

Seznam sekcí a složení komisí

- Sekce: **Anorganická chemie 1**
posluchárna A210, 9:00 hod
- Komise:
- Předseda: doc. Ing. Zdeněk Sofer, Ph.D.
- Členové: doc. Ing. Kateřina Rubešová, Ph.D.
Ing. Blanka Švecová, Ph.D.
Ing. Jan Luxa
Ing. David Petrádes, Ph.D. (Crytur)
Ing. Tomáš Hlásek, Ph.D. (CAN Superconductors)
- Sekce: **Anorganická chemie 2**
posluchárna A211, 9:00 hod
- Komise:
- Předseda: prof. Dr. Ing. David Sedmidubský
- Členové: doc. Ing. Pavla Nekvindová, Ph.D.
Ing. Irena Hoskovcová, CSc.
Ing. Vlastimil Mazánek
Ing. Peter Barath, Ph.D. (Metrohm)
Ing. Aleš Strejc, Ph.D. (Moser)
Ing. Stanislava Stará, Ph.D. (Preciosa)
- Sekce: **Anorganická technologie I**
posluchárna A32, 9:00 hod
- Komise:
- Předseda: prof. Dr. Ing. Josef Krýsa
- Členové: Ing. Jaromír Hnáť, Ph.D.
Ing. Martin Pultar
Ing. Miloslav Lhotka, Ph.D. (organizační tajemník)
- Sekce: **Anorganická technologie II**
posluchárna A25, 9:00 hod
- Komise:
- Předseda: doc. Ing. Jan Vídenský, CSc.
- Členové: Dr. Ing. Vlastimil Fíla
Ing. Roman Kodým, Ph.D.
Ing. Martin Zlámal, Ph.D. (organizační tajemník)
- Sekce: **Anorganická technologie III**
posluchárna A44, 9:00 hod
- Komise:
- Předseda: doc. Ing. Martin Paidar, Ph.D.
- Členové: Ing. Ivona Sedlářová, Ph.D.
Ing. Milan Bernauer, Ph.D.
Ing. Šárka Paušová, Ph.D. (organizační tajemník)

Sekce: **Kovové materiály - restaurování**
hlavní chodba ústavu 106, 10:00 hod

Komise:

Předseda: prof.Ing. Pavel Novák, CSc.

Členové: Ing. Jiří Děd,CSc.

PhDr. Světlana Spiwoková

Ing. Šárka Msallamová, Ph.D.

Ivan Houska

Sekce: **Kovové materiály I.**
posluchárna A50, 8:30 hod

Komise:

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

Členové: Ing. Milan Kouřil, Ph.D.

Ing. Petr Dvořák, Ph.D.

Sekce: **Kovové materiály II.**
posluchárna A50, 9:30 hod

Komise:

Předseda: prof. Ing. Pavel Lejček, Dr.Sc.

Členové: Ing. Jan Stoulil, Ph.D.

Ing. Hong Vu, Ph.D.

Sekce: **Anorganické nekovové materiály I**
posluchárna A02, 9:00 hod

Komise:

Předseda: prof. RNDr.Ondřej Gedeon, Ph.D.

Členové: Ing. Diana Horkavcová, Ph.D.

Ing.Tereza Uhlířová

Ing. Miroslav Rada, CSc. (organizační tajemník)

Sekce: **Anorganické nekovové materiály II**
posluchárna A02, 9:00 hod

Komise:

Předseda: prof. Dr. Willi Pabst, Dipl.-Min.

Členové: Ing. František Lahodný, Ph.D.

Ing.Barbora Holubová

Ing.Jan Macháček, Ph.D.(organizační tajemník)

Sekce: **Anorganické nekovové materiály III**
posluchárna A02, 9:00 hod

Komise:

Předseda: doc. Ing. Martin Míka, Ph.D.

Členové: Ing. Tadeáš Gavenda, Ph.D.

Ing. Mária Kavanová

Ing. Eva Gregorová, CSc. (organizační tajemník)

Sekce: **Analýza a vlastnosti léčiv**
posluchárna A31, 8:30 hod

Komise:

Předseda: prof. Ing. František Kovanda, CSc. (108)

Členové: prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc. (108)
doc. Ing. Barbora Doušová, CSc. (108)
doc. Dr. Ing. Michal Hušák (108)
RNDr. Alexandr Jegorov CSc. (Teva Czech Industrie s.r.o.)
Dr. Ing. Jiří Brus (ÚMCH, AV ČR, v. v. i.)
Ing. Lucie Gruberová (108, organizační tajemník)

Sekce: **Organická chemie M1**
místnost A250, 9:15 hod

Komise:

Předseda: doc. Ing. Radek Cibulka, Ph.D.

Členové: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.
doc. Ing. Igor Linhart, CSc.
doc. Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D. (organizační tajemník)
Ing. Ivan Veselý, CSc. (CaymanPharma)
Ing. Jan Kočí, Ph.D. (Interpharma)

Sekce: **Organická chemie M2**
místnost A278c, 9:15 hod

Komise:

Předseda: doc. Dr. Ing. Jana Hodačová

Členové: prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.
doc. Ing. Stanislav Rádl, CSc. (Zentiva)
Ing. Michal Himl, Ph.D. (organizační tajemník)
Ing. Karel Zelinka (LZ Draslovka)
Ing. Jan Kroupa, Ph.D. (Proxim)
Ing. Hanuš Slavík (Synthomer)

Sekce: **Organická chemie M3**
posluchárna A11, 9:15 hod

Komise:

Předseda: doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.

