jílu a kadaňského bentonitu sorbovat selen ve formě seleničitanů a selenanů. Pro práci byly připraveny dva modelové roztoky o koncentracích 0,5 a 1 mmol/l pro elektrárenské popílků; a 0,1 a 0,5 mmol/l pro jíl a bentonit. Stanovení koncentrace selenu ve vzorcích probíhalo pomocí atomové absorpční spektrometrie (AAS) a atomové fluorescenční spektrometrie s generací hydridů (HG AFS). Experimenty ukázaly, že elektrárenské popílků, i přes původní obsah selenu, dokázaly sorbovat další z roztoků. Zkoumání sorpční schopnosti žilovského jílu a kadaňského bentonitu ukázalo, že selen se na žilovský jíl sorbuje pouze v oxidačním stavu +IV, zatím co v oxidačním stavu +VI nedocházelo k sorpci. Kadaňský bentonit sorboval selen v obou oxidačních stavech. Účinnější sorpce selenu v oxidačním stavu +IV probíhala na kadaňský bentonit.

Stanovení parametrů sublimace koformerů pro screeningy pomocí společné depozice

Bc. Viet Trinh Vu (M1)

Školitel: Ing. Jan Čejka, Ph.D.

Sublimace je přeměna látky z jejího pevného stavu přímo do plynného. Jako jeden ze způsobů krystalizace je prozatím jedním z méně řešených předmětů zkoumání, proto ani neexistuje jednotná databáze pro potřebné parametry jako jsou sublimační teplota a tlak. Práce se zabývá sublimačními parametry aktivních farmaceutických látek a jejich koformerů. Zahrnuje parametry získané z dostupné literatury i hodnoty naměřené experimentálně. Součástí jsou také data analýzy produktů získaná pomocí metod rentgenové difrakce. Ve dvou pokusech měření pro celkem 14 vzorků byly stanoveny přibližné hodnoty teplot sublimace vhodné pro pěstování krystalů. Měření se provádělo za sníženého tlaku, prozatím se jednalo o nejnižší tlak dostupný na vývěvě, který se pohyboval kolem hodnoty 30 Pa, výjimečně stoupl i do hodnot vyšších. Analýza 6 odebraných produktů prokázala jejich strukturní shodu s výchozími látkami. Dihydrát kyseliny šťavelové desublimoval nečekaně jako dihydrát.

Verifikace určení struktur solí a kokrystalů v CSD DFT metodou.

Bc. Simona Šajbanová (M1)

Školitel: doc. Dr. Ing. Michal Hušák

Práce se zabývá dvěma tématy: 1) Testováním metody pro rozlišení vzniku krystalové struktury soli nebo kokrystalu 2) Ověření správného řešení struktur solí a kokrystalů obsažených v Cambridžské strukturní databázi. Použitá metoda je založena na DFT výpočtu. DFT geometrická optimalizace umožňuje stanovit pozici kritického vodíku u vybraných látek. Tato informace je mimo jiné požadována při registraci a patentování léčiva. Nově výpočty provádím na superpočítači Salomon v Ostravě, který se skládá celkem z 1008 nodů, kde každý 1 z těchto nodů tvoří výkonný počítač s 128 GB paměti RAM a 2 procesory o 12 jádrech. Díky rychlejšímu počítači jsem na struktuře s CSD kódem PUJNIS mohla provést výpočet pomocí složitějších hybridních funkcionalů. Jedná se o strukturu, u které jsem v BP potvrdila, že má dvě energetická minima (jedno pro sůl a jedno pro kokrystal). To může být příčinou, proč metoda neposkytuje u některých kokrystalů korektní výsledek. V práci dále navazuji na svou bakalářskou práci, ve které jsem ověřovala struktury z intervalu $\Delta pK_a = <0,5;1,5>$. Nyní ověřuji platnost metody a správnost řešení struktur v rozšířeném intervalu $\Delta pK_a = <-1,5;1,5>$ [1] Reference: [1] Cruz-Cabeza, A. J. Acid–base crystalline complexes and the pKa rule. *CrystEngComm* 2012, 14, 6362–6365.

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

Organická chemie bakalářská I

MÍSTO: ONLINE

KOMISE

doc. Dr. Ing. Jana Hodačová (předseda)

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

Ing. Václav Kozmík, CSc.

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

Ing. Jiří Vokál, Ph.D. (Lach-Ner)

PROGRAM

09:15 **zahájení**

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

Modified nanoparticles for DC-SIGN targeting

09:30 [Barbora-Eva Eliášová](#) (B3, Ing. Zlatko Janeba, Ph.D.)

Syntéza nového typu acyklických nukleosidfosfonátů

09:45 [František Vávra](#) (B2, Ing. Eva Svobodová, Ph.D.)

Syntéza a studium vlastností isoalloxazinu a isoalloxaziniové soli s elektronakceptorní skupinou

10:00 [Michaela Bršťáková](#) (B3, prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.)

Studium merkurace calix[4]arenu

10:30 [Vojtěch Suchopár](#) (B3, Ing. Radek Jurok, Ph.D.)

Syntéza analytických standardů biologicky aktivních látek

10:45 [Jan Tatýrek](#) (B3, doc. Dr. Ing. Jana Hodačová)

Organokřemičité hybridní materiály na bázi cinchoninu

11:00 [Petr Bečvář](#) (B3, doc. Ing. Michal Kohout, Ph.D.)

Ultrarychlé kapalně-krystalické fotopřepínače

11:15 [Kateřina Svobodová](#) (B3, Ing. Bc. Michal Himl, Ph.D.)

Syntéza substituovaných fenylene-močovinových makrocyclů

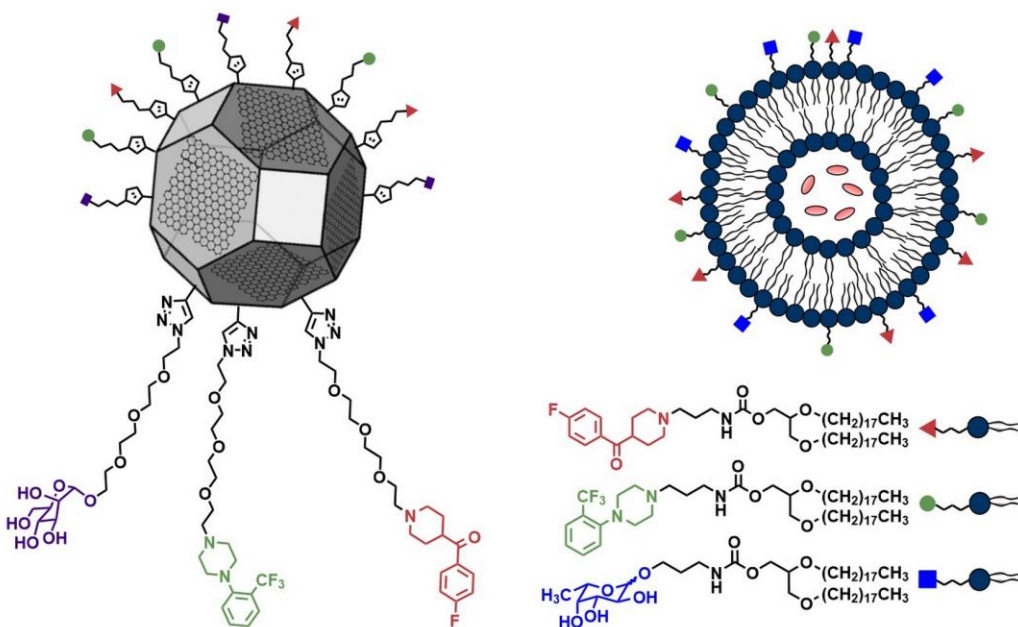
vyhlášení výsledků

Modified nanoparticles for DC-SIGN targeting

Kateřina Jochová (B3)

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. Fragment-based drug discovery is a method of developing new drugs, which is based on the screening of the interaction of small molecules (fragments) with a receptor. A recent study has identified several fragments which show a high affinity for DC-SIGN and could be used as basis for DC-SIGN targeting. The aim of our first project is to visualize cancerous lymph nodes using fluorescent nanodiamonds. We have attached the fragments known to interact with DC-SIGN to nanodiamonds so that they bind to the DC-SIGN on the surface of 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 our second project, we are 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.

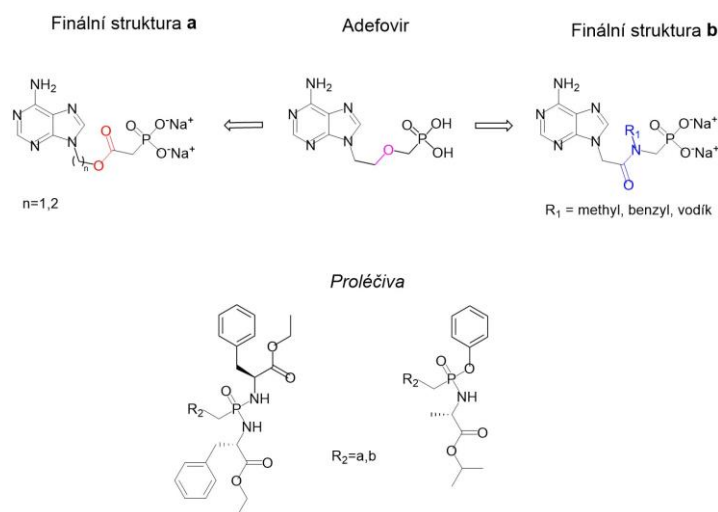


Syntéza nového typu acyklických nukleosidfosfonátů

Barbora-Eva Eliášová (B3)

Školitel: Ing. Zlatko Janeba, Ph.D.

Cílem projektu je návrh a syntéza nového typu acyklických nukleosidfosfonátů strukturně odvozených od antivirotika adefoviru (PMEA-fosfonomethoxyethyl adenin). Acyklické nukleosidfosfonáty (ANP) jsou analoga nukleotidů a tvoří významnou skupinu antivirotik a cytostatik. Díky značné podobnosti s přirozenými nukleotidy jsou schopny interagovat s cílovým enzymem a začlenit se do rostoucího řetězce nukleových kyselin, čímž způsobují inhibici syntézy DNA. Tento mechanismus se mimo jiné využívá při léčbě infekcí způsobených viry HBV a HIV. Volný fosfonát je při fyziologickém pH v deprotonované formě a jeho hydrofilní charakter většinou znemožňuje prostup plazmatickou membránou. Proto se pro zlepšení prostupnosti léčiv do buňky substituují do forem tzv. proléčiv, která jsou v buňce enzymaticky štěpena zpět na volné fosfonáty a fosforylována na biologicky účinné fosfonodifosfáty. Syntetizované struktury jsou modifikací adefoviru na acyklickém řetězci (PME). Etherová skupina byla nahrazena skupinou esterovou nebo amidovou. Od finálních látek byly také připraveny dva typy proléčiv. Jedním druhem jsou stabilnější proléčiva bisamidátová, dalším druhem jsou tzv. ProTide proléčiva. Finální látky jsou ve formě fosfonátů i proléčiv testovány pro své potenciální biologické vlastnosti.

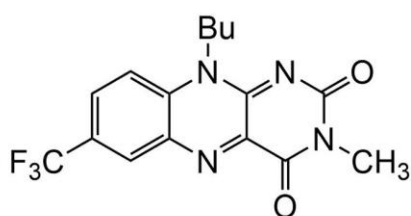


Syntéza a studium vlastností isoalloxazinu a isoalloxaziniové soli s elektronakceptorní skupinou

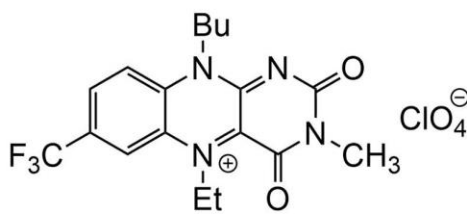
František Vávra (B2)

Školitel: Ing. Eva Svobodová, Ph.D.

Deriváty isoalloxazinu a alloxazinu (flaviny) jsou v poslední době předmětem intenzivního výzkumu. Mohou být nasazeny jako účinné fotokatalyzátory v řadě redoxních systémů, kde představují zelenější a levnější alternativu ke klasickým oxidačním a redukčním činidlům. Připravil jsem flavin s elektronakceptorní skupinou (A) a jemu odpovídající flaviniovou sůl (B). Látky byly charakterizovány a následně otestovány jako katalyzátory oxidací aromatických substrátů kyslíkem. Sůl B se v podmínkách oxidace ukázala jako nestabilní. Flavin A však poskytuje slibné výsledky. [1] <https://chemistry-europe.onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/ejoc.201901628>



A



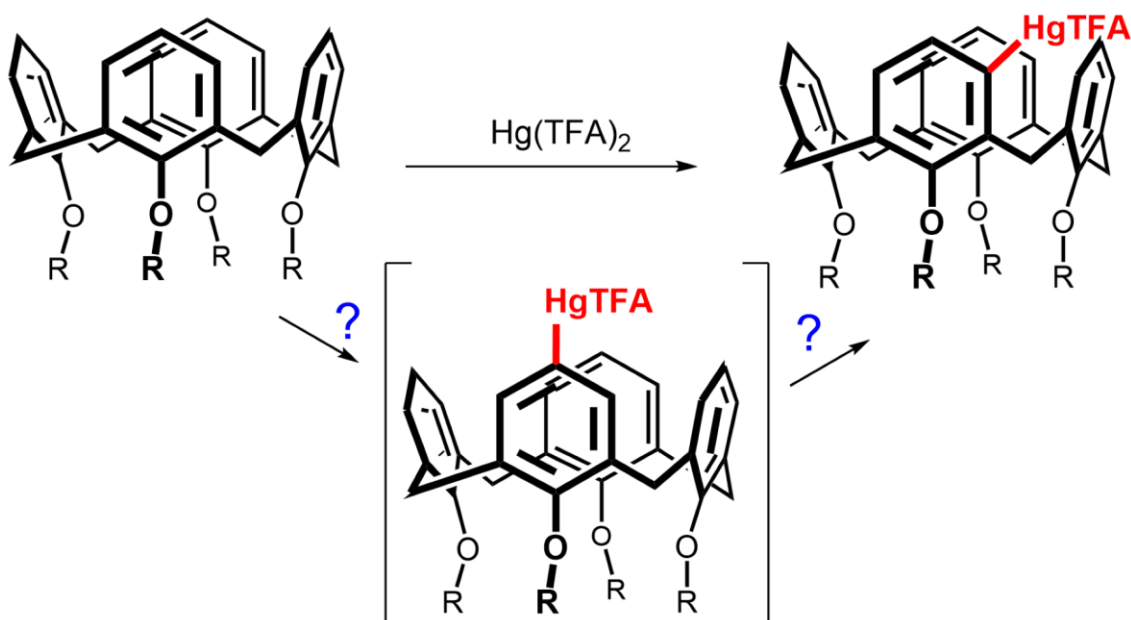
B

Studium merkurace calix[4]arenu

Michaela Bršťáková (B3)

Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Derivatizace horního okraje calix[4]arenů s alkylovaným spodním okrajem (v konické konformaci) probíhá ve všech známých případech do polohy *para*- vůči fenolické skupině, což je důsledek vyšší reaktivity této polohy vůči elektrofilní aromatické substituci. Jedinou výjimkou je přímá merkurace calix[4]arenů překvapivě poskytující pouze inherentně chirální *meta*-substituovaný derivát. Cílem této práce je objasnit mechanismus merkurace do *meta*-polohy. Elektrofilní merkurace je totiž, podobně jako sulfonace či Friedel-Craftsova alkylace, reakcí v principu vratnou. Je tedy možné, že *meta*-substituovaný derivát vzniká z primárně vytvořeného *para*-produktu, který je termodynamicky nestabilní a izomerizuje za vzniku *meta* derivátu.



Syntéza analytických standardů biologicky aktivních látek

Vojtěch Suchopár (B3)

Školitel: Ing. Radek Jurok, Ph.D.

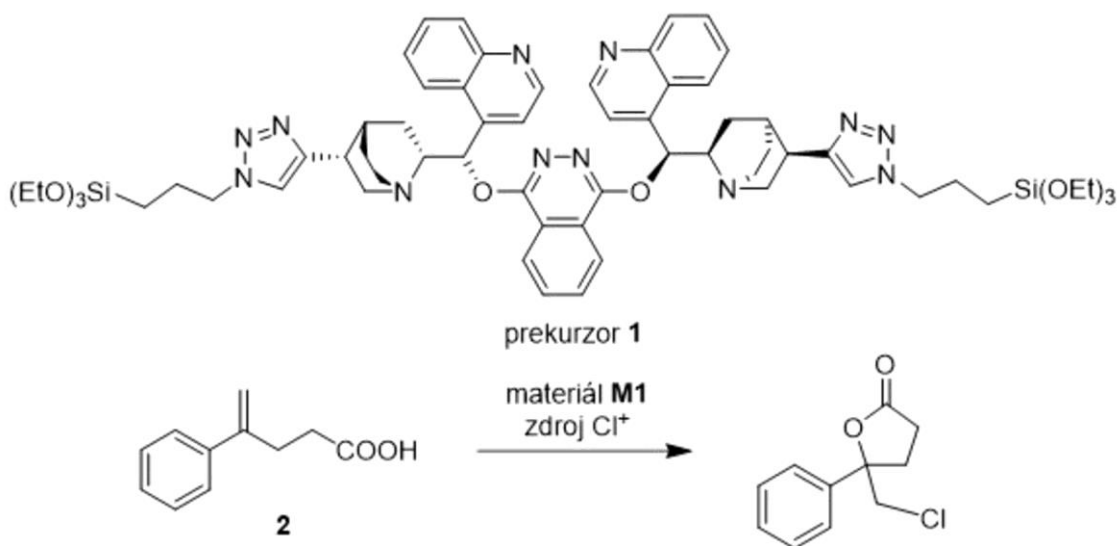
Látky, jež obsahují ve své struktuře atomy deuteria, lze využít jako vnitřní standardy pro kvantitativní analýzu moderními analytickými metodami jako GC-MS nebo HPLC-MS. Cílem této práce je syntéza deuterovaných standardů často zneužívaných drog, jako je heroin, kokain a jeho ethylester kokaethylen, MDMA a metamfetamin. Tyto standardy mohou poté sloužit ve forenzní analýze k určení obsahu drogy ve vzorku. Pro tyto účely by molekula měla obsahovat alespoň 3 atomy deuteria, které jsou pevně vázané, tj. nemůže dojít k jejich výměně za jiný vodík například vlivem rozpouštědla. Nejvýhodnější je využití methylové skupiny na dusíku, nacházející se ve struktuře všech zmíněných látek, již lze zavést použitím dobře dostupného deuterovaného methyljodidu. V případě metamfetaminů lze methylovat k nim příslušný amfetamin, u kokainu a heroinu je nutno nejprve provést N-demethylaci výchozí molekuly.

Organokřemičité hybridní materiály na bázi cinchoninu

Jan Tatýrek (B3)

Školitel: doc. Dr. Ing. Jana Hodačová

Práce se zabývá přípravou hybridních organicko-anorganických křemičitých materiálů na bázi derivátu cinchoninu, jež by dále měly najít své využití jako heterogenní katalyzátory enantioselektivních reakcí. Výhodou těchto materiálů je jejich snadné oddělení od reakční směsi filtrací, což následně umožňuje jejich opětovné použití. Prezentována bude příprava cinchoninového bis(triethoxysilanového) prekursoru **1** (obrázek 1, nahoře) vycházející z cinchoninu. Ve spolupráci s týmem Dr. Michala Řezanky z TU Liberec byly z prekursoru **1** sol-gel procesem vytvořeny hybridní materiály **M**. Materiály by měly být v budoucnu otestovány při enantioselektivní chlorlaktonizaci (obrázek 1, dole). Vhodný substrát **2** však není komerčně dostupný a pro jeho přípravu jsem použil dva různé syntetické postupy. Jako efektivnější se ukázala čtyř kroková příprava z diethylmalonátu.



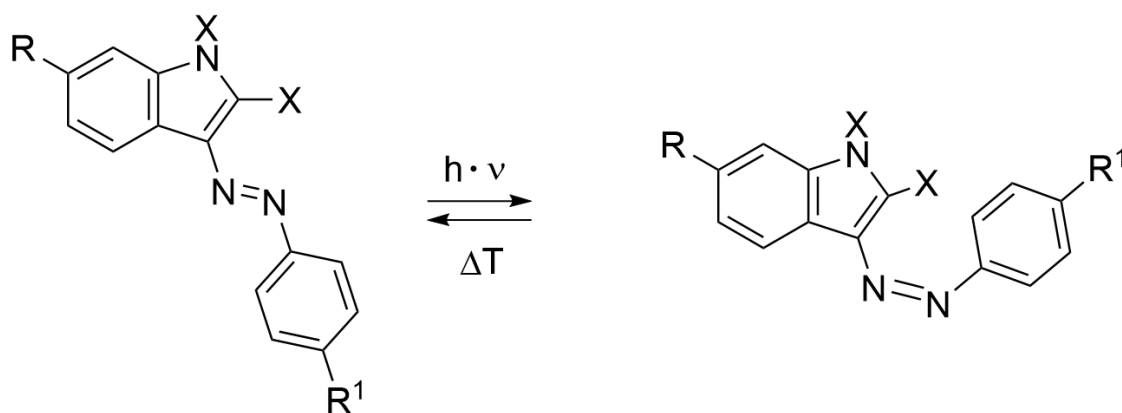
Obrázek 1 - Struktura prekursoru **1** a schéma modelové chlorlaktonizační reakce

Ultrarychlé kapalně-krystalické fotopřepínače

Petr Bečvář (B3)

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

Kapalné krystaly jsou látky, mající vlastnosti pevných i kapalných látek a díky tomu nacházejí nejrozšířenější uplatnění od výroby LCD až po systémy pro uvolňování léčiv. Široká aplikační oblast těchto materiálů je dána jejich schopností reagovat na různé vnější podněty. Jednou ze současných oblastí výzkumu materiálové chemie jsou fotocitlivé materiály, které mění svou molekulární strukturu, a tím i supramolekulární uspořádání vlivem světla. Ve své práci se věnuji syntéze modelových ultrarychlých fotocitlivých kapalných krystalů s centrálním jádrem odvozeným od fenyldiazenylindolu a substitucí R nebo R¹ na indolovém nebo fenylovém jádře (Obr. 1). Tyto látky mohou vlivem ozáření UV světlem měnit izomerii z (E) na (Z) v roztoku v řádu nanosekund. Naším cílem je tuto strukturní jednotku využít pro syntézu unikátních kapalných krystalů se schopností podobně rychlé změny supramolekulárního uspořádání.



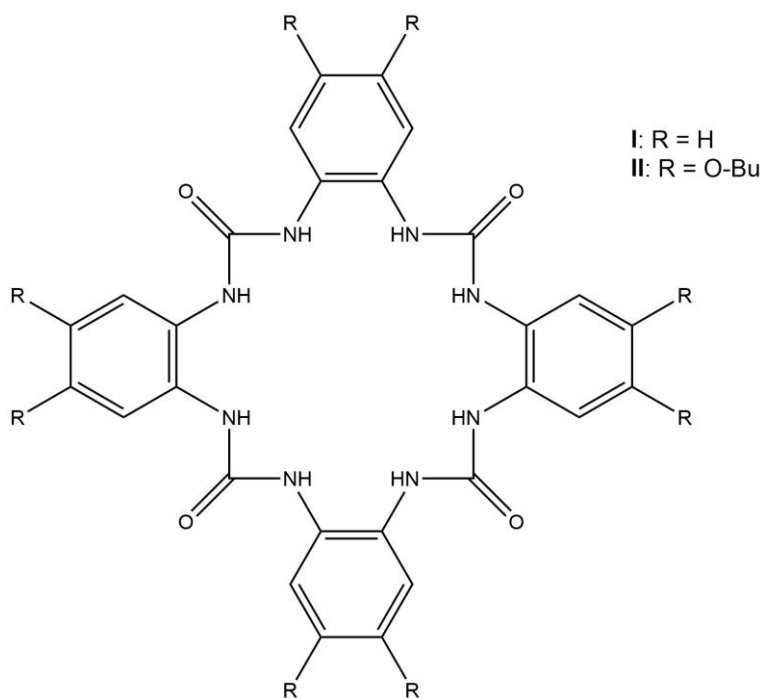
Obr. 1 Obecná struktura modelových kapalných krystalů a změna jejich struktury ($X=\{H, CH_3\}$)

Syntéza substituovaných fenylen-močovinových makrocyklů

Kateřina Svobodová (B3)

Školitel: Ing. Bc. Michal Himl, Ph.D.

Receptory pro komplexace a rozpoznávání aniontů pomocí nekovalentních interakcí nacházejí často využití v supramolekulární chemii. Do skupiny takových receptorů patří například deriváty močoviny, amidy kyselin nebo některé další dusíkaté sloučeniny. Tato práce se zabývá syntézou receptorů obsahujících substituované močoviny, které jsou díky přítomnosti elektropozitivních center schopny nekovalentními interakcemi komplexovat anionty. Cílem této práce byl pokus o zopakování popsané syntézy makrocyklu I a syntéza makrocyklu II pro následné zjištění a porovnání jejich fyzikálně-chemických vlastností.



Organická chemie bakalářská II

MÍSTO: ONLINE

KOMISE

doc. Ing. Igor Linhart, CSc. (předseda)

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

Ing. Petr Kovaříček, Ph.D.

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

Ing. Martin Valík, Ph.D. (Teva)

PROGRAM

09:15 **zahájení**

09:15 [Ondřej Daněk](#) (B2, Ing. Petra Ménová, Ph.D.)

Synthesis of substituted quinolones as antagonists of DC-SIGN receptor

09:30 [Vojtěch Kramný](#) (B3, doc. Dr. Ing. Jana Hodačová)

Příprava chirálních 3-aminobicyklo[2.2.2]oktan-2-karboxylátů a jejich fosfonátových analogů

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

Příprava derivátů 3,3-difluorcyklobutenu

10:00 [Veronika Budková](#) (B3, doc. Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D.)

Stereoselektivní příprava tetrasubstituovaných alkenů Stilleho reakcí dibromenol-fosfátů

10:30 [Karolína Křížová](#) (B3, prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.)

Syntéza a derivatizace 2,8-dithiacalix[4]arenu

10:45 [Pavel Kraina](#) (B3, Ing. Zlatko Janeba, Ph.D.)

*Syntéza 7-substituovaných derivátů 7-deazaadefoviru jako potenciálních
modulátorů lidských a bakteriálních adenylát cykláz*

11:00 [Lukáš Kamenský](#) (B3, prof. Ing. Radek Cibulka, Ph.D.)

Syntéza fotokatalyzátorov na báze nitro a aminoderivátov flavínov

11:15 [Jakub Širůček](#) (B3, Ing. Martin Krupička, Ph.D.)

Teoretická spektroskopie mechanicky deformovatelných katenanů.

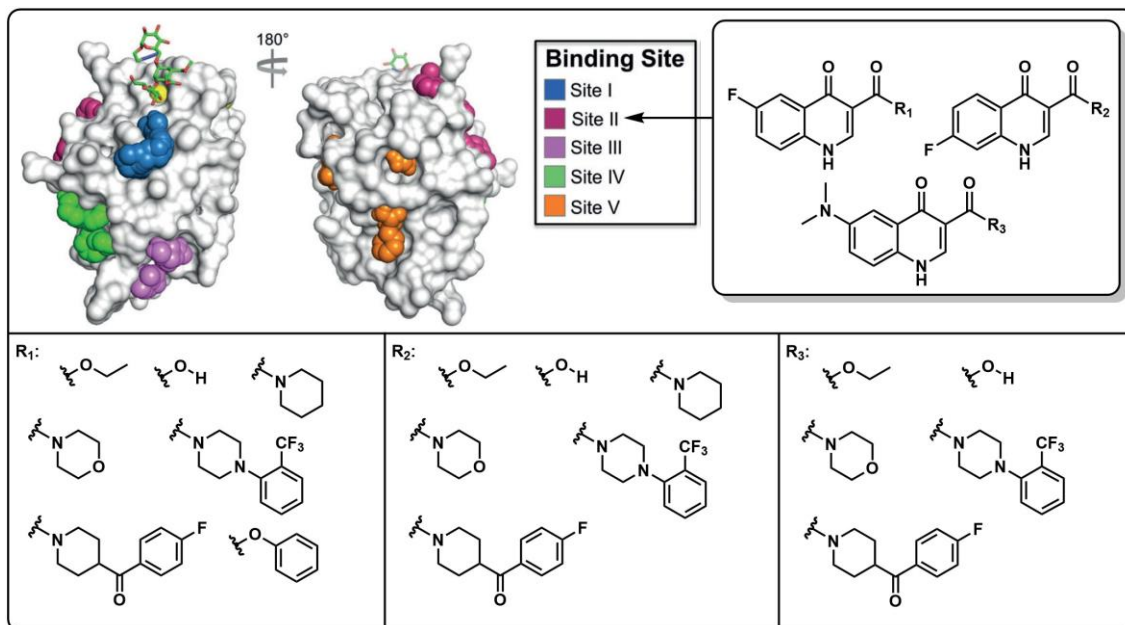
vyhlášení výsledků

Synthesis of substituted quinolones as antagonists of DC-SIGN receptor

Ondřej Daněk (B2)

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, and that is why high affinity antagonists of DC-SIGN have a high potential to become cures for these diseases. The project is focused on the synthesis and evaluation of biological activity of 4-oxoquinoline-3-carboxylic acid derivatives. In a high throughput screening, simple amides of fluoro- and dimethylamino- derivatives showed high affinity for hydrophobic binding sites of DC-SIGN. In this project, we have synthesized a number of amides and esters of 6-fluoro-, 7-fluoro- and 6-dimethylamino-4-oxoquinoline-3-carboxylic acids. Reaction conditions of the synthetic routes to carboxylic acids were optimized and two synthetic approaches were used to prepare the target molecules: peptide coupling using various coupling reagents and synthesis of amides via acyl chlorides. The evaluation of affinity of the synthesized molecules for DC-SIGN is now under way.