Členové: prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.
doc. Ing. Ladislav Cvak, CSc. (Teva)
Mgr. Roman Holakovský, Ph.D. (organizační tajemník)
Ing. Petra Cuřínová, Ph.D. (ÚCHP)
Ing. Jiří Vokál, Ph.D. (Lach-Ner)
Ing. Jaroslav Píš (Mercachem)

Sekce: **Organická chemie B1**
místnost A278e, 9:15 hod

Komise:

Předseda: prof. Ing. Ivan Stibor, CSc. (TUL Liberec)

Členové: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.
Ing. Václav Kozmík, CSc.
Ing. Radek Jurok, Ph.D. (organizační tajemník)
Ing. Tomáš Jursík (Alchimica)
PharmDr. Jan Pavlík, Ph.D. (CaymanPharma)

Sekce: **Organická chemie B2**
laboratoř A (N08), 9:15 hod

Komise:

Předseda: prof. Ing. František Liška, CSc. (PedF UK)

Členové: doc. Ing. Jan Kotek, Ph.D. (PřF UK)
Ing. Eva Svobodová, Ph.D.
Ing. Michal Kohout, Ph.D. (organizační tajemník)
Mgr. Martin Švec (VWR)
Ing. Martin Janošek (Lonza)
Ing. Kryštof Šigut (Santiago)

Sekce: **Organická technologie a katalýza**
posluchárna A01, 9:00 hod

Komise:

Předseda: doc. Ing. Pavel Čapek, CSc.

Členové: Ing. Jiří Krupka, Ph.D., (tajemník)
doc. Ing. Josef Koubek, CSc.
Ing. Iva Paterová, Ph.D.
Ing. Ivana Luštická, Ph.D. (Škoda Auto a.s.)

Sekce: **Výroba léčiv**
učebna A081a, 9:00 hod

Komise:

Předseda: prof. Ing. Libor Červený, DrSc.

Členové: Ing. Jan Patera, Ph.D., (tajemník)
doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.
Ing. Petr Durdil, CSc. (Zentiva)

Sekce: **Syntéza a výroba léčiv**
učebna AS31a, 9:00 hod

Komise:

Předseda: doc. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.

Členové: Ing. Eliška Vyskočilová, Ph.D., (tajemník)
Mgr. Jarmila Zbytovská, Dr.rer.nat.
Ing. Kamila Syslová, Ph.D.

Sekce: **Chemie a technologie polymerů**
posluchárna B36, 9:00 hod

Komise:

Předseda: doc. Ing. Antonín Kůta, CSc.

Členové: Mgr. Soňa Hermanová, Ph.D.
Ing. Drahomír Čadek, Ph.D.
Ing. Lenka Malinová, Ph.D.
Ing. Anatolij Sokolohorskyj (organizační tajemník)

Sekce: **Materiálové inženýrství I - Materiály pro elektroniku**
posluchárna B360, 9:00 hod

Komise:

Předseda: prof. Ing. Jindřich Leitner, DrSc.

Členové: doc. Ing. Petr Macháček, CSc.
doc. Ing. Petr Slepíčka, Ph.D.
Ing. Alena Řezníčková, Ph.D.

Sekce: **Materiálové inženýrství II - Materiály pro bioaplikace**
posluchárna B350, 9:00 hod

Komise:

Předseda: prof. Ing. Václav Švorčík, DrSc.

Členové: doc. Ing. Zdeňka Kolská, Ph.D., Univerzita J.E. Purkyně
Ing. Nikola Slepíčková Kasálková, Ph.D.
Ing. Kateřina Kolářová, Ph.D.

Sekce: **Chemická informatika a bioinformatika**
posluchárna B34, 14:00 hod

Komise:

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

Členové: Jan Pačes, Ph.D., ÚMG AV ČR, v.v.i.
Ing. Filip Lankaš, Ph.D.
Danny Bitton, Merck Sharp & Dohme
Ing. Jiří Jirát, Ph.D.

Sekce: **Restaurování a konzervování skla a keramiky**
chodba G, 10:00 hod

Komise:

Předseda: doc. Ing. Jaroslav Kloužek, CSc.

Členové: MgA. Zita Brožková
Ljuba Svobodová
Jiří Černohorský

Sekce: **Technologie restaurování**
chodba G, 8:30 hod

Komise:

Předseda: doc. Dr. Ing. Michal Ďurovič

Členové: doc. Ing. Petr Kotlík, CSc.
Ing. Mgr. Barbora Holubová
Ing. Vítězslav Knotek, Ph.D.

Sekce: **Restaurování a konzervování textilu**
prostor před A64, 8:30 hod

Komise:

Předseda: doc. Ing. Petr Hron, CSc.

Členové: Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.
Ing. Klára Drábková
Bc. Jana Bureš Víchová, DiS.

Sekce : Anorganická chemie 1

Grafén dotovaný dusíkom a bórom

Autor: Laura Pavlíková
Ročník: B2
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: Ing. Vlastimil Mazánek

Grafén, sľubný materiál budúcnosti, si získal pozornosť mnohých vedeckých tímov vďaka svojim výborným mechanickým, elektrickým, optickým či tepelným vlastnostiam. Dopovaním rôznymi heteroatómami (bór, dusík, fosfor, síra alebo halogenidy) je možné pripraviť mnoho modifikácií grafénu a vylepšiť tak jeho pôvodné chemicko-fyzikálne vlastnosti, napr. šírku zakázaného pásu, elektrickú vodivosť, katalytické účinky či detekčné vlastnosti.