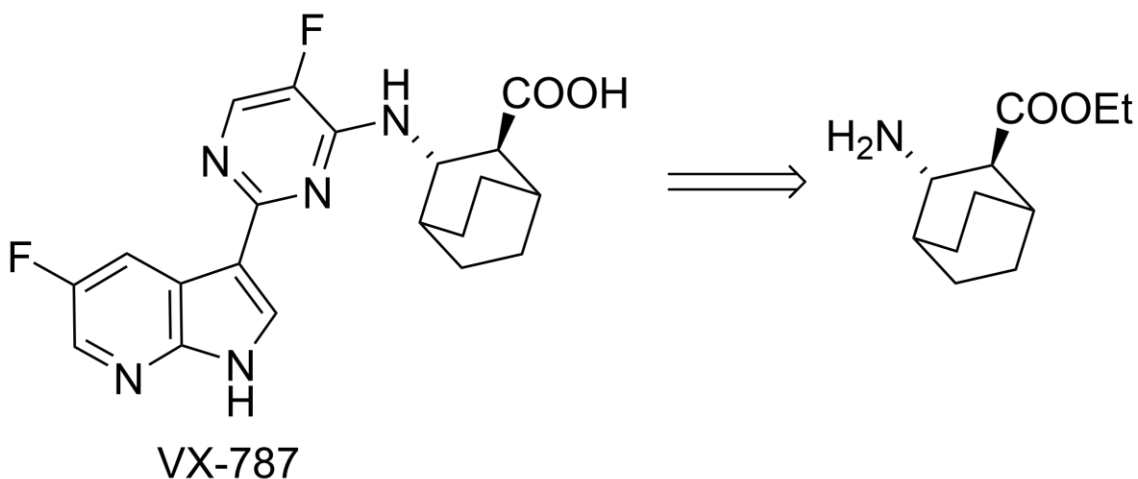


Příprava chirálních 3-aminobicyklo[2.2.2]oktan-2-karboxylátů a jejich fosfonátových analogů

Vojtěch Kramný (B3)

Školitel: doc. Dr. Ing. Jana Hodačová

Syntéza chirálních fragmentů farmaceuticky aktivních ingrediencí je vždy netriviální úlohou vyžadující spojení organické syntézy s pokročilými metodami analytické chemie. V prezentovaném příspěvku budou představeny dva postupy vedoucí k chirálnímu 3-aminobicyklo[2.2.2]oktan-2-karboxylátu, jenž je klíčovou částí sloučeniny VX-787 (viz Obrázek) inhibující PB2 podjednotku RNA-dependentní RNA polymerasy viru chřipky. Tento ne-nukleotidový analog mimikuje 7-methyl GTP a účinně brání přenosu primeru nutného k zahájení transkripce z hostitelské pre-mRNA („cap snatching“ mechanismus). Oba postupy jsou založené na cykloadičních reakcích následované rozdílnou sérií transformací funkčních skupin. Úspěšná příprava enantiomerně čistého fragmentu byla zakončena štěpením racemického aminu. Pro přípravu fosfonátového analogu VX-787 byl navržen syntetický přístup vycházející z derivátu fosforylakrylové kyseliny. Příprava tohoto dienofilu a jeho cykloadiční reakce s cyklohexadienem bude rovněž diskutována.

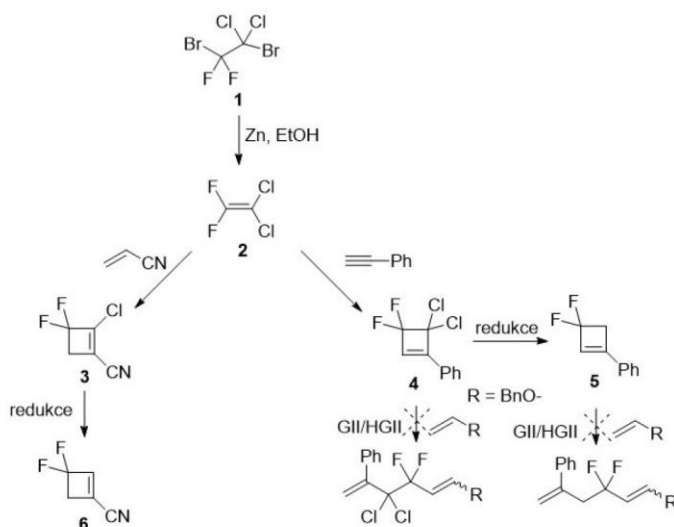


Příprava derivátů 3,3-difluorcyklobutenu

Michal Trojan (B3)

Školitel: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Deriváty 3,3-difluorcyklobutenu představují perspektivní substráty pro metatezi s otevřením cyklu (ROM – Ring Opening Metathesis), která by měla vést k dienům s 1,1-difluorethylenovou spojkou. Cílem mé práce proto byla syntéza derivátů 3,3-difluorcyklobutenu a jejich následná ROM. Při syntéze difluorcyklobutenu jsem vycházel z 1,2-dibrom-1,1-dichlor-2,2-difluorethanu (1), který jsem reakcí se zinkem převedl na 1,1-dichlor-2,2-difluorethen (2). Klíčovým krokem byla následná cykloadice ethenu 2 s akrylonitrilem za vzniku cyklobutenu 3, nebo s fenylacetylenem za vzniku cyklobutenu 4. Nejobtížnějším krokem bylo odstranění chloru, kde jsem testoval různá redukční činidla. U cyklobutenu 3 i cyklobutenu 4 došlo k úspěšnému odstranění atomů chloru, za vzniku cyklobutenu 5 a 6. Reaktivita cyklobutenu 4 a 5 byla testována v metatezi s otevřením cyklu za katalýzy rutheniovými katalyzátory GII (Grubbsův katalyzátor 2. generace) a HGII (Hoveyduův-Grubbsův katalyzátor 2. generace). Pilotní metateze zatím buď nevedly k žádným reakcím, nebo poskytly složité směsi produktů.

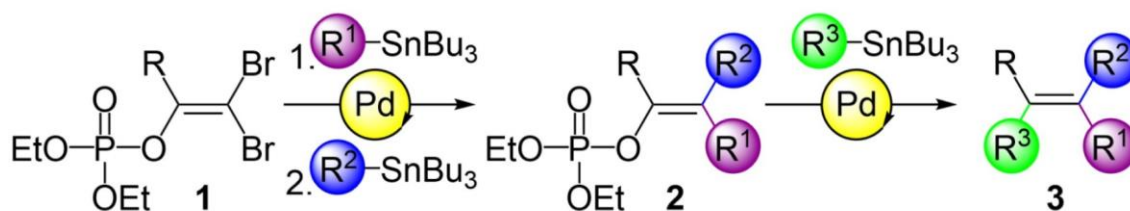


Stereoselektivní příprava tetrasubstituovaných alkenů Stilleho reakcí dibromenol-fosfátů

Veronika Budková (B3)

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

Tetrasubstituované alkeny jsou důležitým strukturním motivem ve farmaceutických a přírodních látkách. Proto je regio- a stereoselektivní příprava tetrasubstituovaných alkenů nedílnou součástí studia vlastností nových látek obsahující tetrasubstituovanou dvojnou vazbu. V nedávné době jsme publikovali novou metodiku pro přípravu tetrasubstituovaných alkenů, která využívá kombinaci Suzukiho a Negishiho reakce dibromvinyl-fosfátů 1. Ve své práci jsem navázala na tyto výsledky a pokusila jsem se využít Stilleho reakce pro modifikaci dibromvinyl-fosfátového templátu 1. Nejprve jsem si připravila výchozí fosfát 1, u kterého jsem zkoumala možnost provedení regioselektivní substituce atomů bromu reakcí s tributylfenylstannanem.

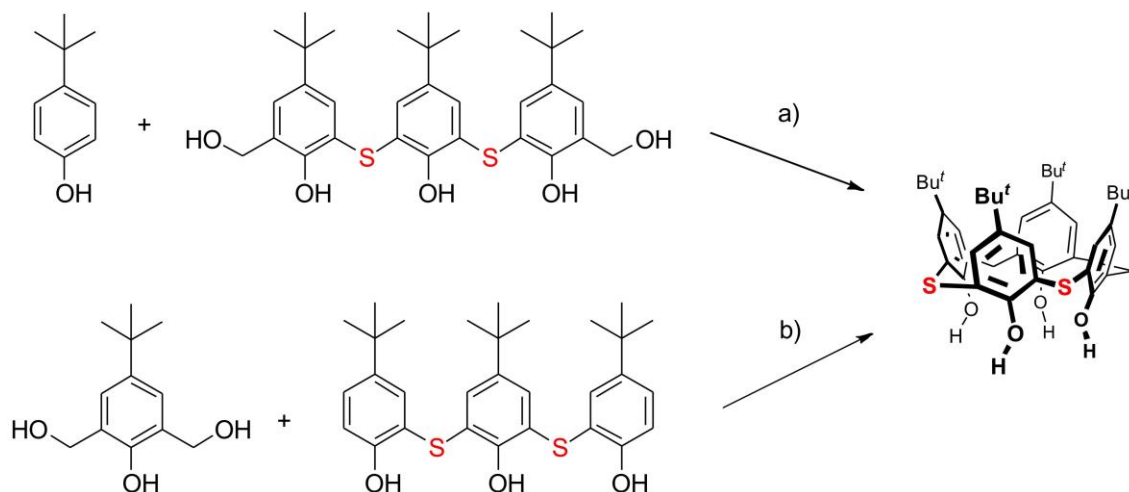


Syntéza a derivatizace 2,8-dithiacalix[4]arenu

Karolína Křížová (B3)

Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Cílem této práce je syntéza a výzkum vlastností 2,8-dithiacalix[4]arenu. K přípravě cílové struktury byly využity dvě různé strategie: a) 3+1 kondenzace bis-hydroxymethylovaného trifenolu s p-terc-butylfenolem, nebo b) obrácená 3+1 kondenzace bis-hydroxymethylovaného fenolu s nesubstituovaným trifenolem. Výtěžky obou reakcí jsou rozdílné, přičemž v první reakci vzniká také malé množství oktamerního makrocyklu. Protože kavita oktameru odpovídá velikosti rozměru fullerenu C₆₀, pokusila jsem se navýšit výtěžek oktameru přidáním fullerenu do reakční směsi (využití možného templátového efektu). Druhá část práce je zaměřena na alkylaci spodního okraje nově připraveného 2,8-dithiacalix[4]arenu, s důrazem na stereoselektivitu alkylačních reakcí v závislosti na zvolených reakčních podmínkách. Výsledky této studie, kde může vznikat až 6 různých konformerů (atropisomerů) budou následně porovnány s chováním regioisomerního 2,14-dithiacalix[4]arenu, který se liší polohou můstkových atomů síry.

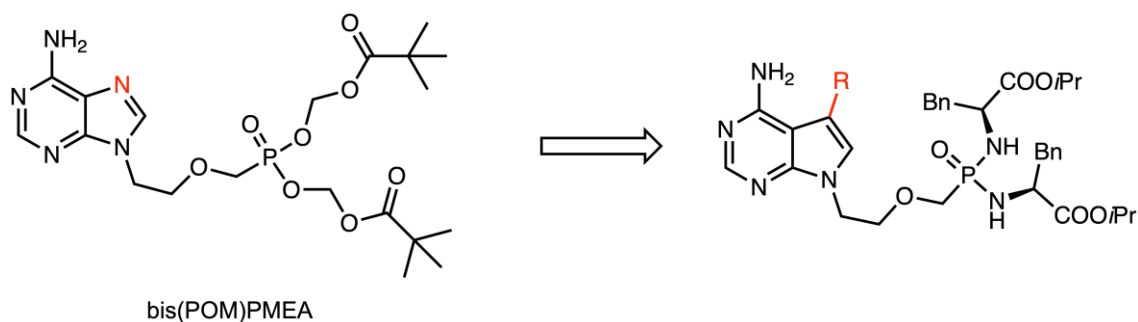


Syntéza 7-substituovaných derivátů 7-deazaadefoviru jako potenciálních modulátorů lidských a bakteriálních adenylát cykláz

Pavel Kraina (B3)

Školitel: Ing. Zlatko Janeba, Ph.D.

Adenylát cyklázy (AC) jsou enzymy, které mají klíčovou regulační roli v lidských buňkách. AC přeměňují adenosintrifosfát (ATP) na cyklický adenosinmonofosfát (cAMP), který se účastní přenosu nervového vzruchu jakožto sekundární přenašeč informací. Předpokládá se, že ovlivňování produkce cAMP u lidských AC může hrát roli při léčbě neurodegenerativních chorob a neuropatických bolestí. Inhibice bakteriálních AC, jak je známo, má také velký potenciál při léčbě některých bakteriálních infekcí (např. u černého kašle či anthraxu). Acyklické nukleosidfosfonáty (ANP) jsou dnes již známými léky při léčbě AIDS, hepatitidy typu B a jiných virových onemocnění. Nedávno bylo prokázáno, že některé ANP (např. adefovir) jsou schopny modulovat jisté lidské a/nebo bakteriální AC. Cílem této práce je připravit sérii nových analogů adefoviru (PMEA), konkrétně 7-substituovaných 7-deazapurinových derivátů, ve formě proléčiv a získat informace o jejich biologické aktivitě jak na bakteriálních, tak lidských AC.

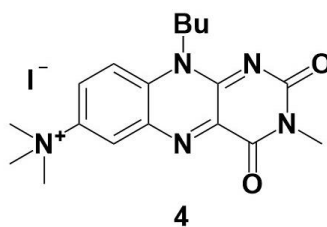
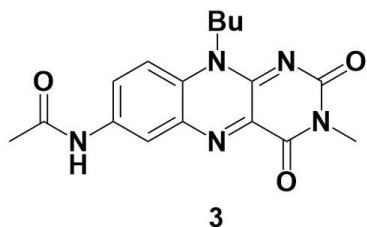
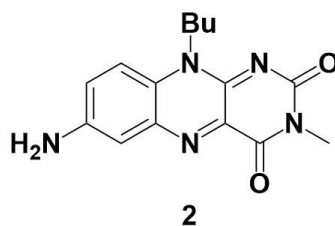
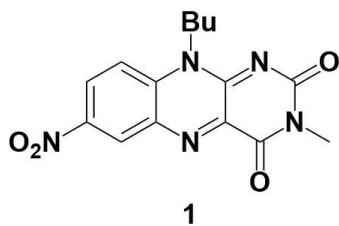


Syntéza fotokatalyzátorov na báze nitro a aminoderivátov flavínov

Lukáš Kamenský (B3)

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

Flavíny, deriváty vitamínu B₂, sú látky dobre známe z biochemického prostredia. Majú nezastupiteľnú úlohu vo viacerých oxidoreduktázach a keďže vďaka silnému oxidačnému potecinálu môžu katalyzovať oxidáciu náročných substrátov, našli výnimočné uplatnenie aj vo fotochemických reakciách. Práca pojednáva o syntéze nových, doposiaľ neznámych flavínových derivátov 1 – 4 využívajúc rôzne dusíkaté substituenty v polohe 7. Tieto derivácie značne ovplyvňujú rozloženie elektrónovej hustoty v štruktúre flavínu, čo môže mať žiadúci následok v reaktivite pri fotokatalýze.

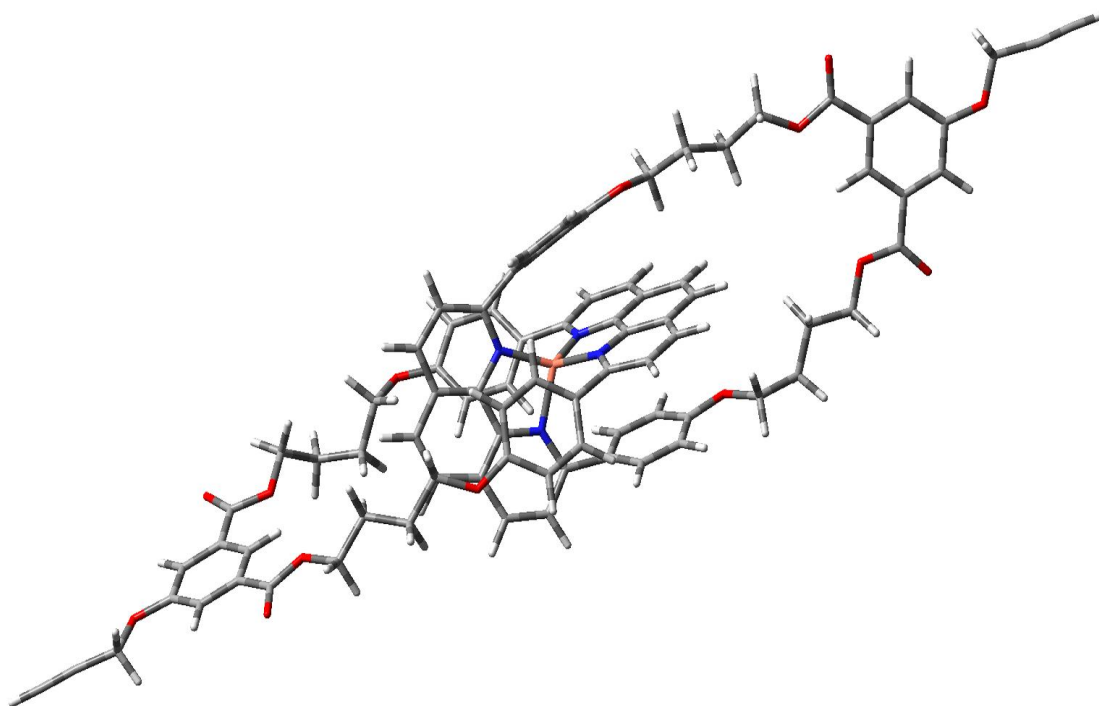


Teoretická spektroskopie mechanicky deformovatelných katenanů.

Jakub Širůček (B3)

Školitel: Ing. Martin Krupička, Ph.D.

Katenany jsou organické struktury obsahující alespoň dva organické makrocycly topologicky uzavřené do sebe. 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 dvojici terminálních alkynylových jednotek dochází k deformaci makrocycly a změnám v okolí centrálního atomu mědi. Tato práce využívá metody výpočetní chemie k předpovězení jak vhodné struktury daného katenanu pro syntézu, tak i změny absorpčních spekter při působení mechanické síly. Celkem byly studovány tři varianty katenanu lišící se počtem uhlíků v alifatických částech řetězců při působení vnější síly v rozsahu 0,1-2,0 nN. Jako nejvhodnější se jeví struktura obsahující 4 methylenové skupiny ve všech čtyřech alifatických můstcích.



Organická chemie bakalářská III

MÍSTO: ONLINE

KOMISE

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

Ing. Markéta Rybáčková, Ph.D. – organizační tajemník

Ing. Josef Zezula, Ph.D. (Zentiva)

Ing. Petr Slavík, Ph.D. (Santiago)

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

PROGRAM

09:15 **zahájení**

09:15 [Radek Staník](#) (B3, doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.)

Příprava derivátů calix[4]arenu vhodných jako jádra pro výstavbu dendrimerních struktur

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

Elektrondeficitní disubstituované isoalloxaziny jako katalyzátory fotooxidací

09:45 [Vít Jeníček](#) (B3, Ing. Markéta Rybáčková, Ph.D.)

4-Amino-5-methyl[2.2]paracyklofan jako prekurzor NHC ligandů

10:00 [Marie Kloubcová](#) (B3, doc. Ing. Michal Kohout, Ph.D.)

Nukleofilem iniciované cyklizace esterů enolformy 1,3-diketonů a α,β -nenasycených kyselin

10:30 [Jakub Schimmer](#) (B1, Ing. Petra Ménová, Ph.D.)

Mannose-based antagonists of DC-SIGN receptor

10:45 [Vojtěch Bičák](#) (B1, Mgr. Alan Liška, Ph.D.)

Stereoelektrochemie atropoisomerních tetranitrokalixarenů

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

Příprava prolékových forem biologicky aktivních nukleosidových analogů

11:15 [Petr Palivec](#) (B3, Ing. Radek Jurok, Ph.D.)

Syntéza metabolitů nové syntetické drogy 25CN-NBOMe

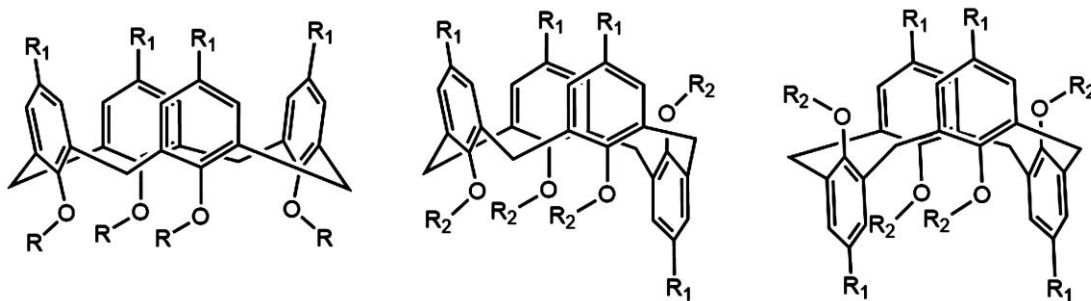
vyhlášení výsledků

Příprava derivátů calix[4]arenu vhodných jako jádra pro výstavbu dendrimerních struktur

Radek Staník (B3)

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 ve třech různých konformacích, a to konické, částečně konické a 1,3-střídavé, které by mohly sloužit jako jádro dendrimerní struktury, a následná příprava dendrimery jako takového divergentní metodou, která spočívá ve výstavbě od jádra k periférii. V mém případě se jedná o Michaelovu adici aminoderivátu na methyl-akrylát, následně nukleofilní substitucí esteru ethylendiaminem za vzniku amidu. Tento postup bude opakován, dokud nezískáme požadovanou generaci dendrimery. Závěr syntézy bude spočívat v reakci s isokyanáty za vzniku močovinových skupin na povrchu dendrimery, takže výsledný dendrimer bude využit jako receptor aniontů.



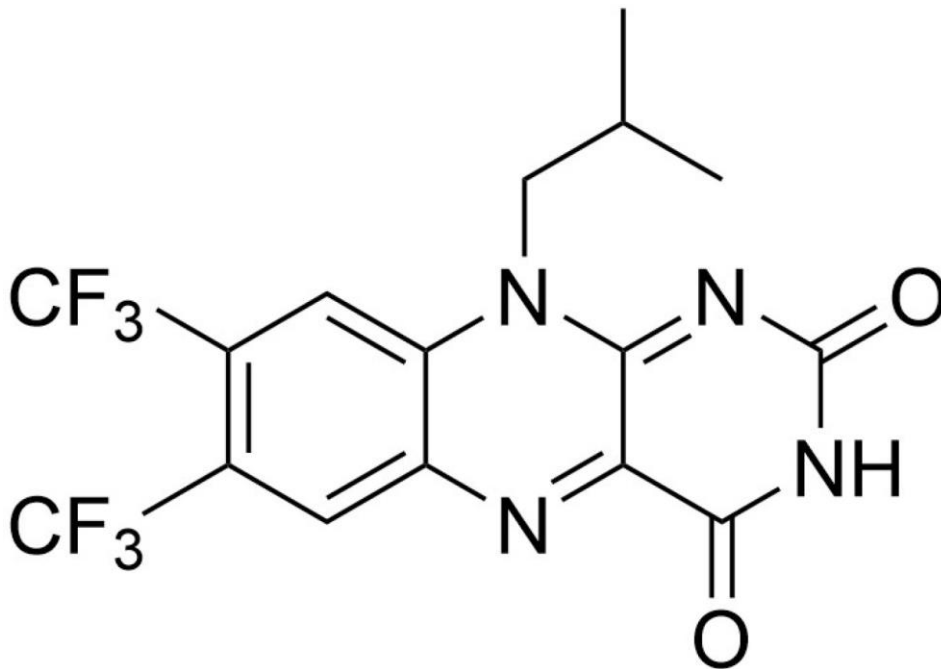
1. $R_1 = \text{NH}_2, \text{CH}_2\text{NH}_2, \text{CONH}_2, \text{H}$
 $R_2 = \text{Pr}$
2. $R_1 = \text{H}$
 $R_2 = \text{CH}_2\text{CONHCH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2$

Elektrondeficitní disubstituované isoalloxaziny jako katalyzátory fotooxidací

Rostislav Sponar (B3)

Školitel: Ing. Eva Svobodová, Ph.D.

Flaviny jsou biologicky aktivní látky, které díky své schopnosti absorbovat světlo, mohou být využity jako katalyzátory při oxidačních i redukčních reakcích. Katalytickou aktivitu flavinů ovlivňují jejich substituenty v poloze 7 a 8. Elektron-akceptorní substituenty, mezi které řadíme např. $-\text{CN}$, $-\text{CF}_3$ nebo $-\text{Cl}$, dokáží zvýšit elektrofilitu celé struktury a tím zvyšovat celkovou katalytickou aktivitu. Významnou transformací je v organické chemii oxidace. V současné době je stále větší důraz kladen na oxidační procedury přívětivé z hlediska životního prostředí, zejména ty, které využívají kyslík jako stechiometrické oxidační činidlo. V této práci je popsán postup přípravy 7,8-bis(trifluormethyl)-10-isobutylisoalloxazinu a příklady použití elektrondeficitních flavinů v organické syntéze.

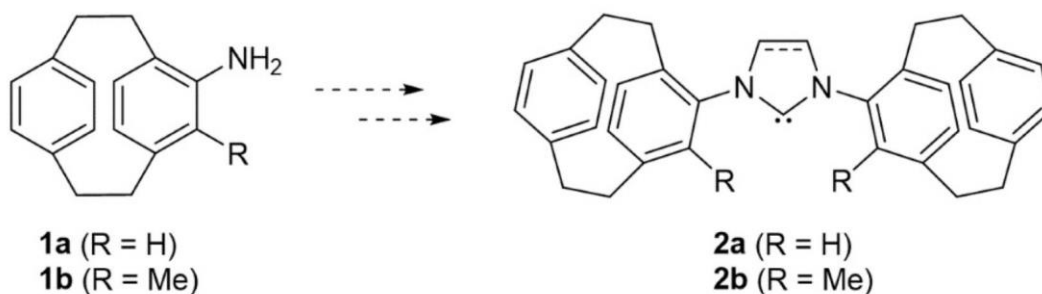


4-Amino-5-methyl[2.2]paracyklofan jako prekurzor NHC ligandů

Vít Jeníček (B3)

Školitel: Ing. Markéta Rybáčková, Ph.D.

Planárně chirální 4-amino[2.2]paracyklofan (1a) může sloužit jako prekurzor NHC ligandů pro komplexy přechodných kovů. Rutheniové komplexy s ligandem 2a se však doposud připravit nepodařilo. Ve své práci se zabývám přípravou 4-amino-5-methyl[2.2]paracyklofanu (1b), který by měl poskytnout odpovídající ligand 2b, jehož rutheniový komplex by díky zavedení methylové skupiny do *ortho*-polohy vůči atomu dusíku mohl být stabilnější než nemethylovaný analog. Pro přípravu paracyklofanu 1b jsem navrhl a rozpracoval dvě syntetické cesty. Obě vycházejí z komerčně dostupného [2.2]paracyklofanu a klíčové intermediáty v nich představují 4-amino[2.2]paracyklofan (1a) a 4-brom-5-methyl[2.2]paracyklofan.

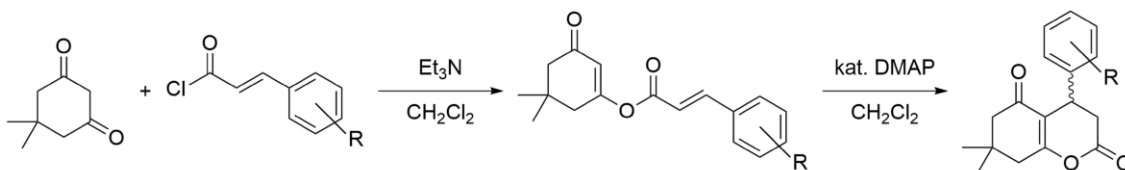


Nukleofilem iniciované cyklizace esterů enolformy 1,3-diketonů a α,β -nenasycených kyselin

Marie Kloubcová (B3)

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

Jednou z málo prozkoumaných reakcí esterů enolforem 1,3-diketonů a α,β -nenasycených kyselin je jejich nukleofilem katalyzovaná cyklizace. V závislosti na struktuře výchozích látek poskytuje reakce širokou škálu derivátů hexahydrokumarinu, jehož strukturní motiv se vyskytuje v řadě molekul biologicky aktivních látek. Tato reakce byla v literatuře popsána pro syntézu hexahydrokumarinů a dihydropyranonů za NHC-katalýzy a přítomnosti silných bází. V naší laboratoři však bylo zjištěno, že pro iniciování reakce postačí dostupnější 4-(dimethylamino)pyridin (DMAP). Cílem této práce je syntéza série esterů dimedonu s různě substituovanými skořicovými kyselinami a jejich následná cyklizace vedoucí k pochopení mechanismu, selektivity a rozsahu této reakce.



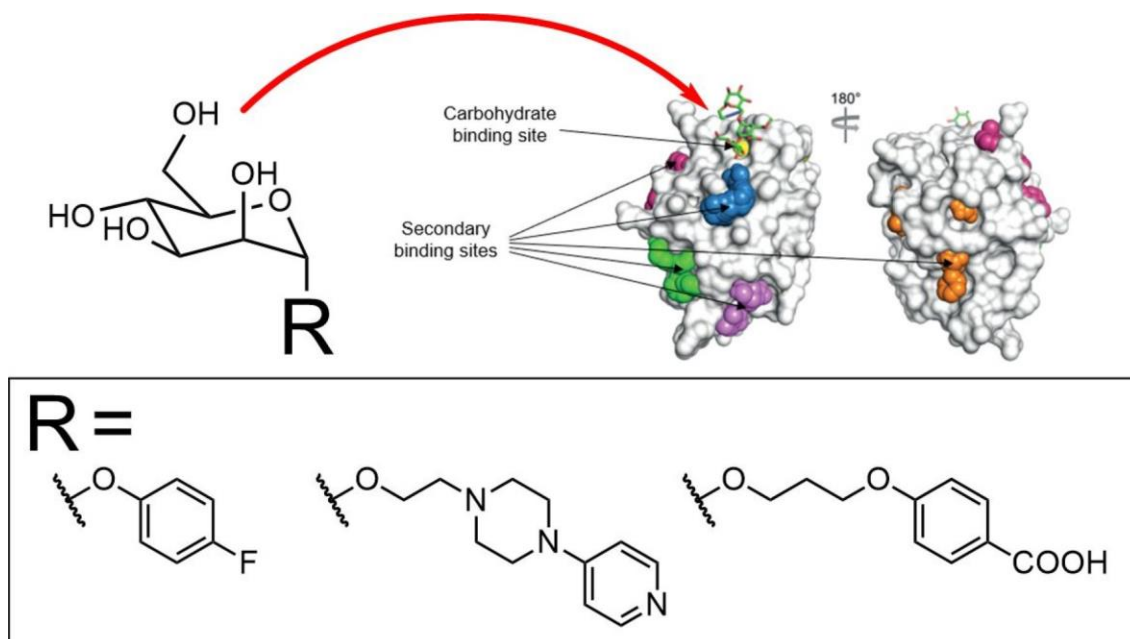
R = H; 2-NO₂; 3-NO₂; 4-NO₂; 2-OCH₃; 3-OCH₃; 4-OCH₃

Mannose-based antagonists of DC-SIGN receptor

Jakub Schimmer (B1)

Školitel: Ing. Petra Ménová, Ph.D.