Termicky redukovaný grafén má vďaka veľkému povrchu a dobrej vodivosti veľký potenciál v elektrokatalýze. Avšak čistý grafén nemá takmer žiadne katalytické účinky. Dopovaním grafénu kovmi sa môžu tieto účinky významne zlepšiť, ale tým sa pomerne zvýši i cena. Na druhú stranu dopovanie nekovmi môže mať podobný efekt za nižšiu cenu.

Táto práca je zameraná na dopovanie grafénu dvoma heteroatómami s nižším, respektíve vyšším počtom valenčných elektrónov – bórom a dusíkom, ktoré môžu vytvoriť na graféne miesta s parciálnym nábojom a tým zlepšiť jeho elektrokatalytické vlastnosti, napr. pre redukciu kyslíka. Ďalej môžu zlepšiť detekčné vlastnosti grafénu voči dopamínu a kyseline askorbovej.

Sekce : Anorganická chemie 1

Tenké vrstvy Ce:Y₃Al₅O₁₂ pro scintilační použití

Autor: Jan Havlíček
Ročník: B3
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: Ing. Kateřina Rubešová, Ph.D.

Cerem dopovaný yttrito-hlinitý granát (Ce:YAG) je široce používaným scintilačním materiálům. Krystaly YAG se běžně připravují růstem z taveniny, hlavně Czochralského metodou. Pro určité aplikace je však třeba použít velice tenké řezy materiálu, jichž není možno dosáhnout zpracováním monokrystalů. Dalším limitem pěstování krystalů Ce:YAG je maximální dosažitelná koncentrace Ce³⁺ vlivem nízkého rozdělovacího koeficientu.

Pro přípravu a testování tenkých vrstev s vyšší koncentrací ceru je vhodná sol-gelová depozice na monokrystalické substráty. Tloušťka připravených vrstev v řádu stovek nanometrů navíc vyhovuje pro nové aplikace zejména ve stínění RTG záření. V této práci budou prezentovány tenké vrstvy Y_{3-x}Ce_xAl₅O₁₂ (x=0,0165–0,75) připravené metodou spin-coating na monokrystalický Al₂O₃. Vrstvy byly charakterizovány pomocí XRD, SEM, fotoluminiscenčních měření a dále měřením scintilační odezvy na RTG a α-záření. U vzorku s nejlepšími parametry byly připraveny také vzorky se směsným oxidačním stavem ceru Ce³⁺/Ce⁴⁺, který byl detekován pomocí XPS. Byl sledován vliv valence ceru na výše popsané charakteristiky tenkých vrstev.

Sekce : Anorganická chemie 1

Příprava a charakterizace nanočástic NaY(Gd)F₄:YbEr

Autor: Kristina Timoshevskaya
Ročník: B3
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: Ing. Vilém Bartůněk, Ph.D.

Nanočástice fluoridů vzácných zemin jsou v současné době velice užitečným materiálem pro medicínské aplikace, například pro diagnostiku rakoviny. Důvodem jsou jejich fluorescenční vlastnosti. Cílem této práce bylo připravit nanočástice různých velikostí a tvarů použitím různých prekurzorů a získat čistou hexagonální fázi nanočástic NaY(Gd)F₄:YbEr.

Byla připravená směs chloridů vzácných zemin a zdrojem sodíku byly čtyři různé látky (hydroxid sodný, fosforečnan sodný, uhličitan sodný a octan sodný). Jako rozpouštědlo a fluorační činidlo byla použita iontová kapalina 1-butyl-3-methylimidazolium hexafluorofosfát. Nanočástice byly separovány z reakční směsi a analyzovány pomocí rentgenové difrakce (=XRD).

Sekce : Anorganická chemie 1

Příprava a hexagonální fáze nanočástic fluoridů vzácných zemin

Autor: Sabina Amandykova
Ročník: B3
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: Ing. Vilém Bartůněk, Ph.D.

Nanokrystaly fluoridů vzácných zemin jsou nerozpustné ve vodě, a proto jsou vhodné pro řadu medicínských aplikací. Využití nanočástic NaYF₄:YbEr je cíleno na likvidaci nebo značení nádorových buněk. Práce je zaměřena na přípravu, dopování a charakterizaci fluoridů vzácných zemin. Při experimentech byl měněn poměr navážek a složení chloridů vzácných zemin tak, aby byla získána čistá hexagonální fáze, která má podle literatury nejlepší optické vlastnosti. Nanočástice byly připraveny smícháním směsi chloridů vzácných zemin s hydroxidem sodným a s fluoračním činidlem NH₄F. Jako rozpouštědlo byla použita iontová kapalina 1-butyl-3-methylimidazolium hexafluorofosfát. Po přidání rozpouštědla a 1 ml vody byla směs homogenizována a vložena do laboratorní sušárny. Reakce probíhala dvě hodiny při teplotě 230 °C. Po proběhnutí reakce byl výsledný produkt vyprán methanolem a vodou a separován z reakční směsi. Byla provedena fázová analýza připravených nanočástic pomocí rentgenové difrakční analýzy.