DC-SIGN is a C-type lectin receptor which is located on the surface of dendritic cells and macrophages. It recognizes and binds carbohydrates, particularly mannose- containing glycoproteins on pathogens and initiates an appropriate immune response. Since DC- SIGN plays a significant role in the initial stages of infamous diseases such as HIV or hepatitis C, inhibition of this receptor could be an interesting approach to their treatment. Nowadays, a technique called fragment- based drug discovery is being used whilst developing new therapeutic agents. Using this approach, small organic molecules, which have shown significant affinities for DC- SIGN can be either linked together (fragment linking) or their affinity can be increased by adding new functional groups (fragment growing). My goal is to synthesize fragments with high affinity for the receptor and link them to the mannose moiety. Thus created mannosides should be even stronger DC- SIGN inhibitors.

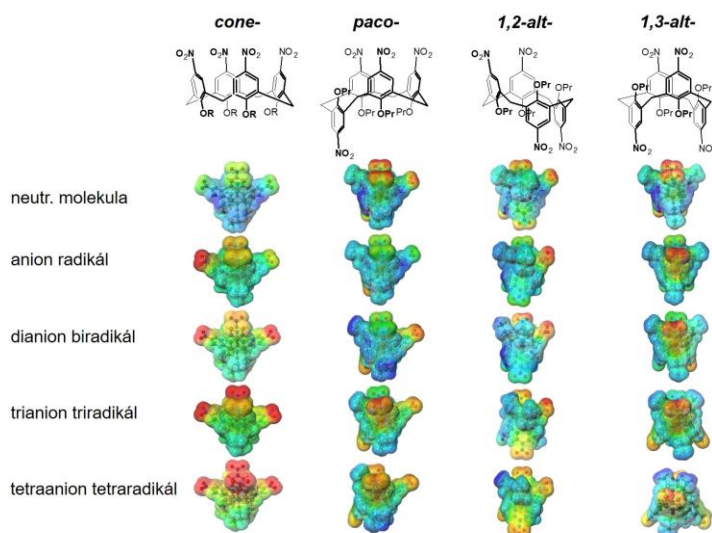


Stereoelektrochemie atropoisomerních tetranitrokalixarenů

Vojtěch Bičák (B1)

Školitel: Mgr. Alan Liška, Ph.D.

Kalixareny patří mezi populární stavební bloky v supramolekulární chemii. Pro jejich použití v cílových aplikacích (zejména sensory) je potřeba kromě vhodné derivatizace definovat výsledné prostorové uspořádání ligandu. Poněvadž nitroderiváty figurují v syntéze jako meziprodukty a zároveň jsou elektrochemicky aktivní, nabízí se možnost sledovat mechanismus jejich redukce elektrochemicky. Diskutovaný tetranitrokalix[4]aren **K** vystupuje ve čtyřech stabilních atropoisomerních formách (viz přiložený obrázek), přičemž každý konformer se vyznačuje jinými voltametrickými projevy. U nejsymetričtějšího cone-konformeru je již známo [1], že jeho tvar je zploštělý (C_{2v}), obsahuje tedy dva rozdílné páry nitroskupin, přičemž jako první se redukují ty vzdálenější. U ostatních tří atropoisomerů ještě analogická studie nebyla publikována. V rámci příspěvku bude prezentován stručný souhrn experimentálních výsledků, jejich korelace se strukturou (stereochemie) a vybranými semiempirickými modely. Literatura [1] Liška, A., Vojtíšek, P., Fry, A.J., Ludvík, J., J. Org. Chem. 78(2013) 10651.



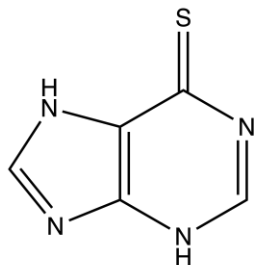
Obr.: Atropoisomery kalixarenu **K** a příslušné redukované formy - mapy ESP vypočítané metodou AM1

Příprava prolékových forem biologicky aktivních nukleosidových analogů

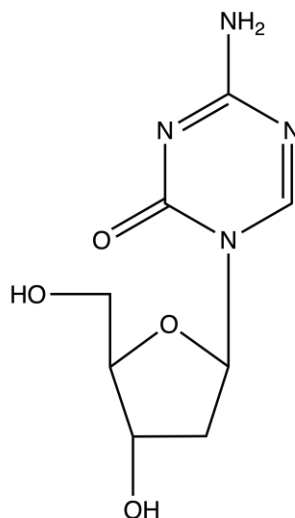
Michaela Baudyšová (B3)

Školitel: doc. Dr. Ing. Jana Hodačová

Proléčiva jsou farmakologicky inaktivní deriváty, získané obměnou struktury biologicky aktivní látky, ze kterých vznikají účinné látky teprve metabolickými přeměnami v organismu. Jsou navržena tak, aby maximalizovala množství aktivní substance v cílové tkáni a jejich zavedení umožňuje překonat problémy například s rozpustností, toxicitou, či rychlou biodegradací. Cílem mé práce je příprava prolékových forem 5-aza-2'deoxycytidinu (decitabinu) a 6-merkaptopurinu, které by měly lepší farmakokinetické vlastnosti oproti původním léčivům. Decitabin i 6-merkaptopurin jsou cytostatika (látky používané k léčbě nádorových onemocnění, jejichž účinkem se zastaví růst nádorových buněk). Obě sloučeniny fungují jako antimetabolity nukleových kyselin, tj. látky chemicky podobné přirozeným prekurzorům tvorby nukleových kyselin, které jakožto falešní mediátoři mohou inhibovat enzymové reakce nezbytné pro funkci nádorových buněk či některých buněčných patogenů. V příspěvku bude diskutována syntéza chemicky modifikovaných analogů decitabinu a nukleosidů na bázi 6-thioguanosinu, jakožto možných prolékových forem obou diskutovaných cytostatik.



6-merkaptopurin



5-aza-2'deoxycytidin (decitabin)

Syntéza metabolitů nové syntetické drogy 25CN-NBOMe

Petr Palivec (B3)

Školitel: Ing. Radek Jurok, Ph.D.

V posledních letech se na černém trhu stále častěji objevují nové syntetické drogy, které jsou prodávány jako náhražky tradičních drog. Jedněmi z těchto drog jsou 25X- NBOMe. Jedná se o substituované fenethylaminy s psychedelickými účinky. Nejvýznamnějšími zástupci této třídy jsou 25I- NBOMe, 25B- NBOMe a 25C- NBOMe. Tyto látky jsou na černém trhu často vydávány za tradiční drogy (LSD, MDMA, 2C- B), nicméně na rozdíl od těchto látek hrozí u 25X- NBOMe vysoké riziko předávkování, kvůli úzkému rozmezí mezi účinnou a toxickou dávkou. Mechanismus účinků těchto látek není příliš prostudovaný, nicméně nejčastěji jsou jejich psychoaktivní účinky připisovány agonismu vůči 5- HT_{2A} a 5- HT_{2C} receptorům. V mé práci se zabývám syntézou předpokládaných metabolitů a deuterovaných standardů 25CN- NBOMe. Tato látka i její metabolity se vyznačují velkou selektivitou vůči 5- HT_{2A} oproti 5- HT_{2C} receptorům. Většina těchto metabolitů není komerčně dostupná, nebo je jejich cena neúměrně vysoká. Syntetizované látky budou sloužit jako standardy pro studii farmakokinetiky této drogy.

Organická chemie magisterská I

MÍSTO: ONLINE

KOMISE

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

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

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

Ing. Martin Krupička, Ph.D.

Ing. Michal März, Ph.D. (Santiago)

Ing. Richard Kammel, Ph.D. (LZ Draslovka)

PROGRAM

09:15 **zahájení**

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

Syntéza vinylflavinů a studium jejich cykloadičních reakcí

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

Syntéza kapalně krystalických ligandů pro modifikaci nanočástic oxidu zinečnatého

09:45 [Bc. Jitka Kalasová](#) (M1, Ing. Ondřej Kunderát, Ph.D.)

Příprava karbosilanových dendritických molekul pro biomedicínské aplikace

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

Syntéza 6,6'-difunkcionalizovaných derivátů 1,1'-binaftalen-2,2'-diolu

10:15 [Bc. Ekaterina Zubova](#) (M1, Ing. Eva Svobodová, Ph.D.)

Deazaflaviny a jejich sirná analoga pro fotokatalytické redukce

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

Synthesis of mannose-based DC-SIGN antagonists

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

Propargyl-fosfáty jako výchozí látky pro přípravu allenů

11:15 [Bc. Magdaléna Labíková](#) (M1, doc. Ing. Michal Kohout, Ph.D.)

Syntéza chirálních katexů a jejich využití v kapalinové chromatografii

11:30 [Fabricio Ramírez Cortés B.Sc.](#) (M2, Ing. Bc. Michal Himl, Ph.D.)

Synthesis of Fluorinated Urea Macrocycles

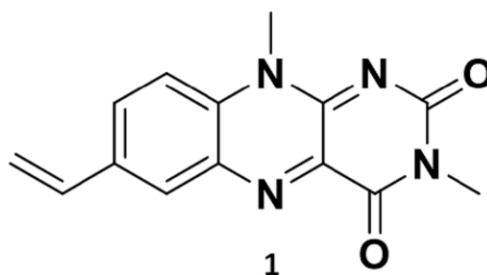
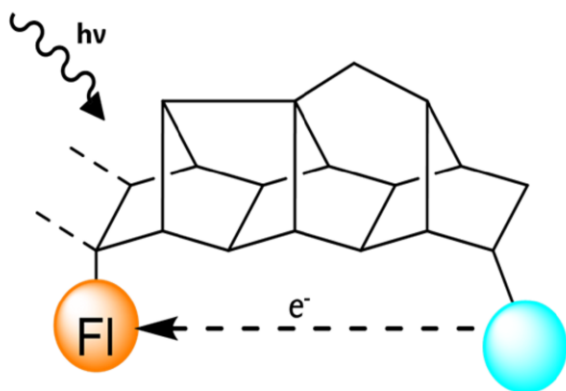
vyhlášení výsledků

Syntéza vinylflavinů a studium jejich cykloadičních reakcí

Bc. Ivana Weisheitelová (M2)

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

Modifikované flaviny (isoalloxaziny, alloxaziny, iso- a alloxaziniové soli) slouží jako modely pro studium fungování flavinů v biologických systémech. Pro hlubší pochopení dějů probíhajících v biologických systémech za účasti světla jsme navrhli modelový systém, ve kterém bude derivát isoalloxazinu navázán na rigidní skelet v definované vzdálenosti od elektronově bohatého substrátu. Tato práce se zaměřuje na hledání způsobu přípravy vinylových derivátů isoalloxazinů, na kterých bude možné pomocí Dielskovy-Alderovy reakce vybudovat rigidní skelet a na otestování modelových Dielských-Alderových reakcí na pro tyto účely připraveném 10-methyl-3-methyl-7-vinylisoalloxazinu (1).

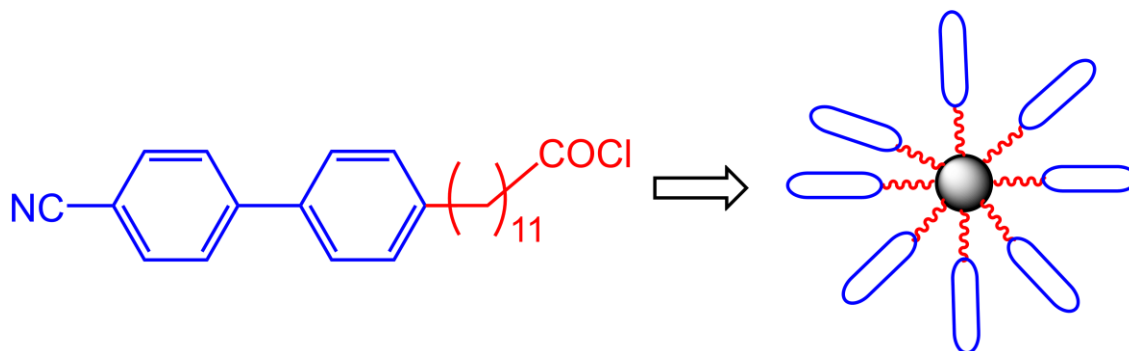


Syntéza kapalně krystalických ligandů pro modifikaci nanočástic oxidu zinečnatého

Bc. Pavel Mata (M2)

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

Kapalné krystaly patří mezi inteligentní supramolekulární materiály využívané například v kapalně-krystalických displejích a informačních technologiích. Přídavek modifikovaných nanočástic do kapalného krystalu může výrazně zlepšit rychlost odezvy organizované nadmolekulární struktury kapalného krystalu (mezofáze) na vnější podněty. Tyto kompozitní materiály lze pak využít například ke skladování dat, výrobě senzorů a jiných moderních technologií. Cílem mého projektu byla příprava kapalně-krystalického ligandu na bázi 4-kyanobifenilu s terminální karboxylovou skupinou. Syntéza spočívala v přípravě a navázání THP-chráněného dodekanolu na aromatické jádro bifenyly v poloze 4'. Získaný alkohol byl oxidován na kyselinu a následně převeden na chlorid, kterým byl modifikován povrch nanočástic ZnO stabilizovaných zesíťovaným ethylenglykolem. Úspěšná modifikace povrchu ZnO byla potvrzena infračervenou spektroskopií v kombinaci s elementární analýzou. K charakterizaci tvaru, velikosti a míry agregace nanočástic bude využito transmisní elektronové mikroskopie (TEM). Předběžné výsledky studia mezomorfních vlastností nanokompozitu naznačují, že přídavek modifikovaných nanočástic indukuje změnu orientace kapalného krystalu vůči povrchu měřící cely.

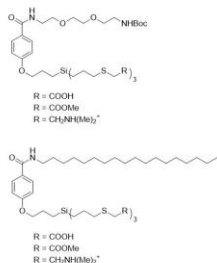


Příprava karbosilanových dendritických molekul pro biomedicínské aplikace

Bc. Jitka Kalasová (M1)

Školitel: Ing. Ondřej Kunderát, Ph.D.

První částí práce byla příprava karbosilanového dendritického substrátu se třemi allylovými skupinami na dendritické části a s terminální chráněnou aminoskupinou ve fokálním bodě (focal point) molekuly. Allylové dvojné vazby byly využity k připojení různých funkčních skupin pomocí tzv. thiol-ene reakce. Terminální aminoskupinu lze využít buď pro navázání dendronu na dendritické jádro a následnou syntézu dendrimeru konvergentní metodou nebo pro navázání fluorescenční značky, krátkého peptidu nebo molekuly afinitní k určitému receptoru a následné využití dendronu pro navazující výzkum v oblasti biochemie. V druhé části této práce byl pomocí dvoukrokové syntézy připraven karbosilanový dendron – opět se třemi allylovými skupinami – nyní však s alifatickým řetězcem na druhém konci molekuly. Z tohoto dendronu je možné připravit amfifilní sloučeniny opět s využitím thiol-ene click reakce, popř. následnou modifikací připojených funkčních skupin. Amfifilní dendrony s dlouhým alkylovým řetězcem mohou v dalším výzkumu sloužit k tvorbě vesikul nebo micel. Tyto struktury bývají využívány jako nosiče léčiv v biomedicínských aplikacích. Tato práce je součástí projektu, v rámci kterého bude připravena rozsáhlejší knihovna karbosilanových amfifilních látek pro biomedicínské aplikace.

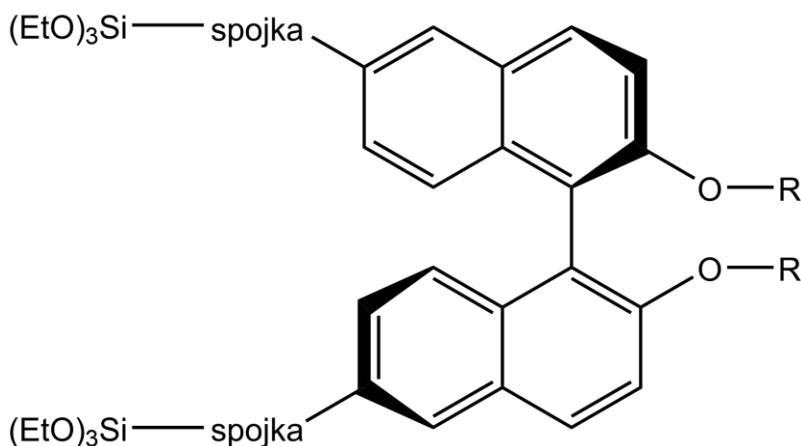


Syntéza 6,6'-difunkcionalizovaných derivátů 1,1'-binaftalen-2,2'-diolu

Bc. Arina Bolshova (M2)

Školitel: doc. Dr. Ing. Jana Hodačová

Alternativou ke klasickým homogenním katalyzátorům jsou katalyzátory heterogenní, které lze snadno izolovat z reakční směsi a případně recyklovat. Cílem práce je příprava heterogenních katalyzátorů enantioselektivních reakcí založených na hybridních organokřemičitých materiálech, což jsou materiály s křemičitou kostrou a navázanou organickou složkou. Prekurzory pro přípravu jednoho typu organokřemičitých materiálů, tzv. přemostěných silseskvioxanů, jsou modifikované katalyticky aktivní molekuly — přemostěné bis(trialkoxysilany). Finální hybridní materiál vzniká provedením sol-gel procesu. Jako chirální organický fragment byl zvolen enantiomerně čistý 6,6'-difunkcionalizovaný derivát (*R*)-1,1'-binaftalen-2,2'-diolu (I). Prvním postupným cílem je zavedení vhodných funkčních skupin do poloh 6 a 6' (*R*)-1,1'-binaftalen-2,2'-diolu, které by umožňovaly následné připojení triethoxysilylových skupin. Byla studována nitrace (*R*)-1,1'-binaftalen-2,2'-diolu a (*R*)-2,2'-dimethoxy-1,1'-binaftalenu, která však nevedla k žádanému 6,6'-dinitroderivátu. Dalším zvoleným přístupem je syntéza (*R*)-6,6'-diethynyl-2,2'-dimethoxy-1,1'-binaftalenu a následné provedení „click“ reakce s (3-azidopropyl)triethoxysilanem.

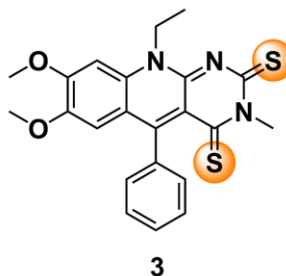
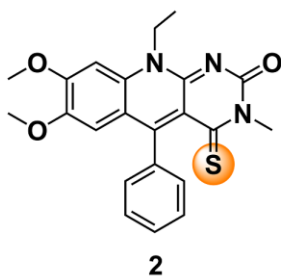
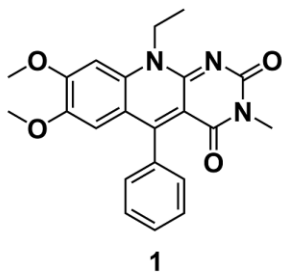


Deazaflaviny a jejich sirná analoga pro fotokatalytické redukce

Bc. Ekaterina Zubova (M1)

Školitel: Ing. Eva Svobodová, Ph.D.

Flaviny jsou přírodní látky, které se již řadu let testují pro účely oxidativní fotokatalýzy. V redukční chemii se však použití flavinových derivátů začalo zkoumat poměrně nedávno. Účinnými se ukázaly být 5-deazaflaviny, které mají ve srovnání s flaviny nižší redukční potenciál. To z těchto látek činí silná redukční činidla schopná katalyzovat redukční reakce substrátů s velmi negativním redoxním potenciálem. Jako velmi dobré a zároveň jednoduché substráty pro testování fotokatalytických účinků 5-deazaflavinů jsou arylhalogenidy substituované různými elektrondonorními a elektronakceptorními funkčními skupinami. Má práce se zabývá přípravou 5-aryl-5-deazaflavinu **1** a jeho sirných analogů **2** a **3** a studiem jejich fotofyzikálních vlastností a využití při fotokatalytických redukčních reakcích.

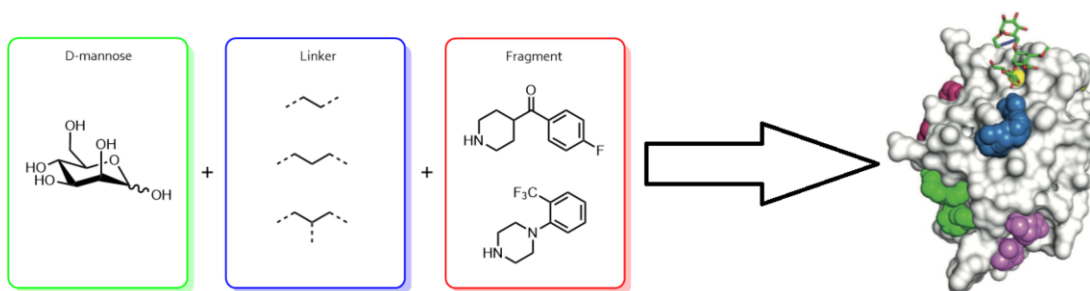


Synthesis of mannose-based DC-SIGN antagonists

Bc. Jiří Ledvinka (M1)

Školitel: Ing. Petra Ménová, Ph.D.

DC-SIGN is a C-type lectin (carbohydrate-binding protein) present on the surface of immune cells (dendritic cells and macrophages). It binds to mannose-containing carbohydrates present on various pathogens and is thus a promising therapeutic target for the inhibition of pathogen entry and the prevention of immune cells infections. In particular, the interactions of DC-SIGN with HIV virus and hepatitis C virus are of high interest. The current research in this field takes advantage of fragment-based drug discovery. Recently, several small-molecule fragments with significant affinities for DC-SIGN receptor were discovered. The aim of this work was to synthesize molecules consisting of an identified fragment and a mannose moiety connected together via a flexible linker. These compounds are expected to have a higher affinity and selectivity for DC-SIGN receptor as well as superior therapeutic potential compared to the identified fragments.

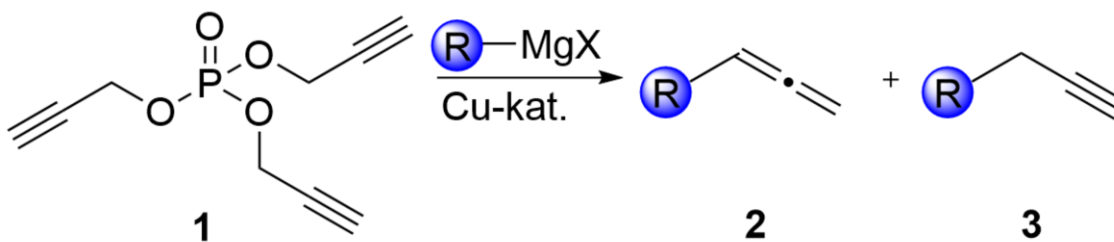


Propargyl-fosfáty jako výchozí látky pro přípravu allenů

Bc. Eva Ostapenko (M2)

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

Alleny jsou sloučeniny, které mají dvě kumulované dvojně vazby. Allenová jednotka se vyskytuje jako součást celé řady přírodních látek. Proto jsou látky obsahující dvě kumulované dvojně vazby studovány z hlediska svých biologických vlastností. Typickým zástupcem z této skupiny látek je enprostil, allenový analog prostaglandinu, u kterého byla prokázána inhibice sekretu žaludečních šťáv selektivním agonistickým účinkem na prostaglandinové EP3 receptory. Alleny jsou také zajímavé z hlediska syntetických aplikací. Proto bylo cílem mé práce vypracovat atomově ekonomický postup pro přípravu allenů. Jako výchozí látku jsem si zvolila propargyl-fosfát 1, u kterého jsem studovala možnost jeho převedení na allen 2. Předběžné výsledky ukázaly, že při reakci fosfátu 1 s Grignardovými činidly vzniká směs požadovaného allenu 2 a alkynu 3. Vliv reakčních podmínek a použitého katalyzátoru na průběh substituční reakce bude diskutován v příspěvku.

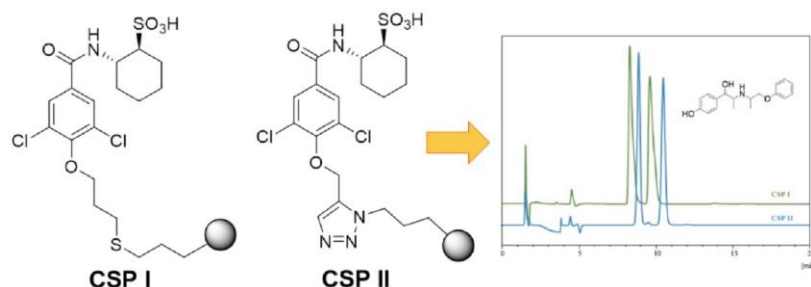


Syntéza chirálních katexů a jejich využití v kapalinové chromatografii

Bc. Magdaléna Labíková (M1)

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 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 a jejich směsi, které nejsou vhodnými analyty pro většinu komerčně dostupných chirálních chromatografických kolon. Sloučeniny tohoto typu lze však efektivně separovat na chirálních ionexech. Cílem této práce je syntéza chirálních stacionárních fází povahy katexů, které ve své struktuře obsahují (1S, 2S)-2-aminocyklohexan-1-sulfonovou kyselinu jako chirální jednotku. Syntéza vycházela z ethylesteru 3,5-dichlor-4-hydroxybenzoové kyseliny, který byl sekvencí reakcí převeden na příslušné amidy s terminální dvojnou a trojnou vazbou. Připravené selektory byly každý jiným způsobem 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.

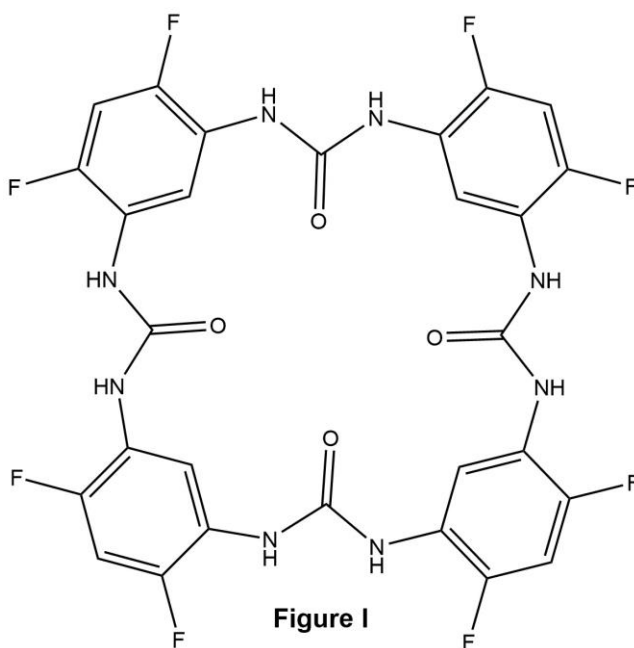


Synthesis of Fluorinated Urea Macrocycles

Fabricio Ramírez Cortés B.Sc. (M2)

Školitel: Ing. Bc. Michal Himl, Ph.D.

The urea motif in macrocycles has been a subject of interest in supramolecular chemistry given their ability to bind with anions through hydrogen bond interaction. The capability to host can be modified by the adjacent groups bonded to the urea moiety, electron donors or acceptors can change the way the molecule interacts with the guest by increasing or decreasing the acidity of the urea hydrogen, as well as the distance between urea units takes a key role determining the cavity size and therefore the kind of molecules that can interact with the macrocycle. The aim of this project is to synthesize a urea bonded macrocycle with 1,3 fluorine functionality (Figure I), the study of the structural assembly of the system and the evaluation of the interaction with different anions, using classic synthesis and structural analysis techniques such as NMR, UV, MS, IR and X-Ray diffraction.



Organická chemie magisterská II

MÍSTO: ONLINE

KOMISE

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

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

Ing. Petra Ménová, Ph.D.

doc. Ing. Jan Kotek, Ph.D. (PřF UK)

Ing. Karel Křenek (DonauLab)

PROGRAM

09:15 **zahájení**

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

Preparation of N-vinyl substituted imidoylhalides from N-fluoroalkylated-1,2,3-triazoles

09:30 [Bc. Jan Kulička](#) (M2, doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.)

Příprava azacalixarenů a příbuzných zwitteriontů

09:45 [Bc. Anna Mlčochová](#) (M2, Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.)

Chirální cyklické močoviny

10:00 [Bc. Jakub Kňava](#) (M2, doc. Ing. Michal Kohout, Ph.D.)

Design a syntéza fotosenzitivních kapalně-krystalických monomerů

10:15 [Bc. Martin Šetek](#) (M1, Ing. Ondřej Kunderát, Ph.D.)

Syntéza alkenů a azosloučenin nesoucích elektrondonorní skupiny pro potenciální biologické aplikace

10:45 [Bc. Diana Jágerová](#) (M1, doc. Ing. Michal Kohout, Ph.D.)

Syntéza kapalných krystalů s fotosenzitivní jednotkou

11:00 [Bc. Karolína Šilhánová](#) (M1, doc. Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D.)

1,3-Dichloroacetone jako stavební blok pro přípravu funkcionalizovaného fosfátu

11:15 [Bc. Jáchym Fibír](#) (M2, Ing. Radek Jurok, Ph.D.)

Design and synthesis of 5-HT_{2A} and sigma-1 dual agonists / Návrh a syntéza 5-HT_{2A} a sigma-1 duálních agonistů

11:30 [Bc. Ladislav Prener](#) (M2, Dr. habil. Ullrich Jahn)

Synthetic studies towards massadine

11:45 [Bc. Jakub Dávid Malina](#) (M1, Ing. Jiří Tůma, Ph.D.)

Ab initio štúdium cyklizácie derivátov spiropyránu

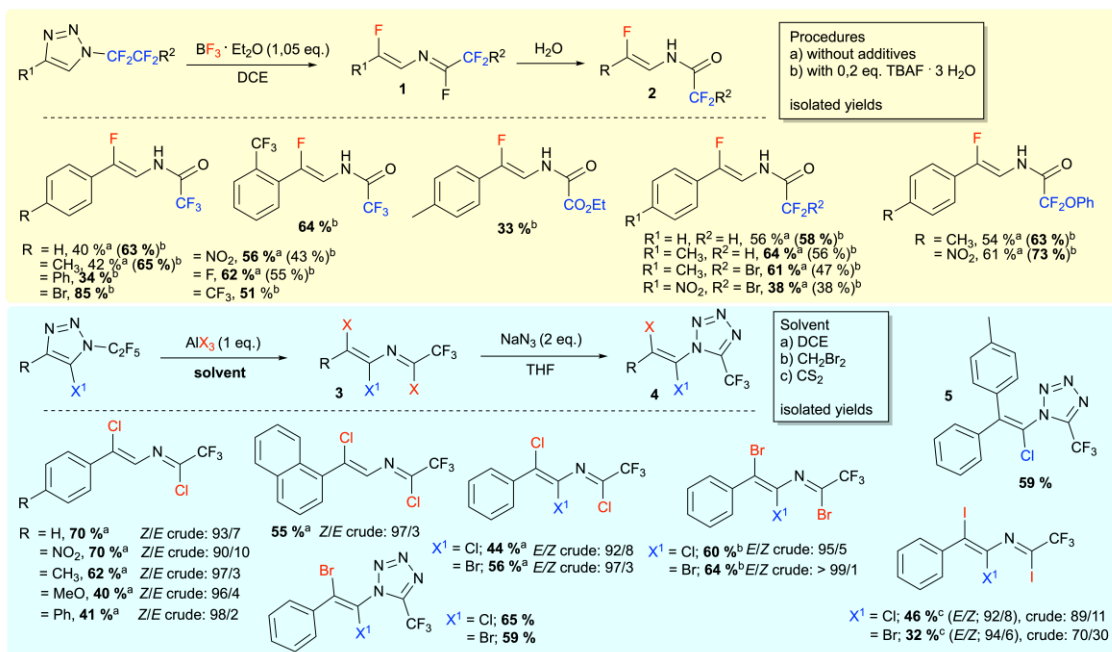
vyhlášení výsledků

Preparation of *N*-vinyl substituted imidoylhalides from *N*-fluoroalkylated-1,2,3-triazoles

Bc. Lukáš Janecký (M2)

Školitel: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

The contribution deals with new synthetic approach leading to *N*-vinyl substituted compounds by Lewis acid-mediated transformation of *N*-fluoroalkylated-1,2,3-triazoles. Using of $\text{BF}_3 \cdot \text{Et}_2\text{O}$ leads to formation of imidoyl fluorides 1 which spontaneously hydrolyze to β -enamido fluorides 2 in good yields. On another hand, AlX_3 ($\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) mediated reaction of *N*-fluoroalkyl triazoles access bench-stable imidoyl halides 3 which could bring renaissance in formation of highly substituted, geometrically defined *N*-vinyl compounds such as enamides, 2-azadienes and *N*-vinyl substituted azoles. Their usage has been showcased in synthesis of tetrazoles 4 and subsequently in case of preparation Clomifene analogue 5 which is used as infertility drug in medicinal chemistry.

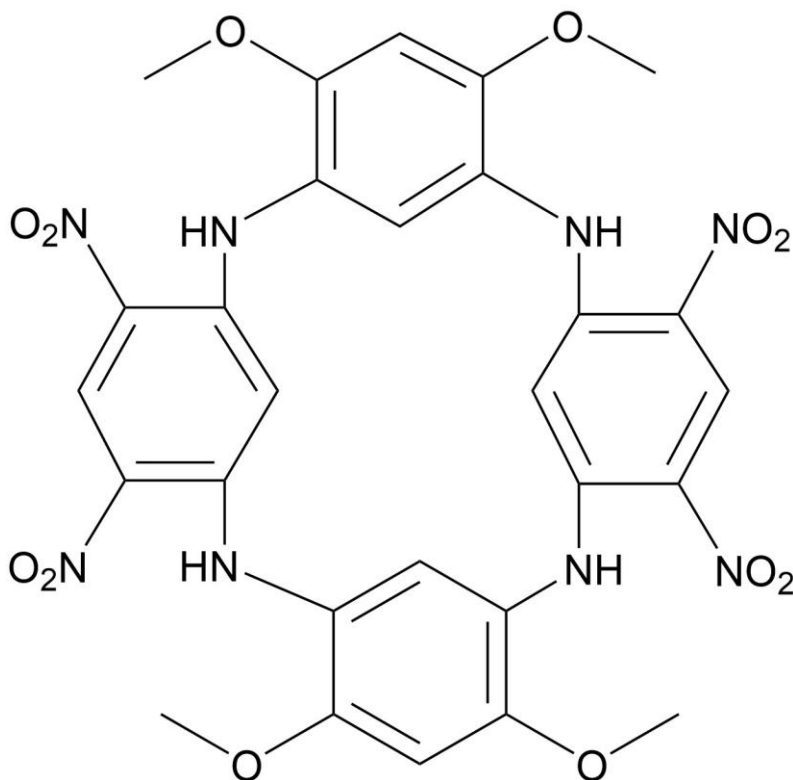


Příprava azacalixarenů a příbuzných zwitterionů

Bc. Jan Kulička (M2)

Školitel: doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.

V rámci mezinárodní spolupráce mezi Ústavem organické chemie VŠCHT a Centre Interdisciplinaire de Nanoscience de Marseille (CINaM) byla realizována šestitýdenní stáž. V rámci této stáže jsem ve skupině dr. Oliviera Siriho pracoval na přípravě azacalixarenů a různě substituovaných zwitterionů. Přestože jsou azacalixareny poměrně novou skupinou látek, díky dusíkatým můstkovým atomům vykazují vlastnosti značně se lišící od klasických calixarenů. Mým cílem bylo připravit nový azacalixaren z komerčně dostupných látek a řadu různě substituovaných 4,6-diamino-resorcinolů k testování na biologickou aktivitu. Výsledky budou diskutovány v prezentaci.

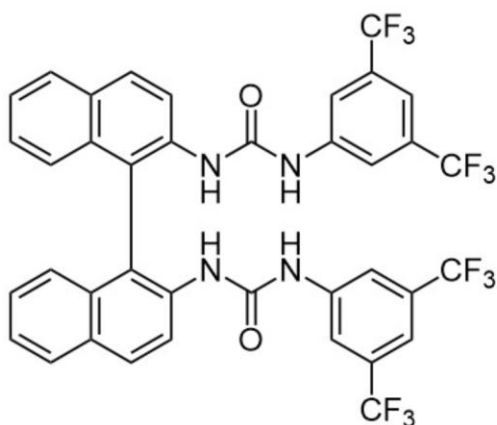


Chirální cyklické močoviny

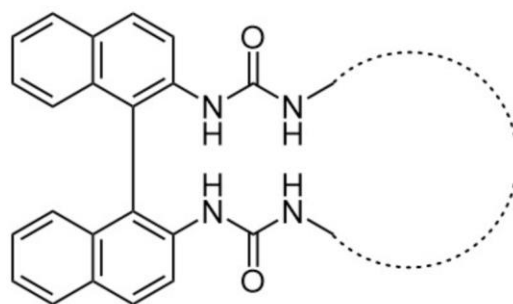
Bc. Anna Mlčochová (M2)

Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.

Ve farmaceutickém průmyslu hrají významnou roli chirální léčiva. Z důvodu příznivých nebo naopak nežádoucích účinků je potřeba kontrolovat čistotu enantiomerů dané látky. Jednou z možností je použití chirálního solvatačního činidla v NMR. Močovina (I) funguje jako solvatační činidlo například pro arylpropanové kyseliny. Pro některá léčiva, jako např. cetirizin, selhává. Z tohoto důvodu bylo cílem mé práce připravit cyklickou chirální močovinu (II), která by mohla mít, díky rigidnější kavitě, lepší interakci s jednotlivými enantiomery chirálních látek.



(I)



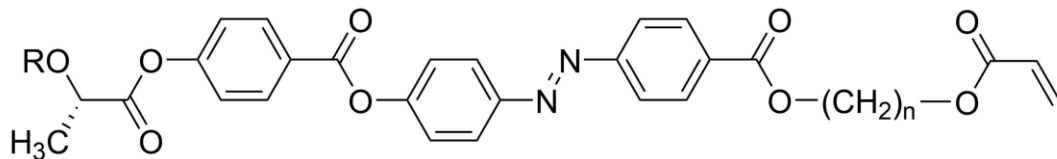
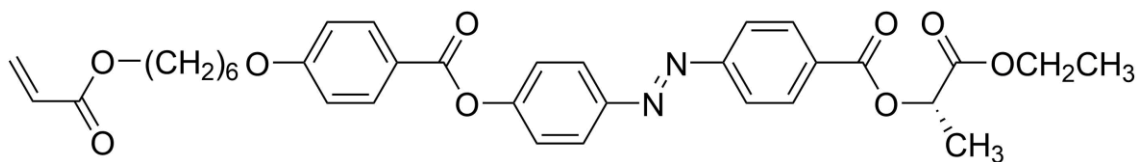
(II)

Design a syntéza fotosenzitivních kapalně-krytalických monomerů

Bc. Jakub Kňava (M2)

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

Díky své schopnosti okamžitě reagovat na drobné vnější podněty se kapalně krystaly řadí mezi materiály vhodné pro přípravu senzorů. Komerčně jsou dostupné například senzory toxických plynů, nebo senzory patogenů pro potravinářský průmysl. Senzory založené na chirálních kapalných krystalech umožňují reagovat na široké spektrum látek barevnou změnou, což je z hlediska uživatele ideální. Avšak jejich opětovná aktivace je poměrně komplikovaná. Reaktivace senzoru by však mohla být snadno provedena rozvolněním supramolekulární struktury senzoru a její opětovnou samoskladbou. Cílem práce je syntéza modelových chirálních fotosenzitivních monomerů na bázi azobenzenu a následné studium vlivu UV záření, především pak možnost fotochemicky iniciované přeměny termodynamicky stabilnějšího *E*-izomeru na *Z*-izomer. Předpokládáme, že molekulární struktura chirálního polymeru obsahující cílové látky by mohla být po ozáření UV světlem částečně rozvolněna přepnutím *E*-izomeru na *Z*-izomer. Následná rychlá relaxace iniciovaná zahřátím senzoru nebo ozářením viditelným světlem by vedla k reaktivaci senzorických vlastností polymeru. Tyto vlastnosti budou studovány na modelových elastomerech a kopolymerech obsahujících níže uvedené modelové chirální fotosenzitivní materiály.



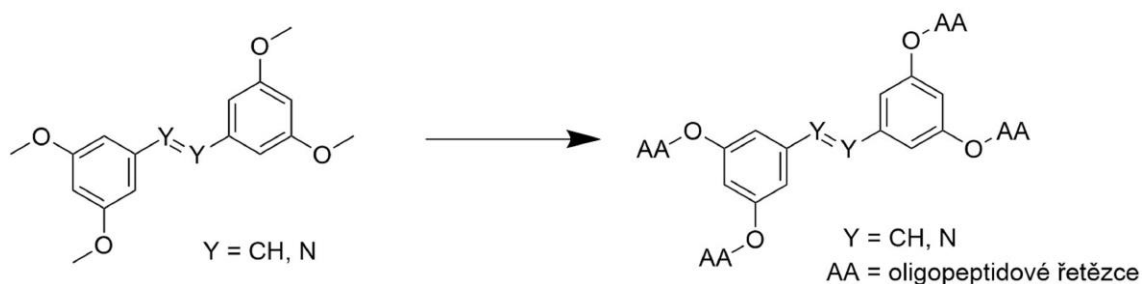
Syntéza alkenů a azosloučenin nesoucích elektrondonorní skupiny pro potenciální biologické aplikace

Bc. Martin Šetek (M1)

Školitel: Ing. Ondřej Kunderát, Ph.D.

Substituované alkeny/azosloučeniny jsou schopny měnit svou konfiguraci na dvojné vazbě (*cis-/trans-*) po dodání energie ve formě světla či tepla. Tato práce se zabývá přípravou výše zmíněných sloučenin, které obsahují areny substituované především elektrondonorními skupinami (hydroxy, methoxy skupiny). Pro přípravu substituovaných azosloučenin byla využita především diazotace a azo-coupling. V případě syntézy substituovaných alkenů byla využita Wittigova reakce a dále byly připraveny reaktanty pro Suzuki coupling. Tímto způsobem připravené sloučeniny lze pak využít jako syntetické světelné spínače, které se až v nedávné době začaly uplatňovat v oblasti biologie, farmakologie a medicíny. Mezi největší výzvy patří posunutí vlnové délky světla potřebné k izomerizaci substituovaných alkenů a azosloučenin z ultrafialové části do červené části viditelného spektra, což umožní právě substituce elektrondonorními skupinami. Využitelnost takových alkenů/azosloučenin spočívá např. v ovlivnění uzavírání a otevírání iontových kanálů, nebo je lze využít jako „spínače“ biologické aktivity u vybraných léčiv např. antibiotik.

Cílové stavební jednotky:

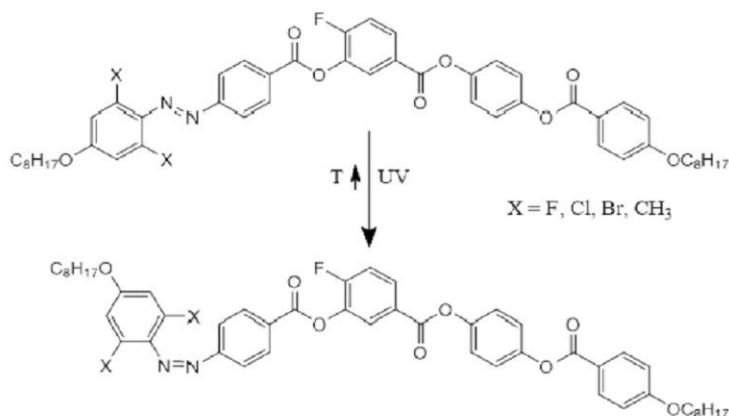


Syntéza kapalných krystalů s fotosenzitivní jednotkou

Bc. Diana Jágerová (M1)

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

Kapalné krystaly, známé především z kapalně-krystalických displejů (LCD), se v posledních letech prosadily i v jiných oblastech informačních technologií, ale i v medicíně. V naší skupině se zabýváme fotosenzitivními lomenými kapalnými krystaly, kde jako fotosenzitivní jednotku využíváme azoskupinu. Azoskupina působením UV záření mění svoji geometrii z termodynamicky výhodného E-izomeru na Z-izomer. Následně dochází k termické relaxaci nebo relaxaci viditelným světlem zpět na E-izomer. Cílem mé práce je syntéza lomených kapalných krystalů, které díky přítomnosti azoskupiny mění svoji geometrii a tím uspořádání molekul v mesofázi ireverzibilně – bez zpětné relaxace teplem. Vysokou termickou stabilitu Z-isomeru jsme zajistili vhodnou substitucí na aromatickém jádře v blízkosti azoskupiny. Zavedení dvou atomů halogenu vede k výraznému potlačení termické relaxace Z-isomeru, jeho rychlé přepnutí na E-izomer je tedy možné pouze viditelným světlem. Tato vlastnost by mohla být zásadní pro úspěšnou přípravu zařízení pro difrakci laserových paprsků, které by bylo ovládáno světelnými impulzy.

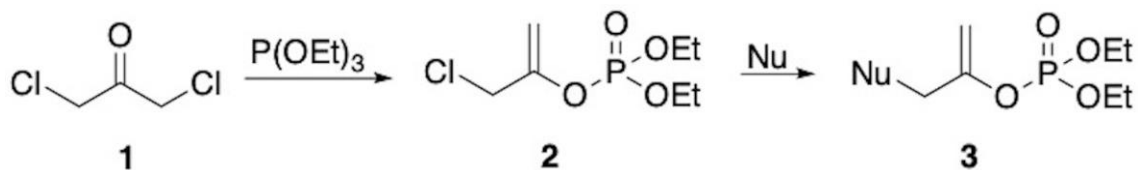


1,3-Dichloraceton jako stavební blok pro přípravu funkcionalizovaného fosfátu

Bc. Karolína Šilhánová (M1)

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

Fosfáty jsou estery kyseliny fosforečné, které nacházejí využití jako pesticidy, případně proléčiva. Své využití mají také v organické syntéze, kdy mohou sloužit například jako elektrofilny v cross-coupling reakcích. Cílem mé práce bylo navázat na intenzivní studium reaktivity enol-fosfátů, které probíhá v naší laboratoři. Zaměřila jsem se na přípravu funkcionalizovaného fosfátu (2), který byl připraven z 1,3-dichloracetonu (1) pomocí Perkowovy reakce. Připravený fosfát (2) obsahuje dvě elektrofilní reakční centra, a proto jsem fosfát (2) podrobila reakci s různými nukleofily, abych prostudovala jeho reaktivitu.



Design and synthesis of 5-HT_{2A} and sigma-1 dual agonists / Návrh a syntéza 5-HT_{2A} a sigma-1 duálních agonistů

Bc. Jáchym Fibír (M2)

Školitel: Ing. Radek Jurok, Ph.D.

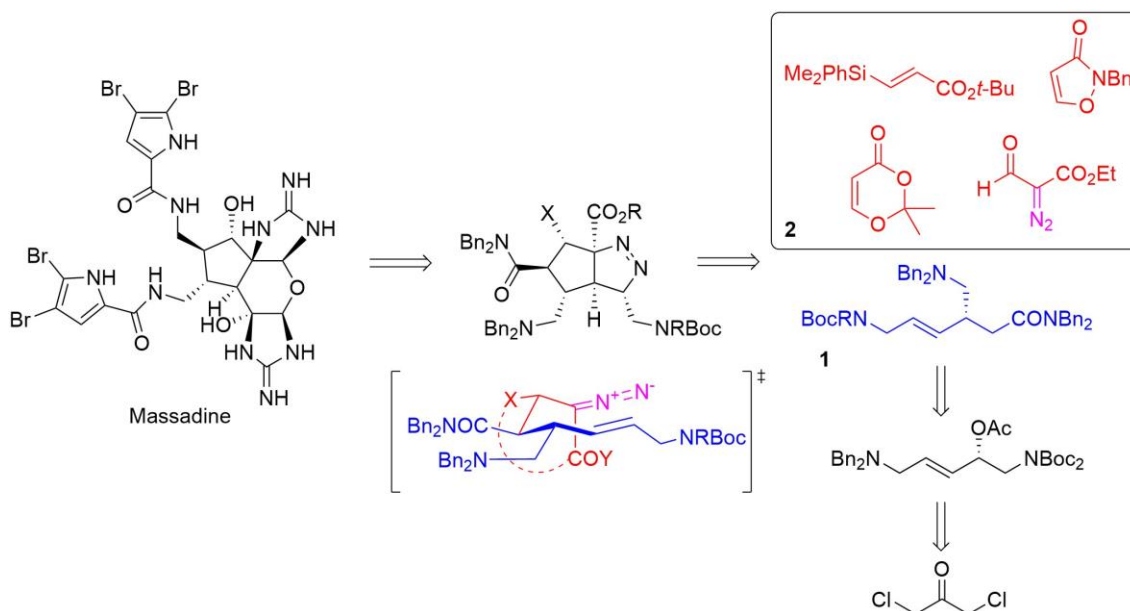
Psychedelic-assisted psychotherapy with psilocybin, a 5-HT_{2A} agonist, has recently shown clinical effectiveness for overcoming treatment-resistant depression. Concurrently, sigma-1 receptor has been identified as a promising target, playing an important role in the antidepressant effects of many approved drugs. Because the mechanisms of antidepressant action differ between 5-HT_{2A} and sigma-1, this work attempts to design drugs that could simultaneously coactivate these targets, aiming to discover novel antidepressants with unique pharmacological profiles. Utilizing a scaffold derived from known 5-HT_{2A}/sigma-1 agonists, this work aims to optimize its substituents for such dual activity. Docking a series of compounds into both receptor's X-ray crystal structures was used to obtain three different scores that were then processed using various methods. All scores were then validated by plotting receiver operating characteristic (ROC) curves for the scores' ability to distinguish agonists from property-matched decoys. The individual substituents were then ordered by their contributions to score and the best substituents were finally used to design a synthetic strategy for an efficient exploration of the best scoring compounds.

Synthetic studies towards massadine

Bc. Ladislav Prener (M2)

Školitel: Dr. habil. Ullrich Jahn

The pyrrole-imidazole alkaloids (PIAs) are a diverse class of over 200 marine natural products with a wide spectrum of biological activity. Massadine, a hexacyclic member of the [3+2] dimeric subgroup of PIAs, is a potent antifungal and neurotoxic agent.¹⁻² A practical synthetic approach to massadine is thus highly desirable. The dense array of functionalities, stereochemical complexity, highly polar structure, and sensitivity of massadine provided a challenge for synthetic chemists for almost two decades. A concise approach towards massadine based on tandem Michael addition/diazo transfer/dipolar cycloaddition or tandem aldolization/dipolar cycloaddition with amide **1** and suitable electrophile **2** was devised. The enantioenriched amide **1** was prepared and the key tandem step investigated.[1] Nishimura, S.; Matsunaga, S.; Shibazaki, M.; Suzuki, K.; Furihata, K.; van Soest, R. W.; Fusetani, N., *Org Lett* 2003, 5 (13), 2255-7.[2] Bickmeyer, U.; Grube, A.; Klings, K. W.; Kock, M., *Toxicon* 2007, 50 (4), 490-7.



Ab initio štúdium cyklizácie derivátov spiropyránu

Bc. Jakub Dávid Malina (M1)

Školiteľ: Ing. Jiří Tůma, Ph.D.

Spiropyrány ako fotoprepínače sú už dlhodobo známe. Ich špecifickou vlastnosťou je, že po ožiarení svetlom menia nielen svoju geometriu ale aj polaritu. Vplyvom UV žiarenia dochádza k otvoreniu pyránového cyklu v spiropyráne, ktorý prechádza na zwitterionovú formu. Táto reakcia je reverzibilná a vplyvom viditeľného svetla dochádza k spätnej cyklizácii zwitteriónovej formy na spiropyrán (Schéma 1a). Moderné chytré organické materiály vyžadujú tvorbu makroskopických chirálnych domén, ktoré obvykle vychádzajú z bodovej chirality molekúl. Spirouhlík v molekule spiropyránu je centrom chirality, avšak počas cyklizácie dochádza k jeho spontánnej racemizácii. V našej skupine vyvíjame spiropyránové fotoprepínače, ktoré vo svojej štruktúre obsahujú druhé centrum chirality s definovanou konfiguráciou. Vzniknuté spiropyrany sa tak vyskytujú vo forme dvoch diastereomérov s odlišnou energiou. Dlhodobým cieľom je pripraviť spiropyrán, ktorého preferencie voči jednému diastereoméru bude úplne dominantná. Cieľom tejto práce je nájsť vhodnú kvantovo-chemickú výpočtovú metódu na stanovenie pomeru jednotlivých diastereomérov modifikovaných spiropyránov v súlade so získanými experimentálnymi výsledkami. Optimalizovaný výpočtový model bol následne použitý na hľadanie nových kandidátov (Schéma 1b).

Schéma 1 a)

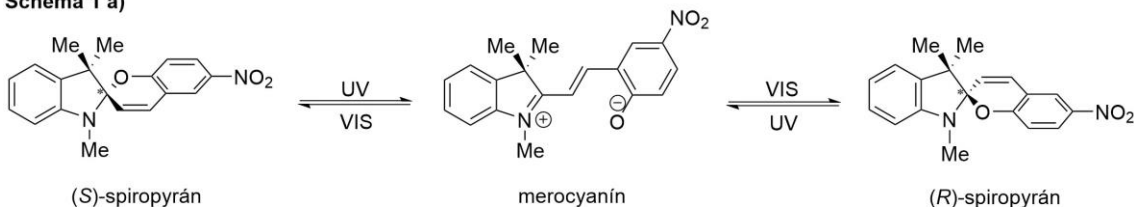
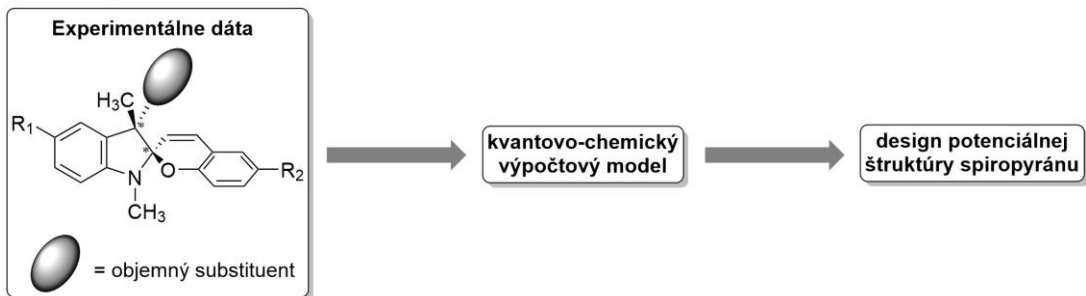


Schéma 1b)



Organická chemie magisterská III

MÍSTO: ONLINE

KOMISE

doc. Ing. Jan Budka, Ph.D. (předseda)

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

Ing. Jiří Tůma, Ph.D.

Ing. Petra Cuřínová, Ph.D. (ÚCHP AV ČR)

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

PROGRAM

09:15 **zahájení**

09:15 [Bc. Michaela Polanková](#) (M2, Ing. Bc. Michal Himl, Ph.D.)

Syntéza makrocyclů s močovinovými jednotkami

09:30 [Bc. Lucie Wohlrábová](#) (M2, Mgr. Tomáš Slanina, Ph.D.)

Syntéza fotoodstupitelných chránících skupin na bázi fluorescenčních barviv BODIPY

09:45 [Bc. Petra Míková](#) (M1, Ing. Eva Svobodová, Ph.D.)

Deazaflaviny s extendovaným aromatickým systémem

10:00 [Bc. Nikola Broftová](#) (M1, prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.)

Chemie oxidovaných derivátů thiacalixarenu s přesmyknutým základním skeletem

10:15 [Bc. Thi Phuong Le](#) (M1, Mgr. Jiří Kaleta, Ph.D.)

Syntéza halogenových derivátů bicyklo[1.1.1]pentanů

10:45 [Bc. Denisa Kubešová](#) (M2, prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.)

Příprava sloučenin s 2,3,3-trifluorprop-1-en-1,3-diylovou spojkou

11:00 [Bc. Kateřina Babková](#) (M2, Ing. Martin Krupička, Ph.D.)

Katenan jako chromofor pro mechanochemicky senzitivní polymery

11:15 [Bc. Anna Rejzková](#) (M1, doc. Ing. Michal Kohout, Ph.D.)

Syntéza magnetických kapalných krystalů

11:30 [Bc. Tereza Edlová](#) (M2, doc. Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D.)

Využití vinyl-fosfátů pro přípravu funkcionalizovaných molekul

11:45 [Bc. Markéta Šinalová](#) (M2, doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.)

Sulfoximiny na bázi thiacalix[4]arenu

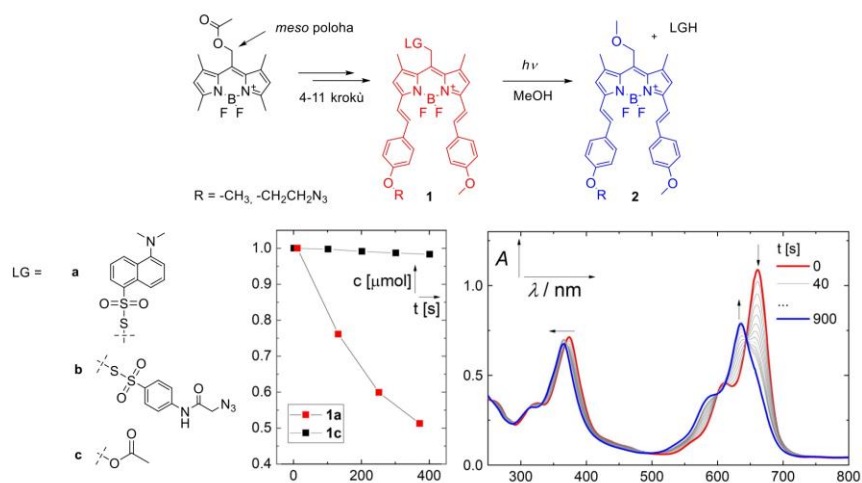
vyhlášení výsledků

Syntéza fotoodstupitelných chránících skupin na bázi fluorescenčních barviv BODIPY

Bc. Lucie Wohlrábová (M2)

Školitel: Mgr. Tomáš Slanina, Ph.D.

Fotoodstupitelné chránící skupiny mají širokou škálu využití, např. v biologii, organické syntéze a medicíně. Nejdůležitější vlastností pro aplikaci těchto molekul *in vivo* je absorpce v tzv. biologickém okně, které leží v rozmezí 650–1350 nm, kde nedochází k poškození buněk a je možné prosvítit tkáň do hloubky několika centimetrů. Fluorescenční barviva BODIPY se dají snadno derivatizovat ve smyslu posunu jejich absorpčního maxima do tohoto biologického okna. Zároveň je možné je použít jako fotoodstupitelné chránící skupiny instalací odstupující molekuly do tzv. *meso* polohy. Je známo, že kvalita odstupující molekuly v *meso* poloze dramaticky zvyšuje rychlost a efektivitu uvolnění, která je pro biologické nebo medicínské aplikace klíčová. Na tomto základě byl navržen derivát 1a používající thiosulfonát jako odstupující skupinu. Díky tomu bylo dosaženo dramatického zvýšení účinnosti odchránění (cca 100x) ve srovnání se známými molekulami absorbujícími v této oblasti (např. acetát 1c). Vyvinuté molekuly se tak řadí mezi nejreaktivnější fotoaktivovatelné molekuly absorbující v oblasti nad 650 nm.

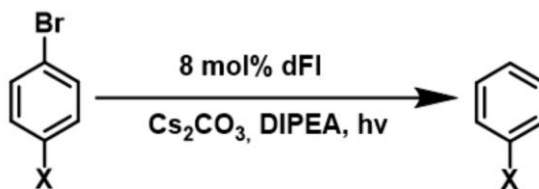
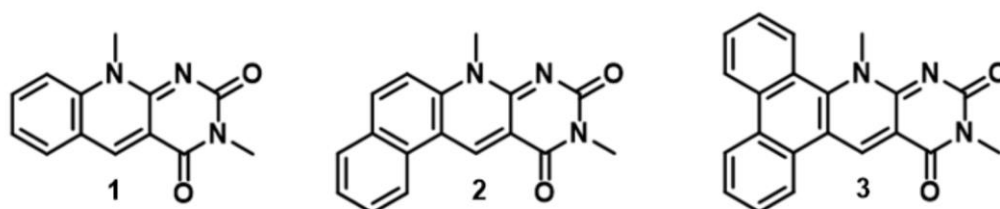


Deazaflaviny s extendovaným aromatickým systémem

Bc. Petra Míková (M1)

Školitel: Ing. Eva Svobodová, Ph.D.

Deazaflaviny stejně jako flaviny dokážou absorbovat viditelné světlo, čehož lze využít při fotokatalýze redoxních reakcí. Flaviny se zatím ve fotokatalýze využívaly výhradně k oxidacím, avšak v přírodě se podílí i na fotoredukčních procesech. Pro využití ve fotoredukčních reakcích jsou namísto flavinů, díky svému negativnějšímu redukčnímu potenciálu, vhodnější deazaflaviny. Redukční potenciál deazaflavinů v excitovaném stavu je zápornější než potenciál sodíku, a proto lze využít i pro redukce obtížně redukovatelných látek, jako je například *p*-chlor- a *p*-bromanisol. Nevýhodou jednoduchého 5-deazaisoalloxazinu **1** je skutečnost, že absorbuje na hranici viditelného spektra, a proto není vhodný při aplikaci běžných zdrojů světla. Řešením by mohla být modifikace struktury 5-deazaisoalloxazinu, například rozšířením konjugovaného systému. Ve své práci jsem se zaměřila na přípravu deazaflavinů **2** a **3** s extendovaným aromatickým systémem vycházejících z derivátů naftalenu a fenanthrenu a jejich využití ve fotodehalogenačních reakcích.