Sekce : Anorganická chemie 1

Příprava a charakterizace nanočástic NiFe_2O_4

Autor: Václav Rach
Ročník: B3
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.

Tématem této práce je příprava a charakterizace nanočástic NiFe_2O_4 pro využití v magnetické hypertermii. Z dusičnanů uvedených přechodných kovů byl připraven směsný glycerolát, který byl následně termicky rozložen v peci. V závislosti na maximální teplotě nastavené pro termický rozklad vznikaly různě velké nanočástice. Čím vyšší byla použitá teplota, tím větší nanočástice vznikaly – od 4,5 nm při 500 °C do 26 nm při 800 °C. Pro analýzu glycerolátu byla použita rentgenová difrakční analýza (XRD), fotoelektronová spektroskopie (XPS), atomová absorpční spektroskopie (AAS) a skenovací elektronová mikroskopie (SEM). Analýza rozkladu glycerolátu v závislosti na teplotě byla provedena pomocí simultánní termické analýzy (STA). Nanočástice byly charakterizovány pomocí rentgenové difrakční analýzy (XRD), z naměřených spekter byla následně určena jejich velikost z Scherrerovy rovnice. Tvar a velikost nanočástic byl také analyzován pomocí transmisní elektronové mikroskopie (TEM), zatímco složení nanočástic bylo charakterizováno energiovou disperzní spektroskopií (EDS). Na základě výsledků jsme schopni připravit nanočástice NiFe_2O_4 s požadovanou velikostí, což umožňuje efektivní využití tohoto materiálu v medicíně.

Sekce : Anorganická chemie 1

Příprava nanočástic amorfního selenu

Autor: Yulia Zakharyeva
Ročník: B3
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: Ing. Vilém Bartůněk, Ph.D.

Nanočástice amorfního selenu mají antimikrobiální vlastnosti a jsou zároveň biologicky odbouratelné, protože selen je mikronutrient. V této práci byla zkoumána reakční kinetika a rychlost růstu velikosti nanočástic selenu v koloidních roztocích pomocí přístroje ZetaSizer. Pro přípravu koloidních roztoků byla použita kyselina askorbová jako redukční činidlo a jako zdroj selenu byl použit seleničitan sodný.

Sekce : Anorganická chemie 1

Synthesis of Cu(II), Ni(II), Co(II) complexes with Schiff base ligand

Autor: Vafa Geybullayeva
Ročník: B2
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: Ing. Irena Hoskovcová, CSc.

Schiff bases, compounds synthesized by the condensation of an amino compound with carbonyl compounds, are very versatile and appear to be important in a number of biochemical reactions, such as transamination and decarboxylation. At the same time, they are frequently used as bidentate ligands.

In this case, the Schiff base obtained by reaction of a vitamin B6 derivative – pyridoxal hydrochloride (PL-HCl), and Taurine (Tau), was used as the ligand for preparation of Ni(II), Cu(II) and Co(II) complexes. As the source of metals, the appropriate acetates were chosen. The starting molar ratio between metal and ligand was either 1:2 or 1:3 for all the metals. The products were characterized by elemental analysis, AAS, IR and Raman spectroscopy, and powder XRD.

In all cases, a microcrystalline product with a general formula $[M(\text{HPL-Tau})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ ($M = \text{Co}, \text{Cu}, \text{Ni}$) was formed.

Sekce : Anorganická chemie 2

Příprava černého arsenu a jeho nanočástic, optimalizace mechanické exfoliace grafitu

Autor: Bc. Petr Marvan
Ročník: M1
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: doc. Ing. Zdeněk Sofer, Ph.D.

Vrstevnaté materiály a nanomateriály se v poslední době dostaly do popředí výzkumu. Největší ohlas si z této kategorie zcela jistě získal grafen díky svým unikátním mechanickým, fyzikálním a chemickým vlastnostem. Grafen byl připraven v roce 2004 mechanickou exfoliací grafitu. V současnosti jsou v popředí výzkumu také jeho četné anorganické analogy.

Tato práce se zabývá přípravou orthorombické modifikace arsenu, jež má strukturu analogickou s černým fosforem. Příprava probíhala transformací amorfního arsenu za přítomnosti par rtuti za zvýšené teploty. Nanočástice byly připraveny „share-force“ mletím suspenze černého arsenu v DMF. Připravený černý arsen a jeho nanočástice byly následně studovány pomocí Ramanovy spektroskopie, práškové difrakce, transmisní elektronové mikroskopie a elektrochemických metod. Dalším krokem práce by měla být příprava vrstev mechanickou exfoliací podobným způsobem jako příprava grafenu. Procedura mechanické exfoliace byla nejprve optimalizovaná na mechanické exfoliaci pyrolytického grafitu tzv. lepicí páskou. Grafen je vhodný materiál pro optimalizaci procedury mechanické exfoliace, jelikož pomocí Ramanovy spektroskopie ve spojení s optickou mikroskopií může být velmi snadno rozpoznán materiál s rozdílným počtem vrstev.

Sekce : Anorganická chemie 2

Scintilační materiály

Autor: Václav Doležal
Ročník: M1
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: Ing. Ladislav Nádherný, Ph.D.

Scintilace je druh luminiscence, při které vznikají slabé pulsy světla při dopadu ionizujícího záření. Je způsobena přenosem energie dopadajícího záření na emisi scintilačních fotonů. Scintilátor funguje jako transformátor energie – přemění vysokoenergetický foton rentgenového nebo gamma záření na UV-VIS luminiscenci. Hlavními parametry scintilačních materiálů jsou kvantový výtěžek (light yield), schopnost zadržet rentgenové záření, scintilační odezva, chemická stabilita a odolnost vůči radiaci.