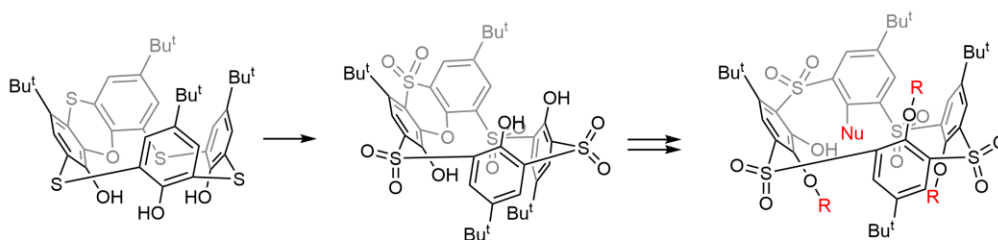


Chemie oxidovaných derivátů thiocalixarenu s přesmyknutým základním skeletem

Bc. Nikola Broftová (M1)

Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Oxidace fenoxathiinového makrocyklu představuje jedinečnou cestu k přípravě inherentně chirálních derivátů sulfonylcalixarenu. V rámci tohoto projektu byly nejprve optimalizovány podmínky oxidace sirných můstků fenoxathiinového makrocyklu, s cílem maximalizovat výtěžek plně oxidovaného tetra(sulfonylového)derivátu. Při optimalizaci oxidační reakce byl zaznamenán a dále studován vliv fotochemických podmínek na její průběh. Vhodnou úpravou podmínek reakce se povedlo připravit unikátní makrocyklus obsahující kombinaci neoxidovaného sirného můstku a plně oxidovaných sulfonylových můstků. V další fázi projektu byly zkoumány alkylované deriváty oxidovaného fenoxathiinového makrocyklu, vhodné pro následnou S_NAr reakci s N -nukleofily, při které dochází k otevření fenoxathiinového motivu za vzniku nového makrocyklu. Při modelové S_NAr reakci s piperidinem se jako jediný vhodný ukázal derivát alkylovaný karboxymethyly. Výsledný produkt představuje zcela novou strukturu, která poslouží jako základ pro přípravu receptorů chirálních aniontů.

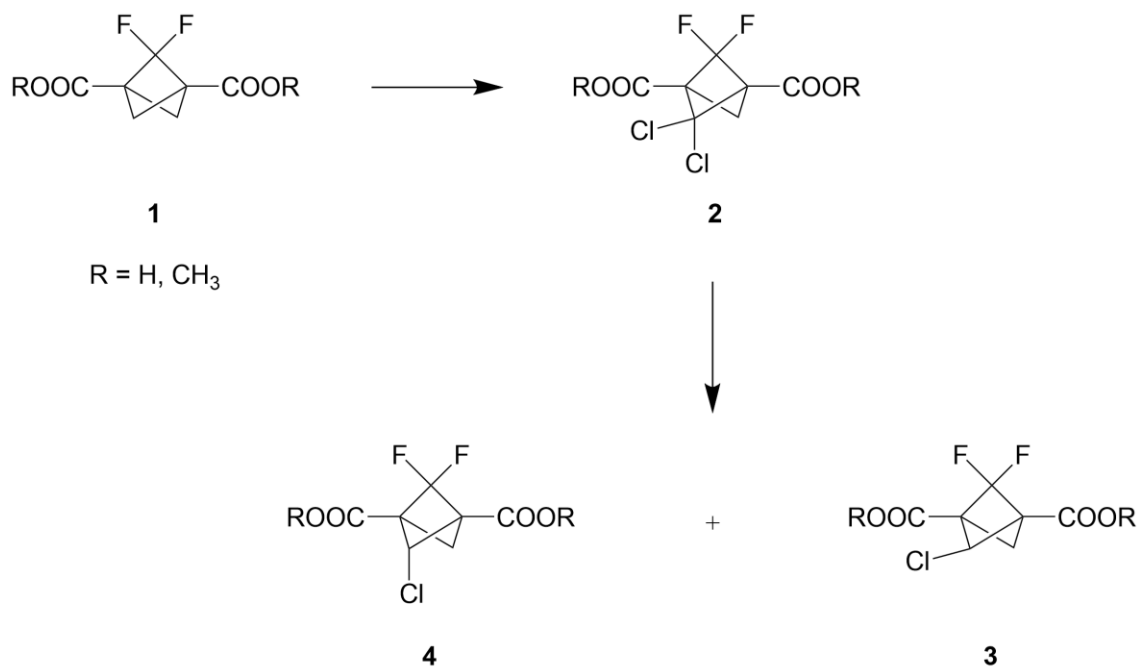


Syntéza halogenových derivátů bicyklo[1.1.1]pentanů

Bc. Thi Phuong Le (M1)

Školitel: Mgr. Jiří Kaleta, Ph.D.

1,3-Disubstituované deriváty bicyklo[1.1.1]pentanu (dále BCP) a hlavně pak jejich laterálně substituované analogy jsou žádané stavební jednotky v supramolekulární chemii a některé z nich se staly i součástí biologicky aktivních látek. V dnešní době je známo velké množství 1,3-substituovaných BCP, ovšem můstkově substituovaných BCP je výrazně méně. V této práci jsme se zaměřili na optimalizaci syntézy F_2 -BCP (**1**), která se následně stala výchozí látkou pro přípravu polyhalogenovaných klíček. Zajímavou strukturou je pak **2** nesoucí CH_2 , CF_2 a CCl_2 skupinu. Toto unikátní uspořádání by teoreticky umožňovalo sledování směru rotace takového rotátoru po zabudování do molekulárního stroje. Mechanismus chlorace i dechlorace byl důkladně prozkoumán jak experimentálně, tak teoreticky. U všech nově získaných dikarboxylových kyselin byly stanoveny hodnoty pK_a .

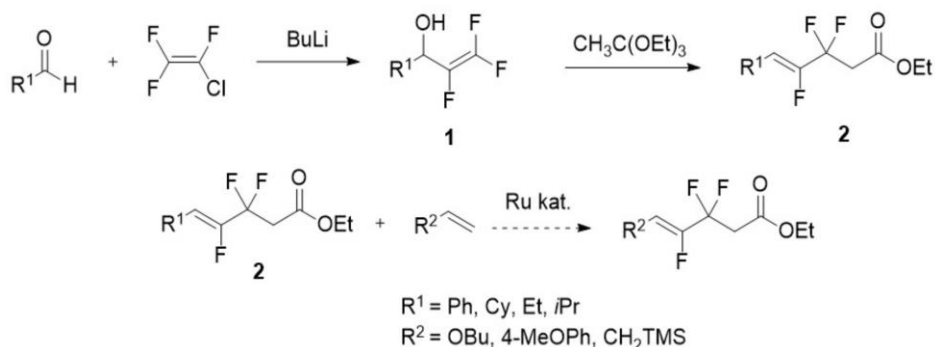


Příprava sloučenin s 2,3,3-trifluorprop-1-en-1,3-diylovou spojkou

Bc. Denisa Kubešová (M2)

Školitel: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Zkřížená metateze alkenů je metodou pro syntézu alkenů s výbornou tolerancí nejrozličnějších funkčních skupin. Ačkoliv metateze fluorovaných alkenů již byla částečně studována, zkřížená metateze alkenů obsahujících uskupení $-\text{CH}=\text{CFCF}_2-$ je dosud zcela neznámá, přičemž fragment $-\text{CH}=\text{CF}-$ je nehydrolyzovatelným analogem amidické vazby NHCO . To z něho dělá zajímavý stavební blok pro biologicky aktivní látky. Pro syntézu požadovaných látek jsem využila několik přístupů. Nejvhodnější z možností příprav tohoto motivu se zatím jeví být Claisenův přesmyk derivátů 2,3,3-trifluorprop-2-en-1-olu. V první fázi jsem proto reakcí příslušných aldehydů s trifluorvinylolithiem syntetizovala alkohol 1, který reakcí s triethyl-orthoacetátem a následným zahřátím poskytl cílový alken 2. Tento alken 2 ve většině případů vznikl ve směsi s nežádoucím eliminačním produktem, který se mi nepodařilo chromatograficky oddělit. Vzniku nežádoucího produktu lze zabránit provedením reakce za vyšší teploty v mikrovlnném reaktoru. Tím došlo také k výraznému zkrácení reakčního času. Alken 2 byl poté studován v pilotních experimentech zkřížené metateze.

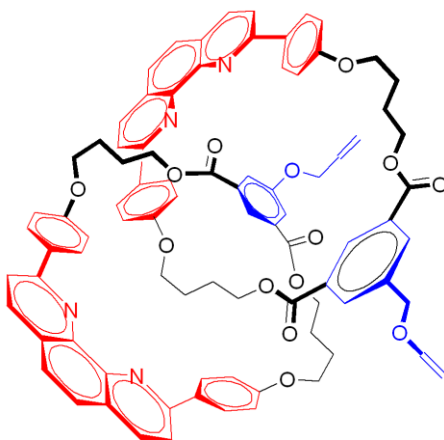


Katenan jako chromofor pro mechanochemicky senzitivní polymery

Bc. Kateřina Babková (M2)

Školitel: Ing. Martin Krupička, Ph.D.

Mechanochemie se zabývá účinkem mechanické síly na molekulu. Síla působí na mechanicky nejcitlivější fragment, tzv. mechanofor, který je zabudovaný do středu elastického polymerního řetězce. Jediným doposud známým působením síly v mechanochemii je tah, který ale obvykle vede k roztržení vazby. Na základě konceptů supramolekulární chemie¹ a molekulárních strojů² byla navržena nová struktura mechanoforů (Obrázek 1). Jedná se o modifikovanou molekulu katenanu, ke které lze snadno připojit polymerní řetězec metatezí na terminálních alkenylových skupinách. Při použití tahové síly na výsledný polymer by se jednotlivé makrocykly katenanu měly přiblížit k sobě natolik, aby došlo ke stlačení centrální aromatické jednotky (2,9-difenylfenantrolinu). Vzniklá deformace makrocyklu vede k částečnému narušení konjugace v aromatické funkční skupině, a je tedy pozorovatelná spektroskopicky metodami UV-Vis absorpce, či fluorescence. 1 Cram, D.J.; Lehn J.M.; Pedersen C.J. *Nobelova cena za chemii* 1987 2 Sauvage, J.P.; Stoddart, J. F.; Feringa, B.L. *Nobelova cena za chemii* 2016



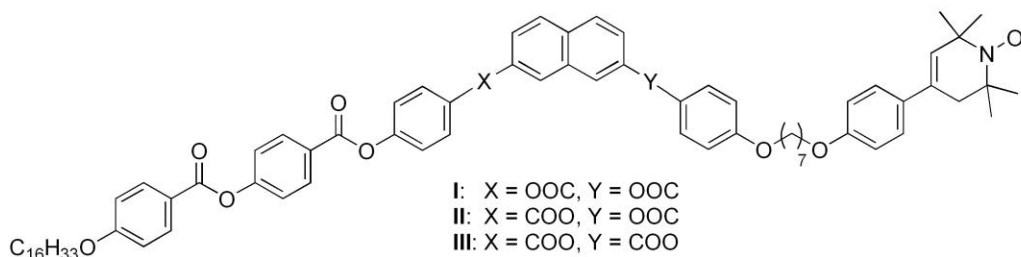
Obrázek 1: Katenan s dvojnou vazbou pro připojení polymeru.

Syntéza magnetických kapalných krystalů

Bc. Anna Rejzková (M1)

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

Od objevu kapalných krystalů (LCs), sloučenin vykazujících schopnost samoskladby s řadou supramolekulárních struktur (mezofází), uplynulo více než 130 let. Za tu dobu prošly LCs dramatickým vývojem od relativně jednoduchých látek k dnešním komplexním materiálům, jejichž molekulární strukturu, a tím supramolekulární organizaci lze řídit různými externími podněty (např. magnetické a elektrické pole). V naší skupině se zabýváme studiem lomených magnetických LCs s TEMPO radikálem, jenž dodává molekule magnetické vlastnosti. V různých mezofázích (rozumí se s různou organizací molekul) pak dochází ke změnám dipolární spin-spinové interakce mezi molekulami, které lze dále ovlivnit vnějším magnetickým polem. Cílem mé práce je připravit nové lomené materiály obsahující jednotku TEMPO v terminální části jednoho z postranních řetězců (Obr. 1). Cílové látky patří mezi kalamiticko-lomené dimery, u nichž lze předpokládat unikátní mezomorfní chování. Připravené sloučeniny byly charakterizovány NMR spektroskopií a jejich kapalně-krystalické chování bude studováno na Fyzikálním ústavu AV ČR diferenční skenovací kalorimetrií a polarizační mikroskopií.



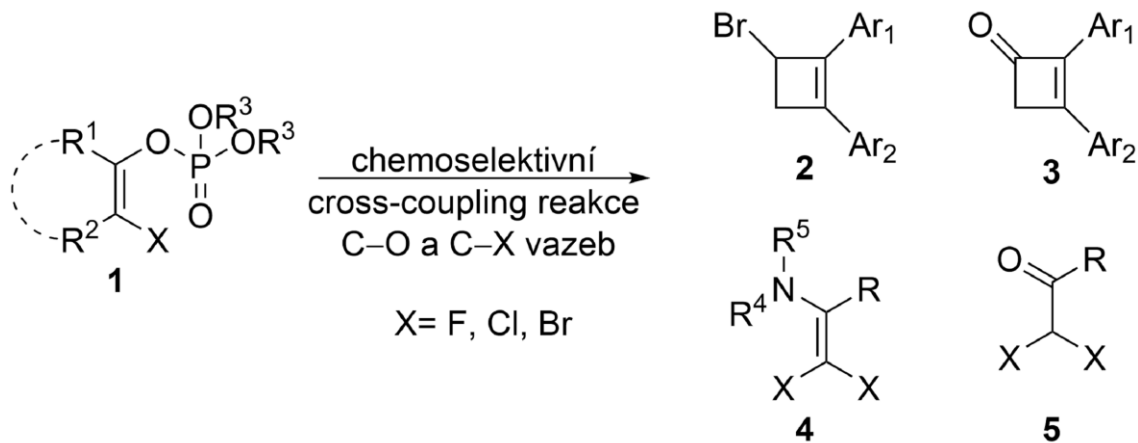
Obr. 1: Struktura cílových látek

Využití vinyl-fosfátů pro přípravu funkcionalizovaných molekul

Bc. Tereza Edlová (M2)

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

Enol-fosfáty patří mezi méně využívané odstupující skupiny pro palladium katalyzované cross coupling reakce. Jejich použití však poskytuje řadu výhod. V případě molekul 1 obsahujících více reakčních center umožňují především přednostní coupling halogenu s vynikající regioselektivitou¹. Ve své práci jsem využila znalosti reaktivity brom enol fosfátů (1), zkoumané v naší laboratoři², pro syntézu disubstituovaných cyklobutenů (3). Jejich přípravy jsem dosáhla přímou modifikací čtyřčlenného kruhu, přístupem, který v dosavadní literatuře zcela chybí. Dále jsem se zaměřila na studium reaktivity α -dichlor a difluor enol fosfátů (1, R²=Cl, F) připravených enolizací odpovídajících dichlor a difluor amidů. Překvapivě, výměna diethyl fosfátu probíhá přednostně a zcela selektivně i v případě dichlor derivátu. Vzniklý enamin (4) je pak možné snadno hydrolyzovat na dihalogen keton (5). Optimalizované podmínky pro Negishiho i Suzukiho cross coupling poskytly vysoké výtěžky. ¹ Kotek, V.; Dvořáková, H.; Tobrman, T., Modular and Highly Stereoselective Approach to All-Carbon Tetrasubstituted Alkenes. *Organic Letters* 2015, 17 (3), 608-611. ² Polák, P.; Tobrman, T., Novel Selective Approach to Terminally Substituted [n]Dendralenes. *European Journal of Organic Chemistry* 2019, 2019 (5), 957-968.

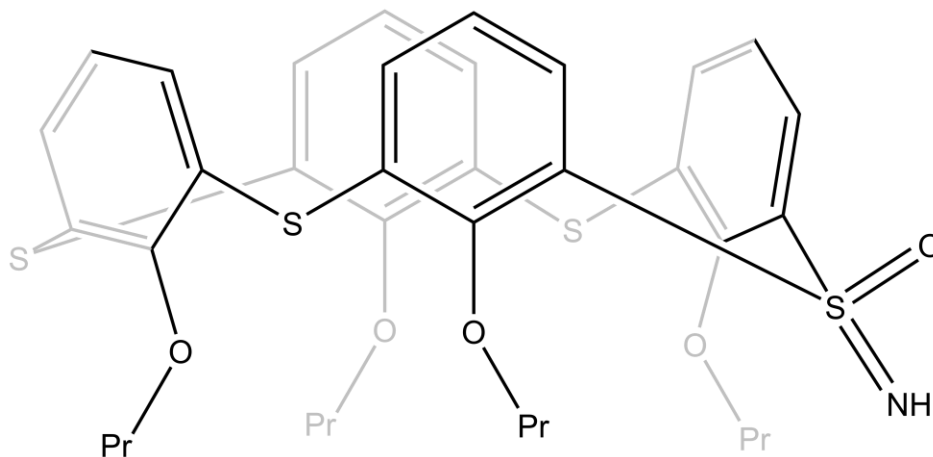


Sulfoximiny na bázi thiacalix[4]arenu

Bc. Markéta Šinalová (M2)

Školitel: doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.

Sulfoximiny jsou modifikované deriváty sulfonů obsahující šestimocný atom síry nesoucí jeden kyslík, jeden dusík a dva uhlíkové substituenty. V případě, že uhlíkové substituenty nejsou identické, je atom síry stereogenním centrem. Sulfoximiny jsou stabilní sloučeniny, které nabízejí bohaté a všestranné využití, především v medicíně. Cílem této práce je seznámit se syntézou sulfoximinů a využít je při přípravě sulfoximinoderivátů thiacalix[4]arenu – sloučenin, které dosud nebyly v literatuře popsány. Jako modelová látka byl připraven difenylsulfoxid, na kterém byly vyzkoušeny dva způsoby sulfoximinace. V obou případech byl požadovaný sulfoximin ve směsi identifikován, aplikace syntézy na thiacalix[4]aren-sulfoxid je nyní předmětem výzkumu.



Organická chemie magisterská IV

MÍSTO: ONLINE

KOMISE

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

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

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

Ing. Ondřej Kunderát, Ph.D.

Mgr. et Mgr. Pavla Perlíková, Ph.D.

PROGRAM

09:15 **zahájení**

09:15 [Bc. František Dolníček](#) (M2, Ing. Ondřej Kunderát, Ph.D.)

Calixareny a pillarareny s terminální $C\equiv C$ vazbou pro tvorbu konjugátů se sacharidy

09:30 [Bc. Marie Zvěřinová](#) (M1, Ing. Bc. Michal Himl, Ph.D.)

Příprava N-acetyl-S-(methylkarbamoyl)cysteinu, merkapturové kyseliny odvozené od N,N-dimethylformamidu

09:45 [Bc. Kristýna Nademlejnská](#) (M2, prof. Ing. Radek Cibulka, Ph.D.)

Syntéza porfyrin-flavinové dyády

10:00 [Bc. Žaneta Javorská](#) (M2, Ing. Václav Kozmík, CSc.)

Syntéza nových biologicky aktivních látek odvozených od katinonu

10:15 [Bc. Aleš Krčil](#) (M1, doc. Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D.)

Příprava fosfátů odvozených od sekundárních alkoholů

10:45 [Bc. Matěj Poupě](#) (M1, prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.)

Merkurace a následná derivatizace konformačně nestabilních calix[4]arenů

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

Syntéza triethoxysilanů na bázi derivátů chininu pro přípravu hybridních organokřemičitých materiálů

11:15 [Bc. Anežka Kuncová](#) (M1, Ing. Václav Kozmík, CSc.)

Syntéza magneticky aktivních derivátů Tryptofanu

11:30 [Bc. Lucie Svobodová](#) (M2, Ing. Radek Jurok, Ph.D.)

Syntéza thiazolových derivátů α -aminoketonu jako potenciálních inhibitorů KAT II

11:45 [Bc. Anna Kubičková](#) (M2, prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.)

Chemie 3,3-difluorcyklopropenů

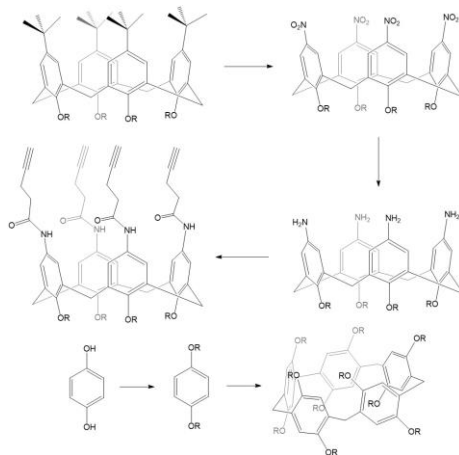
vyhlášení výsledků

Calixareny a pillarareny s terminální $C\equiv C$ vazbou pro tvorbu konjugátů se sacharidy

Bc. František Dolníček (M2)

Školitel: Ing. Ondřej Kunderát, Ph.D.

Calix[n]areny jsou cyklické oligomery složené z n fenolických jader spojené v *ortho*-polohách methylenovými můstky. Calixareny jsou látky využívané v supramolekulární chemii jako univerzální platformy pro syntézu molekulárních receptorů a multivalentních ligandů, které jsou schopné ovlivnit specifické biologické funkce. Pro tento projekt se připravovaly deriváty s terminální $C\equiv C$ vazbou, která je na horním okraji připojena pomocí amidové vazby získané přes *ipso*-nitraci výchozí látky, následnou redukcí na amin a převedení na amid. Calixarenům příbuzné látky zvané pillarareny, objevené v roce 2008, jsou složeny z n hydrochinonových jader, které jsou oproti calixarenům spojeny methylenovými můstky v polohách 2 a 5. Derivát pillar[5]arenu byl syntetizován alkylací hydrochinonu a následnou kondenzací. Tyto supramolekulární látky s terminální $C\equiv C$ vazbou jsou využity pro vznik konjugátů s derivátem sacharidu Galectin-3 pomocí tzv. „click“ reakce. Makrocycla, využívané díky elektronově bohaté kavitě k host-guest komplexacím, by mohly být uplatněny jako nosiče pro sacharidy, které by mohly hrát důležitou roli v terapeutické léčbě rakoviny.

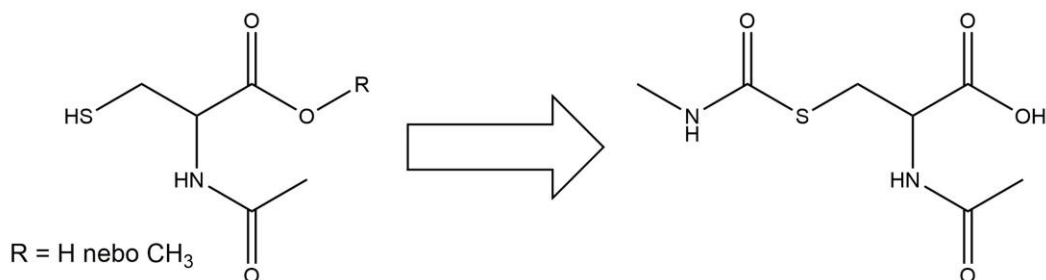


Příprava *N*-acetyl-*S*-(methylkarbamoyl)cysteinu, merkapturové kyseliny odvozené od *N,N*-dimethylformamidu

Bc. Marie Zvěřinová (M1)

Školitel: Ing. Bc. Michal Himl, Ph.D.

N-Acetyl-*S*-(methylkarbamoyl)cystein (AMCC) je lidský metabolit *N,N*-dimethylformamidu (DMF), který se v praxi využívá pro hodnocení expozice DMF. Cílem této práce bylo připravit AMCC dvěma různými syntetickými postupy a ty mezi sebou porovnat. První syntetický postup se skládá ze tří kroků, které zahrnují nejprve reakci *N*-acetylcystein methylesteru s 4-nitrofenylchlorformiátem v bazickém prostředí. Vzniklý methyl-*N*-acetyl-*S*-((4-nitrofenoxy)karbonyl)cysteinát je následně reakcí s methylaminem převeden na methyl-*N*-acetyl-*S*-(methylkarbamoyl)cysteinát, který je kyselé hydrolyzován na cílový AMCC. V druhé jedнокrokové metodě reaguje *N*-acetylcystein v bazickém prostředí s *N*-sukcinimidyl-*N'*-methylkarbamátem a přímo poskytuje AMCC. Připravený AMCC bude sloužit jako analytický standard pro analýzu expozice DMF a pro další toxikologický výzkum.

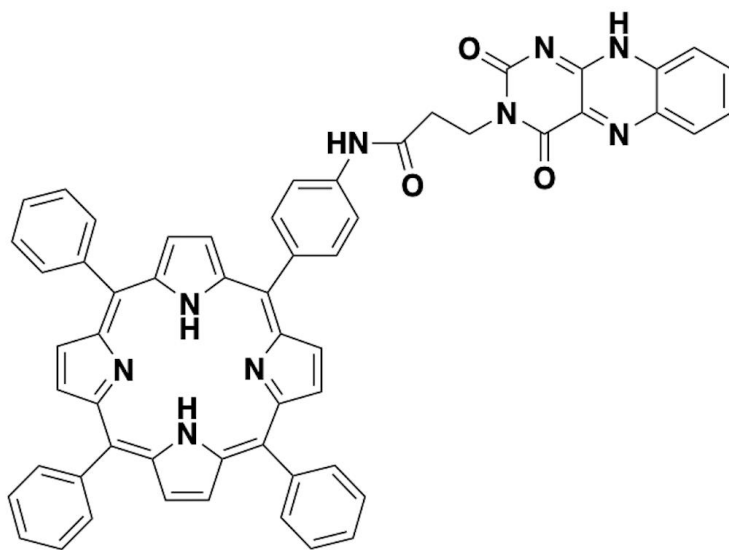


Syntéza porfyrin-flavinové dyády

Bc. Kristýna Nademlejnská (M2)

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

Fotosyntéza využívá fotoindukovaného přenosu elektronu (PET) mezi elektron-donory a elektron-akceptory. Vzhledem k důležitosti tohoto procesu, se syntetizují různé modely, které obsahují jak elektronově bohatou, tak elektronově chudou podjednotku, a to z molekul, které se v přírodě hojně vyskytují. Těmto modelům se říká dyády. V mém případě se jedná o syntézu porfyrin-flavinové dyády, kdy porfyrin hraje roli donoru a flavin akceptoru elektronu. Po dokončení syntézy této dyády se bude studovat přenos elektronu mezi porfyrinem a flavinem pomocí spektrálních a elektrochemických technik.

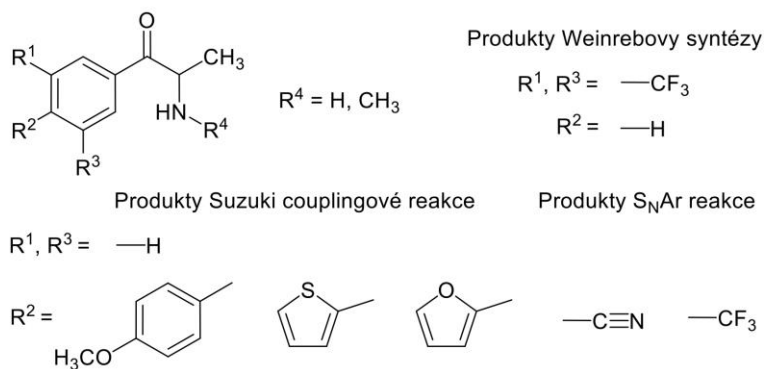


Syntéza nových biologicky aktivních látek odvozených od katinonu

Bc. Žaneta Javorská (M2)

Školitel: Ing. Václav Kozmík, CSc.

Syntetické katinony jsou látky odvozené od alkaloidu (*S*)-katinonu, hlavního psychostimulantu (účinek podobný amfetaminu) obsaženého v listech rostliny káta jedlá (*Catha edulis*). Deriváty katinonu patří mezi tzv. designer drugs, což je skupina nových psychoaktivních látek odvozených od již známých drog lišících se nepatrnou strukturální obměnou jejich farmakoforu. Tato změna struktury může vést ke změně mechanismu působení těchto látek, a tedy ke změně původního farmakologického účinku a jejich toxicity. Některé syntetické katinony jsou tak používány jako léčiva (např. bupropion). Má práce je zaměřena na obměnu farmakoforu katinonu zejména v poloze 3 (*meta*), 4 (*para*), a 5 na benzenovém jádře a v α -poloze k oxoskupině na alifatickém řetězci (Obrázek 1). Do *p*-polohy byly s využitím Suzukiho couplingu zavedeny aromatické a heteroaromatické skupiny (4-methoxyfenyl, thiofen-2-yl a furan-2-yl) nebo elektronakceptorní skupiny jako kyano nebo trifluormethyl pomocí substitučních reakcí katalyzovaných mědí. Deriváty s trifluormethyl skupinou v poloze 3 nebo 3 a 5 byly připraveny Weinrebovou syntézou. U všech derivátů byla do α -polohy zavedena aminoskupina nebo methylaminoskupina. Vybrané deriváty byly chirálně separovány pomocí HPLC s chirální stacionární fází.

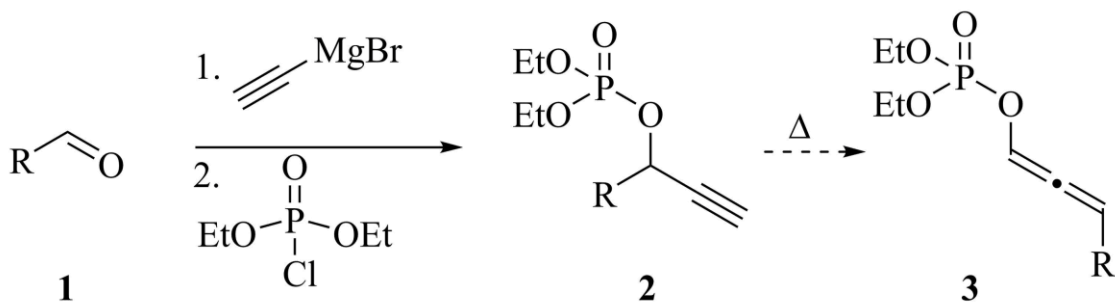


Příprava fosfátů odvozených od sekundárních alkoholů

Bc. Aleš Krčil (M1)

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

Sloučeniny, které ve své molekule obsahují dvě kumulované dvojně vazby se nazývají alleny. Allenová jednotka se nachází v celé řadě přírodních látek a alleny jsou také důležité intermediáty v organické syntéze. Proto se, v návaznosti na dlouhodobý vědecký zájem naší pracovní skupiny o chemii enol-fosfátů, věnuji přípravě allenyl-fosfátů (3) z propargyl-fosfátů (2). Pokusy o přípravu fosfátů (3) vycházely z odpovídajícího aldehydu (1), který byl reakcí s ethynylmagnesium bromidem převeden na alkoholát a vzniklý alkoholát by následně fosforylován reakcí s diethylchlorfosfátem. Vzniklý propargyl-fosfát (2) byl následně izolován a u připravených fosfátů (2) byla také zkoumána jejich termická stabilita s cílem získat allenyl-fosfáty (3).