Příspěvek popisuje jev scintilace, přehled scintilačních monokrystalů, jejich historický vývoj, přípravu a využití v praxi. K přípravě těchto materiálů se používá převážně Czochralského metoda a epitaxní růst z kapalné fáze (LPE). Při vývoji nových scintilačních materiálů lze pro jejich testování připravit objemové materiály či tenké vrstvy získané coatingovou metodou nebo depozicí z plynné fáze. Budoucí výzkum je zaměřen na přípravu hexagonálních aluminátů $\text{La}_{1-x}\text{Ce}_x\text{MgAl}_{11}\text{O}_{19}$ v podobě objemových vzorků a tenkých vrstev pomocí metody sol-gel. Struktura připravených materiálů bude charakterizována rentgenovou difrakční analýzou, Ramanovou spektroskopií a elektronovou mikroskopií. Scintilační vlastnosti budou zjišťovány z emisních spekter buzených katodoluminiscencí.

Sekce : Anorganická chemie 2

Folie na bázi grafenu

Autor: Bc. Beata Štrochová
Ročník: M2
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: doc. Ing. Zdeněk Sofer, Ph.D.

Oxid grafenu a membrány na bázi tohoto materiálu je velice perspektivní materiál s širokým aplikačním potenciálem např. pro flexibilní elektroniku nebo separace plynů a čištění odpadních vod. Oxid grafenu byl připravován pomocí Touryovy metody založené na oxidaci grafitu manganistanem draselným v prostředí koncentrovaných kyselin a jeho následnou exfoliací. Připravený oxid grafenu byl charakterizován širokým spektrem analytických technik z hlediska chemického složení a zastoupení jednotlivých funkčních skupin. Koloidní suspenze oxidu grafenu byla použita pro přípravu membrán pomocí metody podtlakové filtrace na vhodném nosiči a sedimentací. Připravené membrány v podobě folií o průměru až 100 mm vykazovaly výtečné mechanické vlastnosti. Povrch membrán byl následně modifikován ozařováním ionty (He^+ , H^+) o energiích 1 – 5 MeV. Změny povrchové morfologie byly studovány pomocí AFM a SEM mikroskopie. Chemické složení bylo studováno metodou fotoelektronové spektroskopie (XPS) a jadernými analytickými technikami (RBS a ERDA). Změny ve struktuře a složení byly dále charakterizovány pomocí Ramanovy a FT-IR spektroskopie. Mikrobiologické testy ukazují výtečnou biodegradovatelnost membrán. Membrány byly následně testovány pro separace plyných směsí CO_2/H_2 .

Sekce : Anorganická chemie 2

Erbiem vytvořená barevná centra v monokrystalickém diamantu

Autor: Banu Akhetova
Ročník: B3
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: Ing. Pavla Nekvindová, Ph.D.; Ing. Jakub Cajzl

Diamant je známý materiál s pozoruhodnými fyzikálními i optickými vlastnostmi. Vezmeme-li v úvahu jeho tvrdost, chemickou odolnost, tepelnou vodivost a biokompabilitu, nepřekvapuje zájem výzkumníků o tento materiál. Mezi jeho optické vlastnosti patří vysoká hodnota indexu lomu a schopnost vytvářet barevná centra modifikací struktury. Barevná centra vytvořená v diamantu jako stabilní struktury s širokým zakázaným pásem jsou schopná emitovat světlo ve formě jednotlivých fotonů, a tvoří tak základní strukturu kvantového počítače. Ve své práci jsem studovala přípravu barevných center vytvořených dopací erbia do monokrystalického diamantu. Krystalografické řazy diamantu $\langle 001 \rangle$ a $\langle 110 \rangle$ byly implantovány Er^{3+} s energií 190 keV a třemi implantačními dávkami a následně žíhány ve vakuu. Změny ve struktuře diamantu a pozice erbia byly sledovány metodou Rutherfordovy spektroskopie zpětného odrazu (RBS), mikroskopie atomových sil (AFM) a Ramanovou spektroskopií. Z optických vlastností byla zjišťována především luminiscence v blízké infračervené (NIR) oblasti. Vyzkoušena byla také koimplantace erbia ytterbiem a hliníkem. Ze změřené luminiscence při 1,5 μm se ukázalo, že ve vzorcích monokrystalického diamantu se podařilo připravit erbiová barevná centra.

Sekce : Anorganická chemie 2

Snižování množství redukčních karcinogenních vedlejších produktů při termické exfoliaci oxidu grafitu

Autor: Michal Lojka
Ročník: B1
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.

Tématem této práce je detailní studium mechanismu termické exfoliace oxidu grafitu včetně charakterizace látek, které při exfoliaci vznikají. Byly použity dva různé oxidy grafitu, které byly exfoliovány za různých teplot v různých atmosférách. Bylo zjištěno, že nejkvalitnější grafen lze připravit za teplot okolo 1000 °C. Při těchto teplotách bohužel dochází k uvolňování největšího množství nebezpečných látek. Produkty vzniklé během termické exfoliace byly analyzovány pomocí plynového chromatografu v kombinaci s hmotnostním spektrometrem. Kvalita vyrobeného grafenu byla studována pomocí skenovacího elektronového mikroskopu, simultánní termické analýzy, Ramanovy spektroskopie, cyklické voltametrie a fotoelektronové spektroskopie. Celkový povrch vzniklých grafenů byl měřen metodou BET. Na základě těchto výsledků je možné optimalizovat přípravu grafenu tak, aby byla vysoce kvalitní. Postup je energeticky šetrný a produkce karcinogenních látek je při výrobě minimalizována.

Sekce : Anorganická chemie 2

Vliv velikosti kationu interkalačního činidla na elektrokatalytické vlastnosti MoS₂

Autor: Pavel Vosecký
Ročník: M1
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: doc. Ing. Zdeněk Sofer, Ph.D.

Dichalkogenidy přechodných kovů patří mezi intenzivně studované materiály současnosti. Jedná se o materiály s vrstevnatou strukturou, které lze exfoliovat díky slabým van der Waalsovým silám mezi jednotlivými vrstvami. Takto lze připravit materiály o tloušťce jedné atomární vrstvy, což vede ke vzniku zajímavých vlastností, jako je například přechod od nepřímého k přímému zakázanému pásu. Dále dochází exfoliací k výraznému zvýšení měrného povrchu, a tím ke zvýšení katalytické aktivity pro některé elektrochemické reakce.

Tato práce se zabývá studiem vlivu velikosti kationtu (Li, Na, K, Cs) interkalačního činidla na elektrokatalytické vlastnosti MoS₂. Míra exfoliace má přímý vliv na strukturu, složení a vlastnosti materiálu. Ke studiu struktury a složení byla použita řada analytických metod: skenovací elektronová mikroskopie (SEM), energiově disperzní spektroskopie (EDS), fotoelektronová spektroskopie (XPS), rentgenová difrakce (XRD) a Ramanova spektroskopie. K charakterizaci elektrochemických vlastností připravených materiálů byla použita cyklická voltametrie a lineární polarizační voltametrie. Bylo zjištěno, že připravený MoS₂ exfoliovaný naftalenidem lithným má vynikající elektrokatalytické vlastnosti pro vývoj vodíku a mohl by být potenciální náhradou za platinový katalyzátor.

Sekce : Anorganická chemie 2

Příprava tenkých vrstev obsahujících měď metodami iontové výměny a iontové implantace

Autor: Bc. Petr Vařák
Ročník: M1
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: Ing. Blanka Švecová, Ph.D.; Ing. Soňa Vytýkáčová; doc. Ing. Pavla Nekvindová, Ph.D.

Skla obsahující měď jsou perspektivními materiály pro fotoniku především díky existenci několika stabilních oxidačních stavů mědi. Skla obsahující jednomocné nebo dvoumocné ionty mědi v povrchové vrstvě disponují vlnovodnými vlastnostmi, oxidační stav Cu(I) navíc vykazuje silnou fotoluminiscenci v modro-zelené oblasti spektra. Nanočástice kovové mědi Cu(0) propůjčují sklu nelineární optické vlastnosti, díky čemuž mají tato skla využití jako plně optické spínače.

Oxidační stav mědi jsme se pokusili ovlivnit použitou technologií dotace a složením hostující matrice skla. Tenké vrstvy obsahující měď byly připraveny metodami iontové výměny a iontové implantace. K přípravě bylo použito několik typů křemičitanových skel lišících se obsahem SiO₂, jednomocných modifikátorů a redukčních činidel. Vzorky byly následně žíhány při teplotě 600 °C po dobu 1 – 5 hodin. U vzorků byla sledována koncentrace mědi, oxidační stav mědi a vlnovodné vlastnosti v závislosti na použité metodě přípravy a složení substrátu. Bylo zjištěno, že množství mědi ve skle závisí na použité metodě dotace a množství Na⁺ iontů ve skle, zatímco oxidační stav mědi je ovlivněn obsahem redukčních činidel a následným žíháním.

Sekce : Anorganická technologie I

Příprava a charakterizace kyslíkové elektrody se zvýšenou delaminační odolností pro vysokoteplotní elektrolýzu vody

Autor: Daniel Budáč
Ročník: B3
Ústav: Anorganická technologie
Školitel: Ing. Filip Karas

Vzhledem k rostoucím nárokům na využití všech dostupných energetických zdrojů dochází v současné době k postupnému rozvoji tzv. vodíkové ekonomiky. Jednu z technologií, na kterých je tento koncept založen, představuje vysokoteplotní elektrolýza vody za užití SOEC (solide oxide electrolyser cell). Výhodou tohoto přístupu je možnost používat neplatinové katalyzátory a také skutečnost, že část potřebné energie je dodána ve formě energie tepelné. Vysoké teploty s sebou však nesou také vysoké materiálové nároky. Kritická je například teplotní roztažnost materiálu elektrod a elektrolytu, jejíž rozdílnost vede k delaminaci jednotlivých vrstev. Ta se týká zejména kyslíkové elektrody, pro kterou se stále hledá optimální materiál. Z práškového YSZ (ytrem dopovaný oxid zirkoničitý) byl připraven elektrolyt, na který byla sítotiskem nanесena kyslíková elektroda tvořena směsí LSM (směsný oxid lanthanu, stroncia a manganu) a YSZ, což mělo zajistit vyšší přilnavost elektrody a předcházet tak delaminaci. Tato směs byla připravena dvěma způsoby – homogenizací komerčních prášků LSM a YSZ a za využití spalovací syntézy. Cílem práce je ověřit elektrochemické vlastnosti této směsné elektrody na základě měření symetrického článku a porovnat elektrodu z materiálu připraveného spalovací syntézou s elektrodou z materiálu komerčního.