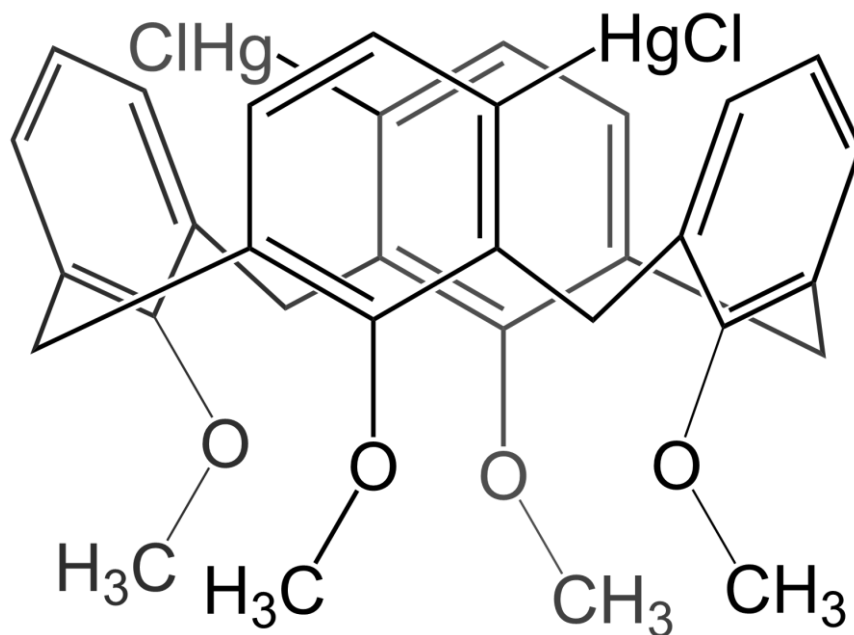


Merkurace a následná derivatizace konformačně nestabilních calix[4]arenů

Bc. Matěj Poupě (M1)

Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Cílem této práce bylo studium merkurace methoxysubstituovaných calix[4]arenů do prvního a druhého stupně, prověření možnosti jejich chromatografické separace a jejich následná derivatizace. Byla připravena řada nových látek, tetramethoxycalix[4]arenů substituovaných v *meta*-poloze. Všechny nově připravené merkurované calixareny i jejich deriváty vykazovaly konformační mobilitu.



Syntéza triethoxysilanů na bázi derivátů chininu pro přípravu hybridních organokřemičitých materiálů

Bc. Marika Novotná (M1)

Školitel: doc. Dr. Ing. Jana Hodačová

Projekt se věnuje přípravě organicko-anorganických křemičitých materiálů pro využití v heterogenní enantioselektivní katalýze. Cílem práce je syntéza dvou triethoxysilanových prekurzorů 1 a 2 na bázi derivátů chininu (schéma 1). Za výchozí látku syntézy obou prekurzorů byl zvolen chinin (3), ze kterého byl adicí Br_2 na dvojnou vazbu chininu a následnou didehydrohalogenací připraven 10,11-didehydrochinin (4). Z ftalanhydridu a hydrazinu byl syntetizován 2,3-dihydroftalazin-1,4-dion a ten byl pomocí POCl_3 převeden na 1,4-dichlorftalazin. Substitucí atomů chloru v 1,4-dichlorftalazinu za 10,11-didehydrochinin vznikl derivát 5. Triethoxysilanové skupiny byly na alkyne 4 resp. dialkyne 5 zavedeny pomocí mědi katalyzované alkyne-azid cykloadiční reakce s 3-(azidopropyl)triethoxysilanem. Triethoxysilanové prekurzory 1 a 2 budou v budoucnu využity k přípravě hybridních křemičitých materiálů, které by měly fungovat jako heterogenní katalyzátory enantioselektivních reakcí např. Sharplessovy asymetrické dihydroxylace.

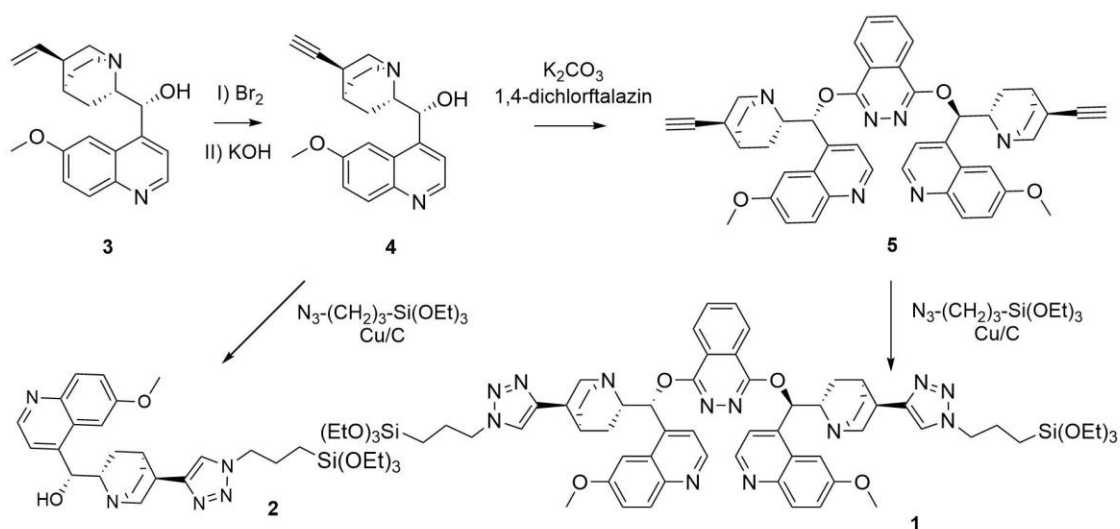


Schéma 1 - Syntéza chininových prekurzoru 1 a 2.

Syntéza magneticky aktivních derivátů Tryptofanu

Bc. Anežka Kuncová (M1)

Školitel: Ing. Václav Kozmík, CSc.

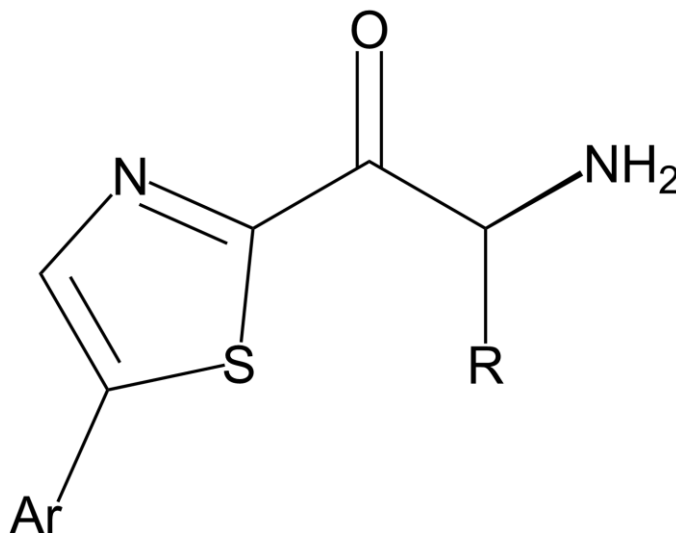
Cílem této práce je syntéza magneticky aktivních derivátů tryptofanu a 5-hydroxytryptofanu, kde jsou jako výchozí látky použity jejich racemické směsi. Magnetické vlastnosti finálních produktů jsou indukovány připojením radikálu TEMPO na jednu z funkčních skupin výchozích látek. Selektivní modifikací funkčních skupin tryptofanu byly připraveny deriváty bazické a kyselé povahy. Derivatizací hydroxylové skupiny 5-hydroxytryptofanu byl získán analyt zwitteriontové povahy. Všechny nově syntetizované látky byly charakterizovány spektroskopickými metodami a hmotnostní spektrometrií. Pro finální produkty byla vyvinuta metoda chirální separace na chirální stacionární fázi v HPLC. Připravené magneticky aktivní deriváty umožní studovat prostup derivatizovaných aminokyselin přes chirální kompozitní membránu v magnetickém poli. Předpokládáme, že prostup separovaných látek přes membránu bude aplikací magnetického pole urychlen při zachování enantioselektivity membrány vůči L-tryptofanu a jeho derivátům.

Syntéza thiazolových derivátů α -aminoketonu jako potenciálních inhibitorů KAT II

Bc. Lucie Svobodová (M2)

Školitel: Ing. Radek Jurok, Ph.D.

Kynurenin aminotransferasa II (KAT II) je jedním z klíčových enzymů katabolismu tryptofanu. Katalyzuje syntézu kynureninové kyseliny, jejíž vysoké hladiny v lidském mozku mohou mít vliv na patofyziologii psychiatrických onemocnění. Inhibitory KAT II mají tedy medicínský potenciál a to zejména v léčbě schizofrenie. Na základě testování látek navržených *in-silico* bylo zjištěno, že 2-alaninoyl-5-fenylthiazol vykazuje inhibiční aktivitu a může sloužit jako výchozí sloučenina pro SAR (structure-activity relationship) optimalizaci. Cílem práce je syntéza série derivátů α -aminoketonů pomocí modifikace alkylové a arylthiazolové části. Postup přípravy derivátů s variací alkylového zbytku byl založen na reakci aminokyselinových prekurzorů s 5-fenylthiazolem. Pro syntézu derivátů s variací arylové části byla zvolena arylace 2-alaninoylthiazolového intermediátu s využitím Suzukiho reakce. Připravené látky budou použity na testování inhibiční aktivity.

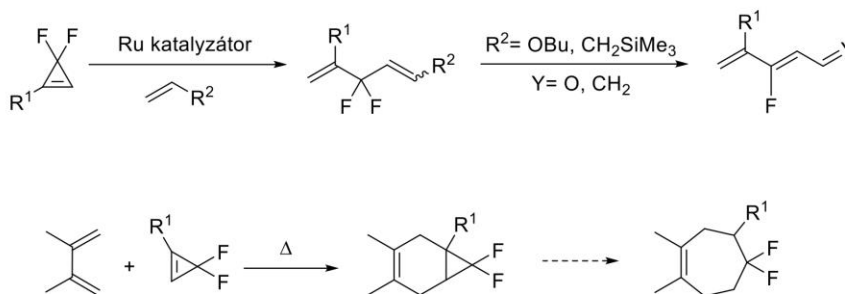


Chemie 3,3-difluorcyklopropenů

Bc. Anna Kubíčková (M2)

Školitel: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Fluorované sloučeniny hrají nezastupitelnou roli v medicíně. Přestože jsou stále hledány nové fluorované stavební bloky, chemie fluorcykloalkenů je stále poměrně málo prozkoumanou oblastí. Jednou takovou skupinou látek jsou například 3,3-difluorcyklopropeny. Ty jsou díky své vysoké reaktivitě odvíjející se od nízké stability a velkého úhlového pnutí, předurčeny být ideálními substráty pro různé transformace, které umožňují zavedení difluormethylenové skupiny do struktury molekuly. Jednou takovou transformací je například zkřížená metateze s otevřením cyklu (ROCM), pomocí které je možné připravit fluorované stavební bloky s nesymetrickým dienovým motivem spojeným difluormethylenovou spojkou. Ve své práci jsem studovala reaktivitu několika připravených 3,3-difluorcyklopropenů s různými alkeny v ROCM a syntetizovala tak knihovnu těchto dienů. U některých dienů byla pozorována nízká stabilita, kdy se v závislosti na substituci buď rozkládaly na dienyly nebo konjugované fluortrieny. V další části mé práce jsem testovala reaktivitu cyklopropenů jako dienofilů v Dielsově-Alderově reakci za vzniku 7,7-difluorbicykloheptenů. Tyto struktury mohou dále sloužit jako intermediáty v syntézách dalších difluormethylenovaných produktů jako jsou například difluorcyklohepteny.



Ústav organické technologie (111)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Iva Paterová, Ph.D.

SEZNAM SEKČÍ

1. [Organická technologie a výroba léčiv I](#)
2. [Organická technologie a výroba léčiv II](#)

Organická technologie a výroba léčiv I

MÍSTO: A01 - ONLINE

KOMISE

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

Ing. Iva Paterová, Ph.D.

Ing. Adam Karaba, Ph.D.

Ing. Martin Veselý, Ph.D.

Ing. Tomáš Sommer, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

[Bc. Jakub Bachmaier](#) (M1, Ing. Maria Kotova, Ph.D.)

Hydrogenace esterů kyseliny itakonové

[Bc. Michal Drahozal](#) (M1, prof. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.)

Nosičové systémy pro zlepšení disolučních vlastností meloxikamu

[Barbora Haláková](#) (B3, prof. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.)

Studium smáčivosti binárních systémů léčivo-nosič pro vývoj interaktivních formulací (se zlepšeným uvolňováním léčiva)

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

Příprava a charakterizace polymerních nanočástic pro dermální podání

[Bc. Michaela Martínková](#) (M1, Ing. Jan Patera, Ph.D.)

Studium vlivu porozity na rozpad a pevnost tablet

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

Vývoj a charakterizace lékové formulace na bázi lipidových kuliček.

[Bc. Tomáš Skácelík](#) (M1, prof. Ing. Libor Červený, DrSc.)

Optimalizace reakčních podmínek hydratace limonenu

[Bc. Michaela Vaňková](#) (M1, doc.Ing. Eliška Vyskočilová, Ph.D.)

Hydrogenace kyseliny levulinové na gama-valerolakton při použití katalyzátorů s nosiči na bázi hlinek

[Bc. Simona Vystavělová](#) (M1, prof. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.)

Zlepšování tokových vlastností mikrokrytalické celulózy nanášením nanočástic pomocí kapalného média

[Bc. Dominika Šindelářová](#) (M1, Ing. Kamila Syslová, Ph.D.)

Vývoj metody pro diagnostiku karcinomu pankreatu

vyhlášení výsledků

Hydrogenace esterů kyseliny itakonové

Bc. Jakub Bachmaier (M1)

Školitel: Ing. Maria Kotova, Ph.D.

Práce se zabývá transfer hydrogenací esterů kyseliny itakonové a hydrogenací těchto esterů v autoklávu. Byl sledován vliv různých zdrojů vodíku, rozpouštědel, délky alkoholové části esteru, teploty a tlaku na průběh hydrogenace. Pro hydrogenace v autoklávu byl použit katalyzátor Ru/C 605 a pro transfer hydrogenaci ve v-vialkách byl použit Noyoriho katalyzátor RuCl(p-cymen)[(S,S)-TsDPEN]. Nejvhodnější podmínky pro hydrogenaci v autoklávu byly: teplota 100 °C, tlak 5 MPa, rozpouštědlo methanol. Lepším zdrojem vodíku pro transfer hydrogenaci ve v-vialkách byla směs kyseliny mravenčí a triethylaminu (5:2). Délka alkoholové části esteru měla vliv na reakční rychlost, jak při transfer hydrogenaci ve v-vialkách, tak při hydrogenaci v autoklávu. Při transfer hydrogenaci měla vliv i na selektivitu k žádanému produktu. Práce ukázala možnosti provedení hydrogenace esterů kyseliny itakonové v autoklávu za různých reakčních podmínek a provedení transfer hydrogenace s použitím různých zdrojů vodíku.

Nosičové systémy pro zlepšení disolučních vlastností meloxikamu

Bc. Michal Drahozal (M1)

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

Vzhledem k vysoké lipofilitě, a tedy i špatné vodné rozpustnosti, se u řady léčivých látek objevují problémy s nízkou biodostupností. Tu lze vylepšit mimo jiné úpravou jejich disolučních vlastností spojených s kinetikou uvolňování léčiva, čímž se zabývá i tato práce. Modelovou látkou použitou v práci je meloxikam (MLX), u něž bylo cílem zlepšit jeho disoluční chování na základě maximalizace specifického povrchu jeho nanesením na povrch nosných částic. Jako nosiče byly v práci použité tři komerčně dostupné pomocné látky Avicel PH102, Neusilin US2 a Emcompress, na které byl nanášen roztok MLX v těkavém organickém rozpouštědle, po jehož odpaření na povrchu částic nosiče ulpěl krystalický MLX, což bylo ověřeno metodou RTG difrakce a SEM. Takto připravené formulace byly porovnány na základě jejich disolučního chování. Nejprve došlo k porovnání formulací obsahujících různý nosič, kdy bylo zjištěno, že nejlepších výsledků dosahují formulace obsahující Avicel. Následně se u tohoto materiálu zkoumalo ovlivnění disolučního profilu v závislosti na naneseném množství MLX. Zde se potvrdil předpokládaný trend pomalejšího uvolňování s rostoucím podílem MLX ve formulaci. Nakonec byla navržena léková forma, u níž se zkoumaly odlišnosti v disolučním chování oproti samotné práškové formulaci.

Studium smáčivosti binárních systémů léčivo-nosič pro vývoj interaktivních formulací (se zlepšeným uvolňováním léčiva)

Barbora Haláková (B3)

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

Charakteristika povrchu pevných látek je jedním z nejdůležitějších kritérií pro formulaci i funkci farmaceutických přípravků. Ovlivňuje jak interakce částic ve fázi výroby, tak i uvolňování léčiva. Schopnost charakterizace povrchu a porozumění vlivu získaných charakteristik na výrobu lékových kompozic nabízí možnost cíleného designu interaktivních směsí, které jsou výhodné z hlediska rychlosti uvolňování léčiva. Předchozí studie ukázaly, že u špatně rozpustné hydrofobní léčivé látky meloxikamu dochází při její formulaci do interaktivní směsi k výraznému zlepšení rychlosti uvolňování, tato rychlost však vykazuje komplexnější závislost na poměru léčiva vůči použitému nosiči. Cílem této práce je proto přispět k poznání tohoto systému měřením povrchové energie na kompozitních površích složených z nosiče a meloxikamu v různém poměru. S využitím měření kontaktního úhlu tak byla získána korelace mezi smáčivostí a složením povrchu. Na základě výsledků bylo zjištěno, že u systému meloxikam-laktosa je zlepšení smáčivosti meloxikamu dosahováno do jeho obsahu přibližně 30 hm. %, což může sloužit jako cíl formulačního vývoje. Vzhledem k tomu, že metoda je založena na měření fyzikálně-chemické vlastnosti, bude možné ji následně obecně využít pro látky se známými povrchovými charakteristikami.

Příprava a charakterizace polymerních nanočástic pro dermální podání

Bc. Aneta Krýčková (M1)

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

Vývoj nanočástic pro dermální aplikaci je oblastí s rostoucím zájmem. Polymerní nanočástice reprezentují nový typ nanonosičových systémů, jež jsou v současné době slibným prostředkem pro lepší dodávání léčiv přes kožní bariéru. Ve srovnání s jinými běžně užívanými systémy poskytují výhody jako zvýšení stability a rozpustnosti léčiv, snížení dávky a frekvence podávání díky postupnému uvolňování zapouzdřeného léčiva. Tato práce se zabývala přípravou a optimalizací složení nanočástic dvou typů kopolymerů kyseliny mléčné a glykolové (PLGA) s obsahem dvou různých léčiv. Jako modelové léčivo byl vybrán lipofilní indomethacin (IND) a hydrofilní kofein (KOF). Část práce byla zaměřena na přípravu nanočástic metodou nanoprecipitace, u které byl sledován vliv různého množství léčiva ve složení. Zároveň byla pozorována stabilita připravených systémů. Nedílnou součástí představovala charakterizace nanočástic z hlediska kvalitativních i kvantitativních vlastností. Z výsledků byla vyhodnocena účinnost enkapsulace, která udává obsah léčiva zapouzdřeného v polymeru. Nakonec bylo provedeno srovnání obou typů polymerů v závislosti na zvoleném léčivu.

Studium vlivu porozity na rozpad a pevnost tablet

Bc. Michaela Martínková (M1)

Školitel: Ing. Jan Patera, Ph.D.

V práci byl studován vliv lisovací síly na viskoelastické vlastnosti a porozitu připravených tablet. Dále se práce zabývá vztahem mezi porozitou a dobou potřebnou k rozpadu, resp. pevností tablet. Také bylo sledováno, jak se tyto vztahy mění vlivem přídavku 10 hm. % pomocné látky. Jako referenční látky byly použity paracetamol, ibuprofen, mikrokrytalická celulóza a laktóza. Látky byly voleny tak, aby měly opačné viskoelastické vlastnosti. Tablety byly připravovány na přístroji Gamlen, který umožňuje měřit viskoelastické parametry. Skeletální hustota byla měřena pomocí héliové pyknometrie a rtuťové porozimetrie. Vlastnosti tablet byly zkoušeny pomocí lékopisných zkoušek. Bylo zjištěno, že studované vlastnosti tablet jsou ovlivněny zejména lisovacími charakteristikami a viskoelastickými parametry. Pomocí měření na rtuťovém porozimetru lze dokázat, že k největším rozdílům dochází v oblasti vnitřních makropórů, tedy v mezičásticové porozitě. Při hodnocení pomocí zkoušek rozpadu bylo pozorováno, že paracetamolové tablety s přídavkem pomocné látky se rozpadají rychleji než samotné paracetamolové tablety. Současně bylo zjištěno, že složení tabletoviny výrazně ovlivní vztah mezi pevností tablet a jejich porozitou.

Vývoj a charakterizace lékové formulace na bázi lipidových kuliček.

Bc. Doreen Prittsová (M1)

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

Velké procento nově vyráběných účinných látek je špatně rozpustných ve vodném prostředí, což je příčinou nízké biologické dostupnosti. Klade se čím dál tím větší důraz na lipidové formulace, které biologickou dostupnost těchto lipofilních léčiv mohou zvýšit. Jednou z těchto formulací jsou i tekuté olejové kuličky, které jsou tvořeny olejovou kapkou obalenou hydrofilním práškem. Cílem tohoto výzkumu je zlepšení dosavadní formy tekutých olejových kuliček přidáním polymerů. Za účelem zlepšení vlastností se vybralo několik komponentů: olej sloužící jako rozpouštědlo, surfaktant, který snižuje povrchové napětí na rozhraní dvou fází a napomáhá tak k emulgaci formulace ve vodném prostředí GIT, ztužovadlo zvyšující mechanickou odolnost kuličky a hydrofilní prášek, sloužící jako obalový materiál. K vybrání vhodných komponentů byly provedeny mechanické testy, disoluční testy a testy absorpce prášku. Byl vytvořen prototyp formulace, která by potenciálně mohla být vhodná právě pro lipofilní léčiva.

Optimalizace reakčních podmínek hydratace limonenu

Bc. Tomáš Skácelík (M1)

Školitel: prof. Ing. Libor Červený, DrSc.

Tato práce byla zaměřena na hledání optimálních podmínek reakce limonenu s vodou v kyselém prostředí. Cílem této reakce bylo připravit vonnou látku α -terpineol. Studovanou reakcí byla jednokroková syntéza α -terpineolu. Přeměna limonenu probíhala ve vodném roztoku kyseliny za přítomnosti pevného katalyzátoru. Jako katalyzátor byly používány různé druhy zeolitu. Sledovanými parametry reakce byly teplota, koncentrace kyseliny, druh použité kyseliny a druh a množství použitého katalyzátoru. Dále bylo vyzkoušeno, zda a za jakých podmínek si katalyzátor zachová svou aktivitu při opakovaném použití. Na závěr byly identifikovány ty reakční podmínky, jejichž změna měla největší vliv na průběh reakce (teplota, koncentrace kyseliny, množství katalyzátoru). Z těchto parametrů byl vypracován statistický model, který umožnil sledovat vliv změny reakčních parametrů na výslednou konverzi a selektivitu vůči α -terpineolu. Na základě provedených experimentů byly identifikovány ideální reakční podmínky, kterými jsou teplota reakce 70 °C a reakce provedená s 5 g 50% kyseliny octové při použití katalyzátoru zeolit beta 25 v množství 0,5 g a 1 g limonenu. Nepodařilo se zjistit, o kolik a jakým způsobem se změní aktivita katalyzátoru při jeho opakovaném použití.

Hydrogenace kyseliny levulinové na gama-valerolakton při použití katalyzátorů s nosiči na bázi hlinek

Bc. Michaela Vaňková (M1)

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

Tato práce se zabývala přípravou rutheniových a niklových katalyzátorů s nosičem na bázi montmorillonitu a následné použití těchto katalyzátorů pro hydrogenaci kyseliny levulinové (LA) na γ -valerolakton (GVL). Byl testován vliv tlaku, teploty a použitého rozpouštědla na průběh této reakce. Vliv teploty byl testován za použití katalyzátorů 50 hm% Ni/MMT a 2,5 hm% Ru/MMT, jako rozpouštědlo byl použit toluen. Při použití niklového katalyzátoru bylo 100 % konverze LA dosaženo po 4 h reakce při 130 °C, 6 MPa. Při použití rutheniového katalyzátoru bylo dosaženo 96,6 % konverze LA po 4 h reakce při 120 °C a 6 MPa. Vliv tlaku byl testován za použití katalyzátorů 30 hm% Ni/MMT a 5 hm% Ru/MMT, rozpouštědlem byl opět toluen. Při použití niklového katalyzátoru bylo dosaženo nejvyšší konverze (83,9 %) LA při 6 MPa a 130 °C. Při použití rutheniového katalyzátoru bylo dosaženo 100% konverze LA již po 4 h reakce při 8 MPa a 120 °C. Nejvhodnějším rozpouštědlem pro zkoumanou reakci byl cyklohexan. Téměř 100 % konverze LA bylo dosaženo již po 1 h reakce (120 °C a 4 MPa). Katalyzátorem pro tuto reakci byl 5 hm% Ru/MMT. Z dosažených výsledků vyplývá, že testované katalyzátory jsou vhodné pro tuto reakci, a zároveň jsou srovnatelně účinné jako katalyzátory popsané v literatuře.

Zlepšování tokových vlastností mikrokrystalické celulózy nanášením nanočástic pomocí kapalného média

Bc. Simona Vystavělová (M1)

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

Mikrokrystalická celulóza je hojně využívaným farmaceutickým excipientem, dodávaným se střední velikostí částic 50 až 150 μm . Jedná se o poměrně kohezní materiál s vynikající lisovatelností v důsledku silných mezipovrchových interakcí, díky čemuž částice drží jak na sobě, tak na vnějších površích. To má však za následek problémy při zpracování v důsledku špatných sypných vlastností. Potažením prášku tokovým aditivem v podobě nanočástic, které způsobí rozestupy mezi hrubšími částicemi, lze mezičásticové interakce potlačit a sypné vlastnosti tak zlepšit. Cílem této práce bylo porovnat efektivitu navrženého postupu nanášení tokového aditiva na mikrokrystalickou celulózu v přítomnosti kapalného média s předchozími experimentálními výsledky klasického mísení za sucha. Dále byl sledován vliv použitého tokového aditiva (byl vybrán Neusilin® US2 a Aerosil® 200) a okolních podmínek. Pro měření tokových vlastností byl použit univerzální smykový přístroj práškový reometr FT4. Bylo zjištěno, že lepší efekt na sypné vlastnosti mikrokrystalické celulózy má při navrženém postupu zpracování Aerosil® 200. Porovnáním s výsledky předchozích studií se však ukázalo, že příprava směsí v přítomnosti kapalného média je oproti přípravě směsí prostým mísením výrazně méně efektivní.

Vývoj metody pro diagnostiku karcinomu pankreatu

Bc. Dominika Šindelářová (M1)

Školitel: Ing. Kamila Syslová, Ph.D.

Patologické pochody v organismu (zejména onemocnění) jsou doprovázeny změnou koncentrace, přítomností či absencí některých látek tzv. markerů v tělních tekutinách a tkání. Mezi onemocnění bez včasné diagnostiky a s vysokou mortalitou patří karcinom slinivky. Nalezení vhodného markeru, který by bylo možné detekovat ještě v bezpříznakovém stadiu daného onemocnění, by vedlo ke zvýšení úspěšnosti léčby a snížení úmrtnosti. Tato práce se zabývá vývojem vhodné, citlivé analytické metody na bázi vysokoúčinné kapalinové chromatografie spojené s hmotnostní spektrometrií pro multimarkerový profilování s následným multimarkerovým screeningem vzorků krevní plazmy pacientů s karcinomem slinivky a kontrolní skupiny. Vyvinutá metoda se skládá z přípravy vzorků, zahrnující denaturaci bílkovin a separaci látek ze vzorku, a samotné analýzy s využitím LC-MS. Pomocí vyvinuté metody byly v klinické studii vyhodnoceny koncentrace významných látek, zejména karboxylových kyselin - kyselina beta-hydroxymáselná a kyselina olejová, které by mohly sloužit jako markery při diagnostice karcinomu slinivky. Dále byly detekovány zvýšené koncentrační hladiny acetyl-L-karnitinu, kreatininu a kyseliny močové, které souvisí s rizikovými faktory rakoviny slinivky - špatná životospráva a diabetes mellitus 2. typu.

Organická technologie a výroba léčiv II

MÍSTO: A081A - ONLINE

KOMISE

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

Doc. Ing. Eliška Vyskočilová, Ph.D.

Ing. Maria Kotova, Ph.D.

Ing. Martin Zapletal, Ph.D.

Ing. Jiří Trejbal, Ph.D.

PROGRAM

09:00 **zahájení**

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

PLGA nanočástice obsahující kurkumin pro dermální podání

[Bc. Jindřich Dušek](#) (M2, Ing. Iva Paterová, Ph.D.)

Meerweinova-Ponndorfova-Verleyova redukce skořicového aldehydu

[Bc. Petra Havelková](#) (M2, prof. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.)

Efekt povrchové modifikace škrobových plniv pomocí polydimethylsiloxanu na proces plnění tvrdých želatinových tobolek

[Bc. Tuan Anh Le](#) (M2, Ing. Adam Karaba, Ph.D.)

Vývoj metodiky pro hodnocení plynových kondenzátů z pyrolýzy odpadních plastů

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

Optimalizace přípravy SLNs s modelovým složením stratum corneum a jejich další vývoj pro léčbu atopické dermatitidy

[Bc. Victoria Platon](#) (M1, prof. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.)

Studium kinetiky dezintegrace tablet s využitím optického mikroskopu

[Bc. Sára Pálková](#) (M1, Ing. Iva Paterová, Ph.D.)