Sekce : Anorganická technologie I

Příprava nanostrukturovaných vrstev hematitu anodickou oxidací

Autor: Bc. Tomáš Kotrla
Ročník: M1
Ústav: Anorganická technologie
Školitel: prof. Dr. Ing. Josef Krýsa
Konzultant: Ing. Šárka Paušová, Ph.D.

V dnešní době, kdy dochází k rychlému zmenšování zásob fosilních paliv a růstu emisí CO_2 , je potřeba vyvinout takový zdroj energie, který by byl čistý a zároveň obnovitelný. Velké naděje jsou v tomto ohledu upínány k vodíku. Velice zajímavou cestou přípravy vodíku je fotoelektrochemický rozklad vody za pomoci slunečního záření. K tomuto procesu je ovšem potřeba vhodný materiál pro fotoanodu. Jednou z možností je použití hematitu ($\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$). Nanostrukturované vrstvy hematitu byly připraveny anodickou oxidací dvou typů Fe substrátů - Fe plechu (99,5%) a nanесené Fe vrstvy (tloušťky 100, 300 a 600nm) na transparentním FTO skle. Všechny vrstvy byly po anodické oxidaci kalcinovány, přičemž byl zkoumán vliv podmínek kalcinace na výsledné fázové složení vrstev, které bylo získáno XRD analýzou. Měřitkem fotoaktivity připravených vrstev jsou hodnoty fotoproudu, které jsou diskutovány v souvislosti s jejich strukturou a fázovým složením.

Sekce : Anorganická technologie I

Charakterizace borem dopovaných diamantových elektrod

Autor: Ondřej Kršek
Ročník: B3
Ústav: Anorganická technologie
Školitel: doc. Ing. Martin Paidar, Ph.D.

Pokročilé elektrochemické oxidační procesy na diamantových elektrodách jsou v současnosti intenzivně studovány v technologiích čištění odpadních vod, kde se uplatňují vedle tradičních metod zejména díky schopnosti degradovat širší spektrum organických látek. Odpadá také nutnost používat další chemikálie, jako je tomu například u Fentonovy oxidace.

Největší nároky jsou kladeny na materiál elektrod, které musí kombinovat několik vlastností. Nejdůležitějším faktorem je vysoké přepětí na vývoj kyslíku. To zaručí upřednostnění reakce produkující silná oxidační činidla, které pak oxidují různé organické nečistoty. Dále jsou kladeny nároky na stabilitu a na celkové výrobní náklady elektrod.

Cílem mé práce bylo charakterizovat elektrody pokryté vrstvou borem dopovaného diamantu (BDD), které se již delší dobu jeví jako velmi slibný materiál v tomto odvětví. Měřil jsem 2 vývojové BDD elektrody, které jsem srovnával s komerčně vyrobenou BDD elektrodou a platinovou elektrodou metodou cyklické voltametrie. Určil jsem jejich potenciálová okna na vývoj kyslíku vůči referenční kalomelové elektrodě, dále jsem potenciometricky zkoumal jejich stabilitu. Zároveň jsem sledoval chování titanu jako nosného materiálu BDD vrstvy.

Sekce : Anorganická technologie I

Charakterizace filtrů na úpravu vzduchu pro palivový článek typu PEM

Autor: Miroslav Šmíd
Ročník: B3
Ústav: Anorganická technologie
Školitel: Ing. Jakub Mališ

Palivové články typu PEM představují perspektivní zdroj elektrické energie pro celou řadu aplikací, kde se uplatní některé z jejich výhod, jako jsou vysoká efektivita přeměny chemické energie paliva na elektrickou, tichý provoz a netoxické odpadní produkty. Jednou z jejich hlavních nevýhod je vysoká pořizovací cena zapříčiněná mimo jiné nutností použití katalyzátorů na bázi platinových kovů, jež jsou náchylné k otravám. Problematická tak není pouze čistota vodíku coby paliva, ale také čistota kyslíku/vzduchu coby oxidačního činidla. Použitím okolního vzduchu odpadá nutnost připojení tlakové lahve se stlačeným oxidovadlem, ovšem vyvstává problém s jeho čistotou. Vzduch obsahuje velké množství mechanických nečistot, jako jsou prach, pylové částice a další, které mohou ucpat některé z komponent palivového článku a činit tak problémy s transportem hmoty. Dalšími nečistotami jsou sloučeniny síry, oxidy uhlíku a organické sloučeniny, které mohou otrávit katalyzátor. Z tohoto důvodu je nutné použít vzduch předupravit. Filtry pro tuto aplikaci obsahují různě porézní aktivní uhlí o rozdílné tloušťce vrstvy. Vytipované filtry byly charakterizovány z hlediska tlakové ztráty a jejich schopnosti zadržet některých výše uvedených katalytických jedů, kdy získaná data by měla posloužit k výběru nejvhodnějšího komerčně dodávaného filtru, nebo konstrukci vlastního filtru.

Sekce : Anorganická technologie I

Příprava a charakterizace elektroforeticky nanesených vrstev grafen oxidu

Autor: Jan Tomek
Ročník: B3
Ústav: Anorganická technologie
Školitel: Ing. Jaromír Hnát, Ph.D.