Heterogenně katalyzovaná aldolová kondenzace skořicového aldehydu s propanalem

[Bc. Filip Čejka](#) (M2, Ing. Jiří Trejbal, Ph.D.)

Matematická simulace procesu recyklace gama-valerolaktonu pomocí kapalného oxidu uhličitého z výluhu po rozvlákňování

[Bc. Ondřej Švehla](#) (M2, prof. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.)

Homogenizace práškových směsí pro individuálně připravované léčivé přípravky

[Bc. Adéla Šimová](#) (M2, Ing. Eva Zapletalová, Ph.D.)

Kysele katalyzovaná izomerace karvonu pro přípravu thymochinonu

vyhlášení výsledků

PLGA nanočástice obsahující kurkumin pro dermální podání

Bc. Kateřina Drahošová (M2)

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

Kurkumin je účinná léčivá látka, která se nachází v kořeni zvané kurkuma a má silné antibakteriální, protizánětlivé a protivirové účinky. Díky svým protizánětlivým vlastnostem je užitečná při léčbě ran nebo kožních problémů, např. kontaktní dermatitidy či lupénky. Pro zvýšení jeho biologické dostupnosti by mohlo být výhodné kurkumin enkapsulovat do polymerních nanočástic a využít jej pro dermální podání. Cílem této práce je příprava polymerních nanočástic s kurkuminem metodou nanoprecipitace. Jako polymer pro přípravu polymerních nanočástic byla vybrána kyselina poly (D,L-mléčná-ko-glykolová) (PLGA), která byla v práci použita v poměru jednotlivých složek 50:50 a 75:25, přičemž oba typy polymerů byly porovnány. U nanočásticových formulací byla pomocí dynamického rozptylu světla zjišťována velikost částic, polydisperzita a zeta potenciál. Polymerní nanočástice obsahující kurkumin byly pozorovány pomocí TEM. Koncentrace kurkuminu obsaženého v polymerních nanočásticích byla zjišťována pomocí UV/VIS spektrofotometru a byl stanoven drug load společně s enkapsulační účinností. Podařilo se vyvinout přípravu nanočástic obsahující kurkumin se zjištěnými průměrnými hodnotami drug load $2,87 \pm 0,01$ % pro polymer PLGA 50:50 a $2,434 \pm 0,004$ % pro polymer PLGA 75:25, které byly stabilní 14 dní.

Meerweinova-Ponndorfova-Verleyova redukce skořicového aldehydu

Bc. Jindřich Dušek (M2)

Školitel: Ing. Iva Paterová, Ph.D.

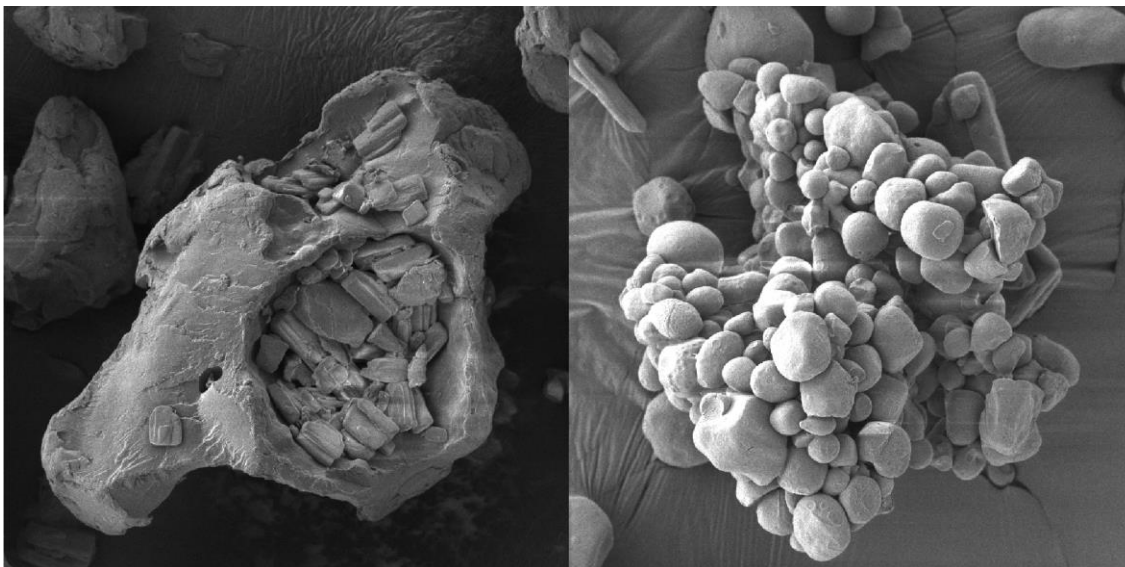
Skořicový alkohol je komerčně velmi žádaná vonná látka. Je používán jako aditivum v potravinářském, parfumérském a farmaceutickém průmyslu. Vyrábí se redukcí příslušného skořicového aldehydu. Jednou z cest jeho přípravy je selektivní hydrogenace s použitím kovových nosičových katalyzátorů na bázi např. Pt či Ru, druhou možností je Meerweinova-Ponndorfova-Verleyova redukce. Jedná se o vratnou selektivní redukci nenasycených karbonylových sloučenin, která probíhá v homogenní fázi za mírných teplotních podmínek v přítomnosti Lewisových kyselin jako katalyzátorů. V práci byla studována možnost použití katalyzátorů na bázi směsných oxidů a hydrotalcitů. Redukce byla prováděna v propan-2-olu jako donoru vodíku. Vyšších konverzí bylo dosahováno při použití směsných oxidů jako katalyzátorů.

Efekt povrchové modifikace škrobových plniv pomocí polydimethylsiloxanu na proces plnění tvrdých želatinových tobolek

Bc. Petra Havelková (M2)

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

Cílem práce bylo studium a optimalizace tříložkové směsi s vysokým obsahem škrobu, která je průmyslovým partnerem používána pro plnění tvrdých želatinových tobolek pomocí plnicího disku. Na základě provedených měření byla stanovena závislost sypných vlastností na formulační strategii (postupu přípravy) a použitém škrobu. Konkrétně byly v rámci studie použity dva nativní a dva předželované škroby, které se lišily svými fyzikálně-chemickými vlastnostmi. Při studiu sypných vlastností se nejprve stanovily hodnoty Carrova kompresibilitního indexu (CI), které byly rozšířeny o analýzu s využitím práškového reometru Freeman FT4. Vybrané směsi byly následně charakterizovány i pomocí skenovacího elektronového mikroskopu (SEM) s využitím detektoru sekundárně odražených elektronů (SE). Z výsledků bylo zjištěno, že na sypné vlastnosti finální směsi má dopad především charakter částic škrobu. Ten se odrázel nejen v počátečním chování směsi, ale také v následném efektu aplikace zvolených postupů modifikace přípravy. Ukázalo se, že modifikace způsobu přípravy mají na tokové vlastnosti výraznější vliv pouze v případě nativních škrobů.



Vývoj metodiky pro hodnocení plynových kondenzátů z pyrolýzy odpadních plastů

Bc. Tuan Anh Le (M2)

Školitel: Ing. Adam Karaba, Ph.D.

Plasty jsou již mnoho let středem pozornosti nejrůznějších environmentálních debat. Jeden z možných způsobů vypořádání se s plastovými odpady je jejich pyrolýza. Z primární pyrolýzy plastů je získáváno několik zajímavých frakcí. Tato práce pojednává o možném způsobu zpracování kondenzátů. Při prvních pokusech o analýzu na pyrolýzním plynovém chromatografu docházelo k deaktivaci chromatografických kolon. Práce se zaměřuje na úpravu vzorku, který by složky škodlivé pro chromatograf odstranil. Cílem bylo vyvinout takovou metodu úpravy vzorku, která by škodlivé látky byla schopna eliminovat, ale zároveň byl zachován chemický charakter vzorků z pohledu jeho chování při následné pyrolýze. Jako první možnost byla testována atmosférická a vakuová destilace s cílem eliminace velmi těžkých podílů. Pyrolýzní chování upravených vzorků bylo pak porovnáno s chováním původních vzorků.

Optimalizace přípravy SLNs s modelovým složením stratum corneum a jejich další vývoj pro léčbu atopické dermatitidy

Bc. Milada Peřinová (M2)

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

Narušení lipidové matrix nejsvrchnější části kůže *stratum corneum* (SC) souvisí se sníženou hladinou ceramidů a má za následek řadu kožních onemocnění. Použití samotných ceramidů při léčbě je omezeno nízkou propustností SC. Ve snaze obnovit bariérovou funkci SC byly v minulosti připraveny lipidové nanočástice (tzv. liposomy) s obsahem ceramidů. Pro další výzkum a srovnání efektivity s ceramidovými liposomy byla cílem této práce optimalizace přípravy pevných lipidových nanočástic (SLNs – *solid lipid nanoparticles*) se stejným složením prezentující lipidické složení SC. K přípravě SLNs byla použita metoda vysokosmykové homogenizace (HSH – *high shear homogenization*). Byly navrženy dva základní postupy pro přípravu lipidické směsi pro HSH, a to přímá a nepřímá metoda. Pro zjištění vlivu emulgátoru byly testovány emulgátory Tween®80, Tween®20, Kolliphor® a Phospholipon®. Jako další způsob přípravy SLNs bylo testována metoda kontinuálního přidávání rozpuštěných lipidů za pomoci lineární pumpy s následnou HSH. Bylo zařazeno testování vlivu pH a typu organického rozpouštědla. Všechny připravené SLNs byly analyzovány pomocí dynamického rozptylu světla. Tento typ nanočástic bude využit v permeačních experimentech pro obnovu bariérové funkce SC ve srovnání s dříve připravenou formulací.

Studium kinetiky dezintegrace tablet s využitím optického mikroskopu

Bc. Victoria Platon (M1)

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

Nejběžnější formou pro podávání účinných farmaceutických látek pacientovi jsou tablety. Účinnost tablety je značně ovlivňována dezintegračním chováním v tělních tekutinách. Výzkum procesu dezintegrace je však komplikován jeho složitostí a nepřítomností kvantitativních měřících technik. Cílem mé práce byla optimalizace experimentální techniky pro analýzu dezintegrace tablet za pomoci optického mikroskopu a zkoumání dezintegračního procesu z hlediska kinetiky. Navrhovaná metoda byla otestována při sledování dezintegrace dvou odlišných formulací ibuprofenu v různých médiích. Optická mikroskopie v kombinaci s obrazovou analýzou pořízených snímků se ukázala jako vhodná technika pro monitorování změny distribuce velikosti částic uvolněných z tablety v závislosti na čase. Pro kvantitativní popis procesu byly navrženy tři matematické modely na základě populační bilance a byla vypracována parametrická studie s využitím regresní analýzy. Získaná data byla využita k porovnání dezintegračního chování obou zkoumaných formulací. Tímto způsobem lze získat rychlost omezující kroky dezintegračního procesu a optimalizovat tak rychlost rozpouštění lékových forem. Popsaná technika se navíc může stát užitečným nástrojem generických farmaceutických společností.

Heterogenně katalyzovaná aldolová kondenzace skořicového aldehydu s propanalem

Bc. Sára Pálková (M1)

Školitel: Ing. Iva Paterová, Ph.D.

Aldolovou kondenzací skořicového aldehydu s propanalem vzniká 2-methyl-5-fenylpenta-2,4-dienal, ze kterého lze dále hydrogenací připravit Rosaphen. Rosaphen nachází uplatnění zejména v parfumářském průmyslu díky své květinové vůni. Aldolová kondenzace bývá katalyzována homogenními bázemi, nejčastěji hydroxidy. Tato práce však byla zaměřena na studium možnosti využití heterogenních bazických katalyzátorů, jakými jsou hydrotalcity a směsné oxidy. Cílem práce bylo nalézt vhodný katalyzátor a reakční podmínky k dosažení vysoké konverze a selektivity k žádanému produktu. Byl studován vliv teploty, rozpouštědla, molárního poměru výchozích látek, množství a složení katalyzátoru na průběh reakce, tedy na konverzi a na selektivitu k žádanému produktu. Po 5 h reakce vedené při teplotě 35°C, v methanolu jako rozpouštědle, molárním poměru výchozích látek 1:1 bylo dosaženo 78% konverze a selektivity 85 % na žádaný 2-methyl-5-fenylpenta-2,4-dienal. Reakce byla katalyzována rehydratovaným hydrotalcitem s molárním poměrem Mg:Al rovným 3:1 v množství 20 hm.% vůči skořicovému aldehydu.

Matematická simulace procesu recyklace gama-valerolaktonu pomocí kapalného oxidu uhličitého z výluhu po rozvlákňování

Bc. Filip Čejka (M2)

Školitel: Ing. Jiří Trejbal, Ph.D.

Gama-valerolakton je látka, dobře mísitelná s vodou. Jeho 70% roztok vykazuje velmi dobré vlastnosti pro šetrné rozpuštění ligninu, který je obsažený ve dřevě. Tímto procesem, tak získáme velmi velmi kvalitní celulózová vlákna, která po další úpravě mohou být použita k například k výrobě textilu. Vzniklý roztok ligninu, vody a GVL se dále ředí vodou, kvůli precipitaci ligninu. Po odstranění ligninu tak vzniká 10% roztok GVL ve vodě, ze kterého je nutné, kvůli jeho velmi vysoké ceně, ideálně alespoň 99% GVL recyklovat. Recyklace je uskutečňována pomocí kapalného CO₂ a probíhá při tlaku 70 bar a pokojové teplotě. Má práce se skládala ze dvou částí. V první části jsem se zaměřil na hledáním optimálního prostředí v simulačním programu aspen. Druhá část pak byla věnována samotné simulaci extraktoru a následného dělení vzniklého extraktu, včetně zpětné rekompresce CO₂, pomocí vícestupňového kompresoru.

Homogenizace práškových směsí pro individuálně připravované léčivé přípravky

Bc. Ondřej Švehla (M2)

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

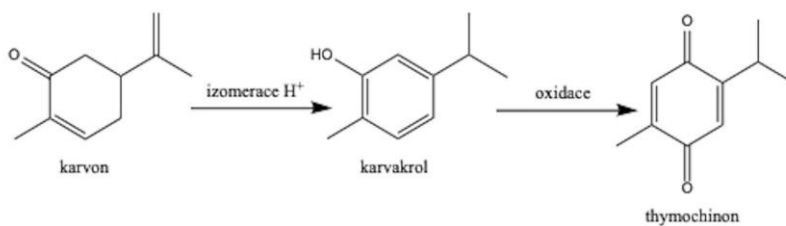
Individuálně připravované léčivé přípravky mají nepostradatelnou roli na poli klinické farmacie. Proto je důležité, aby jejich příprava byla rychlá, jednoduchá a hlavně konzistentní. Cílem práce bylo navržení procesu přípravy tvrdých želatinových tobolek, které jsou plněny práškovou směsí s aktivní léčivou látkou kodein. Bylo důležité, aby příprava byla co nejrychlejší, nenáročná, a aby bylo možné celý proces upravit v reakci na změnu šarže nebo dodavatele vstupních surovin. Parametr, který v těchto typech tobolek hraje největší roli, je homogenita práškové směsi, která je do tobolek plněna, a hmotnostní stejnoměrnost tobolek. Jelikož všechny tobolky se plní na stejné plniče a jsou po každém plnění kontrolovány, je možné parametr hmotnostní stejnoměrnosti považovat za konstantní, a určujícím parametrem je homogenita práškové směsi. Hlavním problémem byla změna dodavatele fosforečnanu vápenatého. Při přípravě tobolek dosavadním způsobem, pak prášková směs připravovaná z fosforečnanu od nového výrobce nesplňovala podmínky homogenity a bylo nutné navrhnout spolehlivější metodu míchání. K tomuto účelu byla navržena metoda homogenizace na 3D mísiči Turbula, která nahradila dosavadní metodu ruční homogenizace pomocí třecí misky a tloučku.

Kysele katalyzovaná izomerace karvonu pro přípravu thymochinonu

Bc. Adéla Šímová (M2)

Školitel: Ing. Eva Zapletalová, Ph.D.

Kmín černý je široce využívaná rostlina v tradiční medicíně. Má příznivý vliv na gastrointestinální problémy, reprodukční, plicní a imunitní systém a také se uplatňuje při léčbě cukrovky. Snižuje hladinu glukózy a zvyšuje hladinu inzulínu v krvi. Terapeutické vlastnosti rostliny jsou způsobeny přítomností thymochinonu, který je hlavní aktivní chemickou složkou esenciálního oleje. Díky velkému množství terapeutických vlastností se jeví syntéza thymochinonu v laboratoři jako velice zajímavá. Vhodnou výchozí látkou pro tuto syntézu je karvon. Prvním krokem přípravy thymochinonu je heterogenně katalyzovaná izomerace karvonu na karvakrol. Dalším krokem přípravy je oxidace karvakrolu na thymochinon. Jako katalyzátor pro izomeraci karvonu, byl v rámci této práce testován kyselý aktivovaný montmorillonit. Při izomeraci karvonu na karvakrol byly sledovány tyto vlivy na reakci – aktivace montmorillonitu různými kyselinami, teplota, množství katalyzátoru a vliv použitého rozpouštědla. Bylo dosaženo 100% konverze karvonu a 84% selektivity tvorby žádaného karvakrolu po 24 hodinách reakce při použití katalyzátoru montmorillonitu aktivovaného kyselinou chlorovodíkovou. Dále bylo zjištěno, že oxidace karvakrolu na žádaný thymochinon probíhá za použití oxidačního katalyzátoru na bázi kobaltu.



Ústav polymerů (112)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Lucie Reinišová

SEZNAM SEKČÍ

1. [Chemie a technologie polymerů](#)

Chemie a technologie polymerů

MÍSTO: B123, MICROSOFT TEAMS

KOMISE

prof. Ing. Petr Sysel, CSc. (předseda)

Ing. Zdeněk Hrdlička, Ph.D.

Ing. Alena Kadeřábková, Ph.D.

Ing. Lucie Reinišová

PROGRAM

09:00 **zahájení**

09:15 [Petra Tichá](#) (B3, doc. Ing. Jan Merna, Ph.D.)

Příprava polymerů reagujících na vnější podněty pomocí RAFT polymerace

09:30 [Bc. Jonáš Uříčář](#) (M1, prof. Ing. Jiří Brožek, CSc.)

Modifikace elektrických vlastností SLA 3D výtisků

09:45 [Adéla Slavíková](#) (B3, Ing. Lenka Malinová, Ph.D.)

Využití větveného polyethylenu jako makroiniciátoru polymerace I: maleinizace v roztoku

10:00 [Bc. Vojtěch Musil](#) (M1, doc. Ing. Jan Merna, Ph.D.)

3D reaktivní tisk rázuvzdorného polystyrenu tvrzeného elastomery na bázi olefinů

10:30 [Veronika Šofrová](#) (M1, doc. Ing. Jan Merna, Ph.D.)

Stereospecifické polymerace olefinů pomocí chain-walking katalyzátorů: oxymoron nebo reálná cesta ke stereoblokovým kopolymerům olefinů?

10:45 [Michaela Šusterová](#) (M1, Mgr. Soňa Hermanová, Ph.D.)

Multifunkčné polymérne nosičové systémy

11:00 [Bc. Hana Rozsivalová](#) (M1, Ing. Lenka Malinová, Ph.D.)

Optimalizace přípravy biodegradovatelného kostního cementu

11:15 [Karolína Zoulová](#) (B3, doc. Ing. Jan Merna, Ph.D.)

Amfifilní roubované kopolymery s polyethylenovým jádrem kombinací chain walking polymerace a ATRP

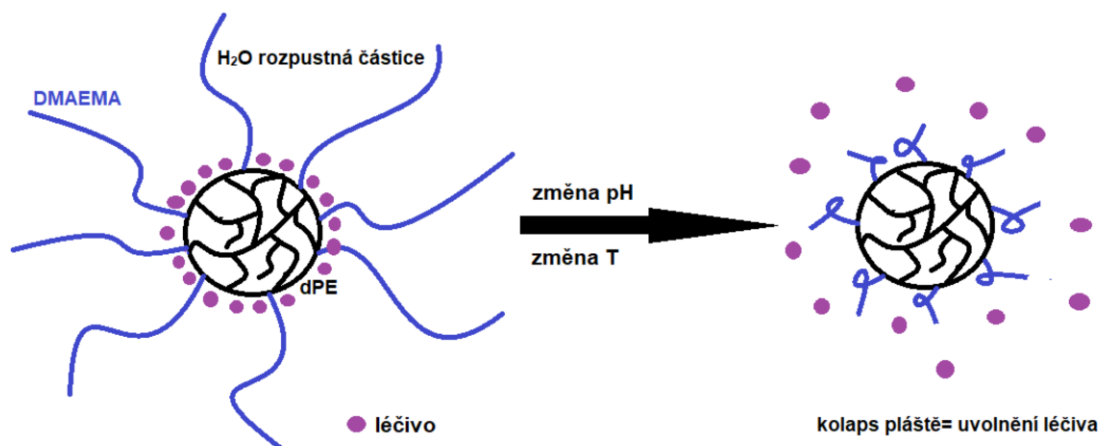
vyhlášení výsledků

Příprava polymerů reagujících na vnější podněty pomocí RAFT polymerace

Petra Tichá (B3)

Školitel: doc. Ing. Jan Merna, Ph.D.

Radikálová polymerace s adičně-fragmentačním přenosem (RAFT) je silný syntetický nástroj, který nám umožňuje připravovat polymery s řízenou molární hmotností a velmi úzkou distribucí molárních hmotností. Současně, na rozdíl od iontové či koordinační polymerace, je tato metoda velmi tolerantní k funkčním skupinám a lze ji tedy využívat pro širokou škálu monomerů. Z těchto důvodů se jedná o vhodnou metodu pro precizní přípravu polymerů či kopolymerů. Mezi takové polymerní speciality patří nosiče léčiv. V posledních letech bylo připraveno mnoho typů nosičů léčiv, lišící se mikro- i makrostrukturou, či způsobem uvolňování léčiva. Cílem této práce je příprava termo- a pH-responzivních amfifilních kopolymerů, schopných reagovat při specifických fyzikálně-chemických podmínkách, navržených pro cílené uvolňování léčiva. Takový nosič bude tvořen hydroxy-funkcionalizovaným dendritickým PE jádrem (dPE), připraveným *chain-walking* polymerací ethylenu s hydroxyethylakrylátem. Reakcí s benzylsulfanylthiokarbonylsulfanylpropionovou kyselinou (BSPA) pak bude tento produkt převeden na makro-RAFT činidlo, na které se následnou RAFT polymerací N,N-dimethylaminoethylmethakrylátem (DMAEMA) naroubují hydrofilní větve.



Modifikace elektrických vlastností SLA 3D výtisků

Bc. Jonáš Uřičář (M1)

Školitel: prof. Ing. Jiří Brožek, CSc.

Technologie 3D tisku nachází v posledních letech uplatnění v širokém spektru průmyslových aplikací, např. ve strojírenství, biotechnologii, medicíně či elektrotechnologii. Se vzrůstající poptávkou v těchto oblastech rostou i nároky na vlastnosti užívaných materiálů. Cílem této práce je proto modifikace elektrických vlastností výtisků připravených technologií stereolitografie (SLA). Modifikace bylo dosaženo přidavkem plniv do komerčního fotopolymerizovatelného fenolického epoxidového resinu; použitými plnivy byly nanočástice na bázi oxidu železnato-železitého, aktivní uhlí, grafit a uhlíkové nanotrubičky. Homogenita disperze byla pozorována pomocí mikroskopie. Přídavek každého z plniv zvýšil elektrickou vodivost vzorků až o dva řády. Vzorky s 3 hm% grafitu a s 3 hm% aktivního uhlí navíc vykazovaly výrazně vyšší hodnoty relativní permitivity oproti neplněnému resinu a zajímavý průběh její závislosti na frekvenci. Tato práce je prvním krokem k možnosti použití technologie SLA v pokročilých elektrotechnických aplikacích.

Využití větveného polyethylenu jako makroiniciátoru polymerace I: maleinizace v roztoku

Adéla Slavíková (B3)

Školitel: Ing. Lenka Malinová, Ph.D.

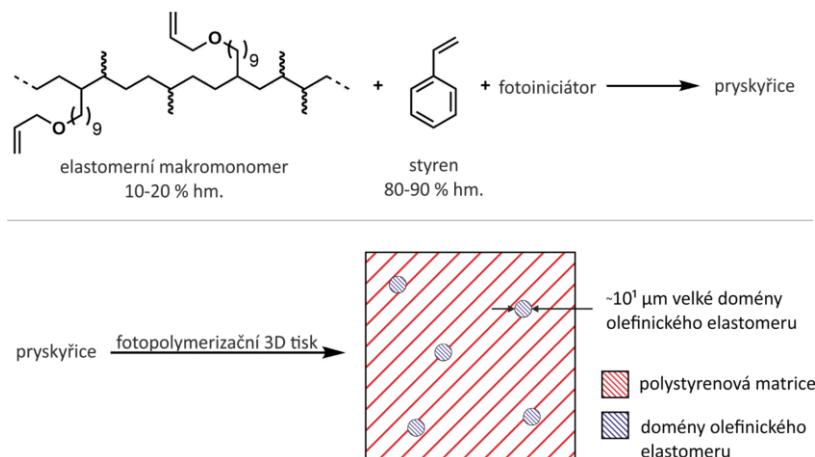
Polyolefiny jsou považovány za nejvíce využívané komerční polymery, jejich produkce sahá až k 60 % z celkové výroby polymerů. Polyolefiny se využívají na výrobu nám dobře známých věcí používaných v každodenním životě. Další použití polyolefinů limituje fakt, že jsou nepolární, což vede k jejich nízké povrchové energii, slabé přilnavosti a špatné kompatibilitě s polárními látkami. Pro rozšíření jejich aplikace se provádí například modifikace nepolárního řetězce naroubováním polárních funkčních skupin. Naroubované funkční skupiny lze dále využít k iniciaci polymerace jiných monomerů a k vytvoření kopolymerů těžko dosažitelných jinou metodou. Práce se zabývala maleinizací vysoce amorfního větveného polyethylenu (bPE) v roztoku, připraveného chain-walking polymerací ethylenu pomocí α -diiminových komplexů niklu. To je první fáze přípravy makroiniciátoru na bázi bPE. Maleinizace bPE byla prováděna při různých teplotách s různou koncentrací maleinanhydridu (MAH) a iniciátoru ve snaze potlačit vedlejší síťovací reakce a maximalizovat roubování MAH. Úspěšnost maleinizace byla sledována pomocí infračervené spektroskopie a nukleární magnetické rezonance.

3D reaktivní tisk rázuvzdorného polystyrenu tvrzeného elastomery na bázi olefinů

Bc. Vojtěch Musil (M1)

Školitel: doc. Ing. Jan Merna, Ph.D.

Velmi rozšířená metoda 3D tisku pomocí strunové FDM technologie je poznamenána principiálními nevýhodami, zejména špatnými mechanickými vlastnostmi výtisků způsobené anizotropními vlastnostmi vrstevnatého materiálu. Možným východiskem je fotopolymerační 3D tisk (technologie SLA), který je založen na vytvrzování světlocitlivé pryskyřice vycházející z klasických litografických technik. Pro řadu aplikací se svými dobrými mechanickými vlastnostmi osvědčil rázuvzdorný polystyren (HIPS), který svou houževnatostí výrazně předčí běžně používané materiály pro FDM 3D tisk. Cílem této práce je příprava alternativní pryskyřice pro SLA tisk materiálu s dvoufázovou strukturou blízkou HIPS. Toho bude dosaženo přípravou elastomeru na bázi větveného polyethylenu získaného kopolymerací ethylenu a ω -hydroxyolefinu pomocí CW katalyzátorů (způsobí větvení a vznik amorfni kaučukovité fáze). Po funkcionizaci vzniklého elastomeru allylovými skupinami povede následné sesíťování pomocí radikálové fotopolymerace v reaktivním rozpouštědle (např. styrenu) ke vzniku materiálu se strukturou podobnou HIPS. Prvním dílčím krokem k dosažení cíle je analýza dostupného procesu SLA tisku a porovnání s technologií FDM. Analýza běžně používaných pryskyřic poskytne důležité poznatky pro vývoj alternativních směsí.

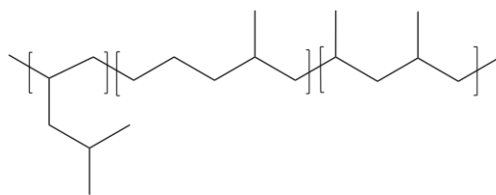


Stereospecifické polymerace olefinů pomocí chain-walking katalyzátorů: oxymoron nebo reálná cesta ke stereoblokovým kopolymerům olefinů?

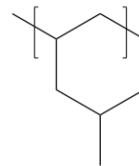
Veronika Šofrová (M1)

Školitel: doc. Ing. Jan Merna, Ph.D.

Isotaktický poly(4-methylpent-1-en) (P4MP1) je speciální průmyslově vyráběný, semikrystalický inženýrský plast s teplotou tání 250°C, který díky svým unikátním vlastnostem (čirost a tepelná stabilita) nachází uplatnění např. pro sterilizovatelné nádoby pro laboratorní a medicínské účely. Jestliže je struktura P4MP1 iregulární nebo nestereospecifická, má polymer podobně jako ataktický polypropylen elastomerní povahu. Pomocí katalyzátorů, které umožňují reakčními podmínkami nebo vnějšími podněty řídit regio/stereo-regularitu polymeru, lze tímto způsobem připravit stereoblokové kopolymery, tj. polymery obsahující bloky s pravidelným prostorovým uspořádáním. Cílem této práce je řízená syntéza P4MP1 pomocí chain-walking (CW) katalyzátorů, které změnou reakční teploty nebo koncentrace monomeru umožňují tvorbu amorfních (neuspořádaných, CW umožněn) nebo krystalizujících (uspořádaných, CW potlačen) polymerních segmentů. „Spínáním chain-walkingu“ je možné syntetizovat blokový kopolymer obsahující bloky izotaktického a regioiregulárního P4MP1. Takový kopolymer představuje unikátní materiál, který by mohl nalézt uplatnění jako termoplastický elastomer .



“regionálněhodný” P(4M1P)



izotaktický P(4M1P)



stereoblokový kopolymer

Multifunkčné polymérne nosičové systémy

Michaela Šusterová (M1)

Školiteľ: Mgr. Soňa Hermanová, Ph.D.

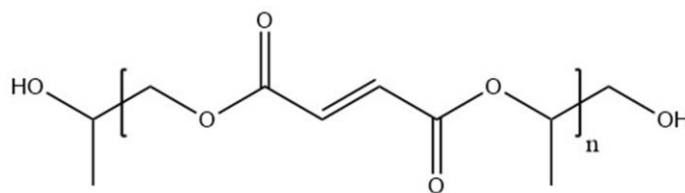
PCL, poly(kaprolaktón), je biokompatibilný a biodegradovateľný polymér, ktorý sa využíva k príprave nosičových častíc. Cieľom práce bolo pripraviť magneticky smerovateľné PCL-nosičové mikročastice pre transport biomolekúl. Na mikročastice, pripravené metódou W/O/W, boli úspešne naviazané oxidy železa a tento systém dosahoval veľkosti okolo 4 μm . Následne bol na polymérne mikročastice adsorpciou imobilizovaný enzým lipáza, ktorý katalyzuje hydrolýzu esterových väzieb. Časticový systém by v magnetickom poli zaistoval katalytickú hydrolýzu nízkomolekulárnych esterových substrátov a mohol by sa podieľať na odstraňovaní olejov zo znečistenej vody. Celý systém je navyše biodegradovateľný, lipáza spôsobuje aj povrchovú eróziu PCL a urýchľuje tak jeho degradáciu na netoxické produkty.

Optimalizace přípravy biodegradovatelného kostního cementu

Bc. Hana Rozsivalová (M1)

Školitel: Ing. Lenka Malinová, Ph.D.

Kostní cement se využívá při aplikacích kloubních náhrad a také jako výplň kostí s defektem. Ve druhém případě je pak cílem aplikace postupná náhrada výplně vlastní tkání. V současné době se v medicíně využívá kostní cement, který tuto schopnost postupné biodegradace nemá. Velmi slibným se pro přípravu biodegradovatelného kostního cementu jeví materiál poly(propylenfumarát) (PPF). PPF je nenasycený lineární polyester (viz schéma), který může být síťován in situ prostřednictvím svých fumarátových dvojných vazeb, je injektovatelný, biokompatibilní a biodegradovatelný. Degraduje jednoduchou hydrolýzou esterových vazeb na netoxické produkty – propylenglykol a kyselinu fumarovou. Cílem práce bylo optimalizovat přípravu a síťování PPF tak, aby bylo dosaženo ideálních mechanických vlastností materiálu pro jeho využití jako kostního cementu. Byl sledován vliv molární hmotnosti a koncentrace síťovacího činidla, koncentrace iniciačního systému a stáří vytvořené zásobní směsi na mechanické vlastnosti v tlaku připravených materiálů.

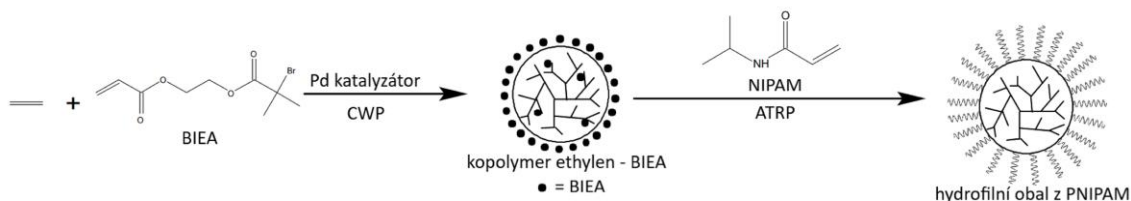


Amfifilní roubované kopolymery s polyethylenovým jádrem kombinací chain walking polymerace a ATRP

Karolína Zoulová (B3)

Školitel: doc. Ing. Jan Merna, Ph.D.

Responzivní polymery jsou řazeny mezi tzv. inteligentní materiály a poutají velkou pozornost vědců díky jejich velkému potenciálu v oblasti biomedicínských aplikací. Tyto materiály jsou schopny reagovat na fyzikální či chemické změny. V medicínských aplikacích se největší pozornosti dostalo polymerům reagujících zejména na změnu teploty či pH v lidském těle, umožňujících cílenou reakci ve specifických částech těla. Použití responzivních (v mém případě termoresponzivních) polymerních nanočástic lze využít k transportu léku a maximalizovat tak jeho terapeutický účinek, snížit počet nežádoucích účinků a prodloužit cirkulaci léčiva v těle. Cílem mé práce je příprava termoresponzivních polymerních nanočástic tvořených hydrofilním pláštěm roubovaným na dendritické polyethylenové jádro (dPE). dPE jádro bylo připraveno *chain-walking* kopolymerací (CWP). Jako vhodný monomer pro přípravu roubů jsem zvolila N- isopropylakrylamid (NIPAM), který tvoří biokompatibilní a netoxický polymer, jehož LCST je blízká teplotě lidského těla. Cílený roubovaný kopolymer bude možno využít pro přípravu termocitlivých biomateriálů sloužících jako aktuátory ethenu s BIEA a zároveň slouží jako makroiniciátor pro následnou ATRP radikálovou polymeraci pro zavedení hydrofilních roubů.



Ústav inženýrství pevných látek (126)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Alena Řezníčková, Ph.D.

SEZNAM SEKCI

1. [Materiálové inženýrství](#)

Materiálové inženýrství

MÍSTO: DISTANČNĚ

KOMISE

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

prof. Ing. Václav Švorčík, DrSc.

Ing. Alena Řezníčková, Ph.D.

Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.

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

PROGRAM

09:30 **zahájení**

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

Plazmon-aktivní, COF-funkcionalizované optické vlákno pro detekce CO₂ v organických rozpouštědlech.

09:45 [Bc. Sofiia Chufistova](#) (M1, Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.)

Nová metoda pro vytvoření amfifilního povrchu pomocí koloidní litografie

10:00 [Dávid Haluška](#) (M2, Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.)

Presná detekcia hormónov prostredníctvom kombinácie funkcionalizovaných povrchov SERS a konvolučnej neurónovej siete s nezávislými vstupmi.

10:15 [Bc. Martin Jindra](#) (M2, prof. Ing. Václav Švorčík, DrSc.)

Studium elektrických vlastností tenkých vrstev typu DLC

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

Syntéza a využití Fe:4N katalytických center ve 2D materiálech.

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

Vývoj biosenzoru pro rychlé rozpoznání specifických sekvencí DNA

vyhlášení výsledků

Plazmon-aktivní, COF-funkcionalizované optické vlákno pro detekce CO₂ v organických rozpouštědlech.

Bc. Polina Bainova (M2)

Školitel: Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.

Kovalentní organické kostry (Covalent organic frameworks (COF)) jsou rozvíjející se třídou krystalických sítí, které jsou kovalentně vytvářeny z organických složek. COF se vyznačuje takovými vlastnostmi, jako je nízká hustota, dobře definovaná velikost pórů, velký povrch, inherentní pórovitost a uspořádaná struktura kanálů. Mezi jinými aplikacemi lze sloučeniny COF použít k detekci CO₂. Je známo, že příprava sloučenin COF je obvykle spojena s náročnými experimentálními podmínkami (vysoký tlak, inertní atmosféra a vysoká teplota). V této práci byla navržena alternativní metoda přípravy COF na povrchu optického vlákna za normálního tlaku a teploty. Experimentální koncept implementuje podporovaný růst COF vlivem plazmonové rezonance. Vytvořené povrchově imobilizované struktury COF na povrchu optického sensoru byly následně použity pro detekci přítomnosti CO₂ v organických rozpouštědlech.

Nová metoda pro vytvoření amfifilního povrchu pomocí koloidní litografie

Bc. Sofiia Chufistova (M1)

Školitel: Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.

Koloidní litografie je moderní a účinný způsob vytvoření šablonové struktury na povrchu. V této práci byla koloidní litografie použita pro vytvoření amfifilního povrchu. Vyvinutá metoda je založená na žíhání monovrstvy uspořádaných polystyrenových mikrosfér a následném povrchovém roubování hydrofobních a hydrofilních diazoniových solí. Morfologie povrchu po roubování jednotlivých organických solí byla zkoumaná pomocí metody AFM. Úspěšnost elektrochemického roubování byla ověřena pomocí IČ spektroskopie. Na všech získaných hydrofilních, hydrofobních a amfifilních površích byly změřeny úhly smáčení. Získané amfifilní struktury byly dále použity pro stanovení náplně micely. Ze získaných výsledků lze usoudit, že námi vyvinutý amfifilní povrch je účinný pro stanovení léčiv inkorporovaných do struktury micely.

Presná detekcia hormónov prostredníctvom kombinácie funkcionalizovaných povrchov SERS a konvolučnej neurónovej siete s nezávislými vstupmi.

Dávid Haluška (M2)

Školiteľ: Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.

Kombináciou pokročilých prístupov povrchovej funkcionalizácie, chémie, povrchovo zosilnenej Ramanovej spektroskopie (SERS) a strojového učenia navrhujem pokročilú cestu na expresné a presné rozpoznanie špecifických hormónov prítomných vo vzorke odpadovej vody. Tento interdisciplinárny prístup využíva plazmonické spojenie medzi nanočasticami zlata a podkladovým periodickým plazmonickým povrchom s pripravenou mriežkou a dosahuje vysoký faktor zosilnenia SERS. Povrch zlatých viac rozvetvových nanočastíc (AuMs) bol funkcionalizovaný rôznymi chemickými skupinami, aby sa dosiahlo čiastočne selektívne zachytenie špecifických hormónov zo vzoriek odpadovej vody a generovanie informačne bohatých vstupov vo forme spektier pre metódy strojového učenia a rozpoznávanie hormónov založených na SERS. Medzi aktuálne výsledky patria vyhodnotené spektrá rôznych koncentrácií Estrónu spolu so vzorkou odpadovej vody, ktoré budú slúžiť ako tréningový dátaset pre neuronovú sieť.

Studium elektrických vlastností tenkých vrstev typu DLC

Bc. Martin Jindra (M2)

Školitel: prof. Ing. Václav Švorčík, DrSc.

Vrstvy typu DLC (diamond like carbon) jsou v současné době velmi rozšířené v nejrůznějších průmyslových odvětvích. Vrstvy měřené v této práci jsou připraveny ve firmě HVM Plasma spol. s r. o., kde je zavedena jejich sériová výroba. Cílem bylo zjistit, zda by se jejich elektrické měření dalo použít jako výstupní kontrola narostlé vrstvy. Měření bylo prováděno na vrstvách různých tloušťek a složení. Plánováno bylo měření v geometriích sandwich a gap. Ani jedna z metod se neukázala jako efektivní, a to zejména díky zkratu, který se na finálních vzorcích objevoval. Jako vhodná se naopak ukázala dříve neuvažovaná metoda dvoubodového měření, u které však v současné době není možné zcela přesné vyhodnocení dat. Bylo zjištěno, že elektrická měření by mohla být použita jako výstupní kontrola, avšak je potřeba vhodná kalibrace metody.

Syntéza a využití Fe:4N katalytických center ve 2D materiálech.

Bc. Anna Kushnarenko (M1)

Školitel: Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.

Modifikaci grafenoxidu (GO), odstraněním skupin obsahujících kyslík, je možné získat redukovaný grafenoxid (rGO). Díky vynikajícím elektrickým vlastnostem se tento materiál uplatňuje v elektrických aplikacích, jako podklad pro superkondenzátory, lithium-iontové baterie a přípravu flexibilních elektronických součástek. V této práci byl navržen nový způsob přípravy modifikovaného rGO pro vytvoření elektro-chemického katalyzátoru, který byl použit pro redukční reakce kyslíku a oxidační reakce vodíku. V prvním kroku, byl syntetizován GO a následně proběhla jeho tepelná redukce, která je jednou z nejefektivnějších metod, určených pro významné snížení obsahu skupin obsahujících kyslík v GO a dosažení elektrických vlastností blízkých grafenu. Dále byl získán katalyzátor vytvořením stabilních Fe center na povrchu rGO s kovalentními vazbami mezi atomy C–N–Fe. Nový katalyzátor měl vysokou katalytickou aktivitu, stabilitu a odolnost vůči katalytickým jedům, díky přítomnosti vysoce rozptýlených a koordinačně nenasycených Fe center s vysokou povrchovou hustotou.

Vývoj biosenzoru pro rychlé rozpoznání specifických sekvencí DNA

Bc. Anastasia Skvortsova (M2)

Školitel: Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.

Standardní klinické postupy pro identifikaci rezistence na patogeny jsou sofistikované a obvykle vyžadují nejméně 2 dny kultivace, než lze rezistenci jednoznačně prokázat. Ovšem lékaři a pacienti čelí rostoucím hrozbám patogenních bakterií necitlivých na antibiotika, přičemž hlavní podíl na mikrobiální rezistenci tvoří výskyt beta-laktamáz, které mohou být aktivně přenášeny mezi buňkami prostřednictvím plasmidů. V této práci je popsán vývoj univerzálního biosenzoru pro identifikaci jednonukleotidových polymorfismů 96% dosud popsaných variant beta-laktamáz TEM. Cílový blaTEM gen je součástí kruhové sekvence DNA v plasmidu, který je snadně extrahovatelný z biologického materiálu a může být použit pro rychlou identifikaci přítomnosti rezistence. Navrhovaný analytický přístup je založen na kombinaci jedinečných výhod poskytovaných povrchovou Ramanovou spektroskopií (SERS) a uměle vytvořenou konvoluční neuronovou sítí (CNN). SERS je známý extrémně vysokou citlivostí, snadnou manipulací se vzorky a rychlou analýzou, zatímco CNN se jeví jako slibná alternativa k nalezení dokonce i nejednoznačných spektrálních vlastností produkovaných Ramanovým signálem.

Ústav informatiky a chemie (143)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Jiří Jirát, Ph.D.

SEZNAM SEKCI

1. [Ústav informatiky a chemie](#)

Ústav informatiky a chemie

MÍSTO: ONLINE

KOMISE

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

doc. Ing. Lankaš Filip, Ph.D.

Ing. Jiří Jirát, Ph.D.

Mgr. Michal Kolář, Ph.D.

Ing. Janka Puterová, DNANexus

Mgr. Jan Pačes, Ph.D.

Ing. David Příhoda, MSD

PROGRAM

10:00 **zahájení**

[Květa Brázdilová](#) (M1, None)

Applications of Machine Learning for Detecting and Counting Objects in Cell Biology

[Bc. Dominika Draesslerová](#) (M1, Ing. Jiří Znamenáček)

Computer complexity of dynamic algorithms

[Bc. Valeriia Fil](#) (M1, doc. Mgr. Daniel Svozil, Ph.D.)

Classification by regression in biological activity modeling

[Ekaterina Simonova](#) (M1, None)

Identification of Copy Number Variations (CNVs) in blood and saliva derived DNA

[Bc. Anna Vavříková](#) (M1, Mgr. Jan Pačes, Ph.D.)

De novo termite transcriptome reconstruction

[Bc. Lucie Červenková](#) (M1, doc.Ing. Filip Lankaš, Ph.D.)

Temperature dependent mechanical properties of DNA A-tracts

[Bc. Simona Šuhajová](#) (M1, doc. Mgr. Daniel Svozil, Ph.D.)

Applicability domain of model for biological activity prediction

vyhlášení výsledků

Applications of Machine Learning for Detecting and Counting Objects in Cell Biology

Květa Brázdilová (M1)

Školitel: None

Modern biological research generates large amounts of data, which require automation for efficient analysis. Lately, machine learning solutions are being developed for many of the problems in this field. This talk focuses on applications of machine learning for image analysis, such as detecting cells in microscopy images and classifying them based on their phenotype. Eight published methods are presented, which employ machine learning for either detecting and classifying, or counting objects in biological images. The difference between detection or classification and counting is emphasized and counting methods, which bypass detection, are presented. Then, five open-source software tools for biological image analysis, which employ some of the methods mentioned above, are introduced. In the second part of the talk, a project is described, which aims to create a convolutional neural network for counting bacterial colonies in images of agar plates. The results of this project and reasons why it does not achieve satisfactory results are discussed. Some possibilities for improvement are suggested.

Computer complexity of dynamic algorithms

Bc. Dominika Draesslerová (M1)

Školitel: Ing. Jiří Znamenáček

Thanks to the proliferation of user-friendly programming languages, such as Python, there has been some programming convenience recently, so one may wonder what price they are paying for this convenience. Especially in the field of bioinformatics, where complex operations over large input data are solved, it is important that the programming language used is as gentle as possible to the consumed memory and computational time. This work compares the Python language with the low-level C language on two bioinformatics algorithms for aligning biological sequences. These algorithms are Smith-Waterman for local alignment and Needleman-Wunsch for global alignment. The result of the work is an overview of how the given languages cope with the mentioned dynamic algorithms in terms of time and memory requirements.

Classification by regression in biological activity modeling

Bc. Valeriia Fil (M1)

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

In order to identify compounds in the pharmaceutical industry that are biologically active, machine learning methods are used. Using QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationship) modeling we can predict the biological activity of a substance, provided with the knowledge of the structure of the molecule. We distinguish two types of methods: regression and classification. Their difference is hidden in the value that they predict: in regression we predict a natural number (in our case it's a value of biological activity), whereas in classification we predict ones and zeros, which means whether the ligand is active or not. The aim of this work was to compare two models that predict whether a ligand is active or inactive on a particular biological target.

Identification of Copy Number Variations (CNVs) in blood and saliva derived DNA

Ekaterina Simonova (M1)

Školitel: None

Copy number variations (CNVs) are a class of genetic variations where deletions and duplications of large (mostly greater than 1kb) genomic segments vary in copy number among different individuals. Recent studies show that large deletions or amplifications of genomic regions implicate in the wide range of human diseases due to the interference into the structure of transcripts and proteins. Moreover, CNVs represent a major driver of genome evolution and contribute to genome instability. Array-based methods (MLPA and CGH) along with next generation sequencing (NGS) technologies, which were introduced in order to decrease the cost of array-based methods, are frequently used for the assessment of CNVs. Blood-derived DNA is currently the main source for whole-genome (WGS) and whole-exome sequencing (WES) in NGS. Several studies demonstrate that saliva-derived DNA can be served as an alternative to blood-derived DNA when blood samples are not available or not suitable. The focus of this study is to show if saliva-derived DNA meets quality control (QC) criteria for identification of CNVs for clinical purpose.

De novo termite transcriptome reconstruction

Bc. Anna Vavříková (M1)

Školitel: Mgr. Jan Pačes, Ph.D.

Termites are social insects that belong to cockroaches (order Blattodea). They are the most important decomposers at the global scale, and reveal extraordinary ability to decompose various plant materials based on lignocellulose. The decomposition of the lignocellulose results into the release of essential plant nutrients back into the cycle. The lignocellulose is of recalcitrant nature and only a few animal groups are able to digest it. The process of the lignocellulose breakdown is in termites performed within their guts, in concert between innate termite enzymes and those originated from symbiotic microorganisms. While the symbiotic contribution was subject of numerous recent studies, contribution of innate termites enzymes was rather neglected. We decided to conduct complex comparative analysis using transcriptome sequencing of two termite organs known to produce digestive enzymes, the midgut and the labial glands, in workers and soldiers of 13 termite species spanned across termite phylogenetic tree. The starting point of our effort is to build annotated transcriptomes and study differential gene expression between *Prorhinotermes simplex* (Rhinotermitidae) and *Anoplotermes banksi* (Termitidae: Apicotermitinae).

Temperature dependent mechanical properties of DNA A-tracts

Bc. Lucie Červenková (M1)

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

DNA A-tracts are sequences of several adenines (A) or thymines (A) which do not contain a TA dinucleotide. They induce bending to the DNA double helix and exhibit peculiar structural properties. In the genome, A-tracts prevent nucleosome formation, contributing to gene expression regulation. At elevated temperatures, A-tracts undergo a premelting transition in which they lose their salient features, becoming structurally similar to generic B-DNA. While their structural properties are well described, their mechanical properties remain controversial. Newly published experiments suggest that A-tracts do not induce characteristic global bending when placed in buffer that does not contain Mg^{2+} ions. In my work I perform atomistic molecular dynamics simulations of a set of DNA sequences containing A-tracts. My results indicate straight A-tract DNA in monovalent ion environment, in line with the experiments. I also study the effect of temperature on the A-tract structure. In the future, I plan to further investigate mechanical stiffness of DNA A-tracts and test the effect of ionic environment (Na^+ vs. K^+), as well as the choice of force field (OL15 vs. bsc1) and water model (SPC/E vs. TIP3P). The results will help explain the biophysical properties of A-tracts and their biological role.

Applicability domain of model for biological activity prediction

Bc. Simona Šuhajová (M1)

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

In my bachelor thesis I deal with testing modern approaches to the evaluation of the applicability domain. The work describes the QSAR method, which is used for drug design, and the goal of QSAR is to model the structure-activity relationship. Furthermore, the work describes the term biological activity, selected prediction models that were used to predict biological activity, and measures for quantification of the applicability domain in which the biological activity is reliably predicted for the new compounds. The measures for evaluating the applicability domain use estimates of prediction reliability and distance to the model. The measures were compared and evaluated to describe the applicability domain.

Ústav chemické technologie restaurování památek (148)

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing.et BcA. Martina Kmoníčková

SEZNAM SEKCI

1. [Technologie a restaurování památek](#)

Technologie a restaurování památek

MÍSTO: MICROSOFT TEAMS

KOMISE

doc. Dr. Ing. Michal Ďurovič (předseda)

Ing. Zuzana Zlámalová Cílová, Ph.D.

Ing. Klára Drábková, Ph.D.

Ing. Vítězslav Knotek, Ph.D.

PROGRAM

10:00 **zahájení**

10:05 [Bc. Tomáš Aliger Dis.](#) (M2, Ing. Irena Kučerová, Ph.D.)

Historické způsoby moření dřeva a jejich vliv na jeho vlastnosti

10:15 [Bc. Martin Lacka](#) (M1, Ing. Vítězslav Knotek, Ph.D.)

Vzájemný vliv obalových materiálů a nitrátu celulózy

10:25 [Bc. Adéla Marešová](#) (M1, Ing. Klára Drábková, Ph.D.)

Možnosti zvýšení flexibility archeologických textilií

10:35 [Tadeáš Matěcha](#) (B3, doc. Mgr. Ing. Štěpánka Kučková, Ph.D.)

Analýza krevních nátěrů hmotnostní spektrometrií.

10:45 [Tereza Nohejlová](#) (B4, doc. Ing. Alexandra Kloužková, CSc.)

Restaurování zásobnice převzaté "in situ"

10:55 [Barbora Řípková](#) (B3, doc. Dr. Ing. Dana Rohanová)

Restaurování secesní vitráže

11:05 [Bc. Eliška Špotová](#) (M1, doc. Ing. Alexandra Kloužková, CSc.)

Plněná adheziva pro doplňování nestabilní keramiky

vyhlášení výsledků

Historické způsoby moření dřeva a jejich vliv na jeho vlastnosti

Bc. Tomáš Aliger Dis. (M2)

Školitel: Ing. Irena Kučerová, Ph.D.

Předmětem práce byla degradace dřeva způsobená historickými mořidly. Během projektu byly vzorky dřeva a filtračního papíru Whatman 1 (100% buničina) impregnovány pěti vybranými historickými postupy moření, které se využívaly během 2./3. 19. století. Následně byla na mořených vzorcích měřena změna mechanických vlastností a hodnota pH výluhu dřeva i papíru v průběhu stárnutí vzorků. Na dřevěných vzorcích byla dále měřena změna hmotnosti, barevnosti, hloubka penetrace materiálu a změna struktury povrchu. U papíru byla navíc měřena změna průměrného polymeračního stupně. Na základě naměřených dat byl zhodnocen stupeň a druh poškození vzorků.



Vzájemný vliv obalových materiálů a nitrátu celulózy

Bc. Martin Lacka (M1)

Školitel: Ing. Vítězslav Knotek, Ph.D.

Cílem práce bylo zjistit vzájemnou interakci mezi dvěma druhy nitrátu celulózy a čtyřmi obalovými materiály (archivní lepenky Boxboard + Klug a polymerní folie Melinex a PE folie) a zjistit nejvhodnější vzájemnou kombinaci. Vzájemné kombinace materiálů byly exponovány zátěžovým a Oddyho testem. Zkoumané byly změny hmotnosti, množství substituovaného dusíku a množství změkčovadel u vzorků nitrátů, které byly také podrobeny FTIR analýze. Lepenkám byla měřena změna hmotnosti, barevnosti, pH a FTIR analýza. Výsledky ukazují vzájemné interakce, které značně závisí, zda je během expozice přítomná zvýšená vlhkost a může docházet k hydrolýze. Jako nejlepší obalový materiál v případě zvýšené vlhkosti lze označit Boxboard. V případě nízké vlhkosti je možno označit Boxboard, nebo Melinex.

Možnosti zvýšení flexibility archeologických textilií

Bc. Adéla Marešová (M1)

Školitel: Ing. Klára Drábková, Ph.D.

Tato práce se věnuje archeologickým textiliím, které tvoří nezanedbatelnou část nálezů a vyžadují specifický postup konzervování. Ten se volí s ohledem na typ a stav materiálu tak, aby bylo zabráněno dalšímu poškození a aby byla zachována výpovědní hodnota předmětu. Po vyjmutí textilního nálezu z půdy nebo jiného prostředí spočívá konzervátorský zásah hlavně v čištění, sušení, adjustaci a uložení, případně restaurování textilie. Cílem této práce bylo porovnání vlivu různých metod sušení a přídavku zvláčňujících prostředků na vlastnosti uměle předstárnuté hedvábné textilie. Byly vyzkoušeny běžně používané metody sušení a jejich vliv zhodnocen měřením tuhosti, pevnosti a dalších vlastností vzorků. K tomu byly testovány dva zvláčňující prostředky – glycerol a polyethylenglykol. Kromě jejich účinnosti byl také zjišťován vliv těchto chemikálií na dlouhodobou stabilitu hedvábných vzorků a tedy vhodnost jejich použití.

Analýza krevních nátěrů hmotnostní spektrometrií.

Tadeáš Matěcha (B3)

Školitel: doc. Mgr. Ing. Štěpánka Kučková, Ph.D.

Teoretická část je zaměřena na faktografii krve a krevních proteinů, sumarizaci historického vývoje a funkční i umělecké využití krevních nátěrů z historického i soudobého aspektu. V experimentální části je vyhodnoceno a diskutováno 24 získaných vzorků krevních nátěrů, které byly štěpeny trypsinem, poté proběhlo přečištění získaných peptidových směsí na reverzní fázi ZipTip C18 a samotná analýza nanokapalinovou chromatografií spojenou s hmotnostním spektrometrem s elektrosprejovou ionizací a kvadrupólovým detektorem (nano-LC-ESI-Q-TOF MS). Získané výsledky byly porovnány s celosvětovou proteinovou databází rostlinných a živočišných proteinů (SwissProt, Bos Taurus). Zjištěné konkrétní proteiny ve srovnání s původními látkami užitými na přípravu krevních nátěrů dokazují, že zvolená metoda je díky své citlivosti vhodnou technikou pro identifikaci proteinů ve vzorcích krevních nátěrů s výjimkou detekce žluče, u které na základě provedeného výzkumu nebylo možné verifikovat efektivnost této metody. I přesto bylo zcela korektně identifikováno 20 z 24 vzorků, a proto lze zvolenou metodu považovat za validní. Dále bylo zjištěno, že zbývající čtyři vzorky byly kontaminovány, respektive použité proteinové materiály byly neúplně identifikovány.

Restaurování zásobnice převzaté "in situ"

Tereza Nohejlová (B4)

Školitel: doc.Ing. Alexandra Kloužková, CSc.

Restaurovaným předmětem byla nádoba převzatá ve formě „in situ“. K nádobě, která byla v době převzetí uvnitř hliněného bloku, bylo připojeno 35 dalších již očištěných střepů, které tvořily součást nádoby a byly nalezeny v bezprostředním okolí nálezů. Nádoba byla nalezena v roce 2019 v Tismicích a je datována do období jordanovské kultury. Po provedení restaurátorského průzkumu, jehož součástí bylo stanovení základních parametrů keramického střepu (stanovení vlhkosti, nasákavosti, objemové hmotnosti a zdánlivé pórovitosti) a identifikace chemického a mineralogického složení střepové hmoty, byl navržen restaurátorský záměr. Po schválení zadavatelem byla nádoba vypreparována z bloku hlíny, jednotlivé střepy očištěny, vyhledány jejich správné pozice k umístění, slepeny akrylátovou disperzí K 498, chybějící části doplněny vhodnou náhradou ze směsi celulózy (Arbocel BC 1000) a disperze K 498, během restaurování byla vytvářena fotodokumentace a na závěr byly navrženy odpovídající klimatické podmínky uložení zrestaurovaného předmětu. Práce byla vypracována v rámci projektu NAKI II DG18P02OVV028.

Restaurování secesní vitráže

Barbora Řípková (B3)

Školitel: doc. Dr. Ing. Dana Rohanová

Předmětem práce je restaurátorský zásah na oválné secesní vitráži s rostlinným motivem (viz. obrázek). Vitráž z počátku 20. století byla uložena v depozitu restaurátorské dílny. Původní vlastník ani její umístění nejsou známy. V době převzetí byla olověná síť vitráže nevratně poškozena. Nedochovala se cca 1/3 plochy vitrážových skel a z obvodového lemu zůstal pouze jediný kus. Po pořízení nákresu zbylé původní olověné sítě byla vitráž rozebrána. Vyjmutá skla byla očištěna pomocí vodného roztoku detergentu. Ze vzorků nahrazovaných skel bylo analýzou XRF zjištěno, že se jedná o skla sodno-vápenatá. Chybějící a některá prasklá skla byla nahrazena skly ve stejném barveném tónu. Geometrické linky byly domalovány sklářskou vypalovací barvou a vypáleny. Následně bylo provedeno opětovně sestavení vitráže do nových H profilů. Závěrem byla olověná síť spájena a povrch vitráže doleštěn, v souladu s historickými postupy, pomocí petroleje a dřevěných pilin. Pro uložení a manipulaci byly navrženy vhodné podmínky. Práce proběhly v souladu s restaurátorským záměrem schváleným zadavatelem.



Plněná adheziva pro doplňování nestabilní keramiky

Bc. Eliška Špotová (M1)

Školitel: doc.Ing. Alexandra Kloužková, CSc.

Doplňování chybějící střeptvé hmoty pomocí tmelení je jednou z technik používaných při restaurování archeologických nálezů. Nejčastěji je k tomuto účelu používána sádra, která však není ve všech případech vhodná. Laboratorní projekt byl zaměřen na výplňové směsi a vyhodnocení vlastností výplně i samotného spoje mezi výplní a keramickým střeptem. Pro práci byly vybrány tři druhy disperzních adheziv (K498, Lascaux Acrykleber 498 HV a Duvilax BD 20), plněné organickými (Arbocel BC 1000 a 200, Tylose MH 300 a 6000) i anorganickými plnivými (skleněné vločky, glazura, oxid hlinitý, živec, mramorová moučka a Korest silikat). U výplní byla porovnávána zpracovatelnost směsi při přípravě a aplikaci, smrštění, schopnost kopírovat reliéf, změna barevnosti a pevnost spoje mezi střeptem a výplní. Práce byla provedena v rámci projektu NAKI II č. DG18P02OVV028.