Více než 90% vodíku, označovaného jako palivo budoucnosti, je v dnešní době ve skutečnosti získáváno z fosilních zdrojů. V současné době však, s ohledem na rostoucí zastoupení obnovitelných zdrojů elektrické energie, dochází k rozšiřování zastoupení další technologie - elektrolyzy vody. Z dostupných variant této technologie nachází největší uplatnění alkalická elektrolyza vody a elektrolyza vody s kation selektivní membránou. Výhoda alkalického procesu spočívá v možnosti využití levných a snadno dostupných katalyzátorů, které nejsou založeny na bázi platinových kovů, jako je tomu u konkurenční membránové technologie. V praxi zavedeným materiálem elektrod v průmyslové alkalické elektrolyze vody je nikl. Jeho aktivita však může klesat z důvodu vzniku hydridové vrstvy, ke kterému může docházet v prostředí s vysokou koncentrací vodíku. V nedávné době bylo prokázáno, že tento jev lze omezit, či zcela eliminovat pomocí redukováného grafen oxidu naneseném na niklovou elektrodu. Cílem této práce je analyzovat vrstvy redukováného grafen oxidu, které byly vyloučeny při různých hodnotách proudu na Ni podkladu a tím stanovit optimální způsob nanesení redukováného grafen oxidu na niklovou elektrodu tak, aby bylo dosaženo maximální účinnosti katalyzátoru pro vývoj vodíku v alkalické elektrolyze vody a zajištění jeho dlouhodobé stability.

Sekce : Anorganická technologie I

Hodnocení samočistícího efektu fotokatalyticky aktivních nátěrů

Autor: Bc. Veronika Vyšínová
Ročník: M1
Ústav: Anorganická technologie
Školitel: prof. Dr. Ing. Josef Krýsa
Konzultant: Ing. Michal Baudys, Ph.D.

Práce se zabývá hodnocením samočistícího efektu fotokatalyticky aktivních nátěrů ve venkovním prostředí. Na základě předchozích experimentů byly vybrány vhodné fotokatalyticky aktivní materiály s obsahem oxidu titaničitého, které byly následně aplikovány do vodou ředitelných akrylátových nátěrů. Fotokatalytická aktivita nátěrů byla hodnocena pomocí metody modelových inkoustů založené na reduktivní barevné přeměně barviva Resazurin a Acid Violet 7 a rovněž pomocí oxidativního odbourávání acetaldehydu (dle mezinárodního standardu ISO 22197-2). Hodnocení fotokatalytické aktivity bylo proměřeno v závislosti na době expozice zrychlenému testu stárnutí v QUV panelu. Vzorky vykazující nejvyšší fotokatalytickou aktivitu byly vystaveny venkovní expozici po dobu 6 měsíců s cílem ověření jejich samočistící schopnosti. Tato schopnost byla určena pomocí objektivního měření barevnosti s cílem porovnání barevných změn aktivního a referenčního nátěru.

Sekce : Anorganická technologie II

Studium stárnutí roztoku chloridu barnatého

Autor: Bc. Kateřina Bednářová
Ročník: M1
Ústav: Anorganická technologie
Školitel: Ing. Ivona Sedlářová, Ph.D.

Při využití turbidimetrie ke stanovení koncentrace síranových iontů, jehož podstatou je srážení síranu barnatého pomocí roztoku chloridu barnatého, bylo zjištěno, že stáří připraveného činidla má zásadní vliv na charakter sraženiny síranu barnatého a tím i na hodnotu změřené turbidity. Cílem této práce bylo sledování vybraných vlivů způsobujících určitou změnu vlastností roztoku chloridu barnatého. Byly provedeny experimenty s roztoky chloridu barnatého s různou dobou zrání a/nebo připravenými za různých podmínek. Z výsledků vyplynulo, že „stárnutí“ roztoku chloridu barnatého se ustálí přibližně po dvou týdnech a k podobné změně vlastností tohoto roztoku dojde rovněž po jeho převaření nebo filtraci přes velmi jemnou filtrační přepážku.

Sekce : Anorganická technologie II

Elektrochemická oxidace organických látek

Autor: Bc. Karel Denk
Ročník: M1
Ústav: Anorganická technologie
Školitel: doc. Ing. Martin Paidar, Ph.D.

Elektrochemické metody oxidace organických látek představují vysoce flexibilní způsob řešení problematiky čištění odpadních vod. Při použití elektrod s vysokým přepětím pro vývoj kyslíku mohou nastat dva případy. Pokud je použita nízká proudová hustota, dochází k oxidaci organických polutantů přímo na povrchu elektrody. Při použití elektrod s vysokým přepětím pro vývoj kyslíku v kombinaci s velkými proudovými hustotami dochází nejen k oxidaci organických látek na povrchu, ale i ke generaci oxidačního činidla, které s polutantem reaguje v roztoku. Borem dopovaná diamantová elektroda a aktivované titanové elektrody na bázi $\text{SnO}_2\text{-Sb}$ byly použity při oxidaci modelového polutantu a při zpracování průmyslového kapalného odpadu. Při použití vysokých proudových hustot není vhodné použít aktivovaných titanových elektrod na bázi $\text{SnO}_2\text{-Sb}$, ale je vhodné použít elektrody tvořené vrstvou borem dopovaného diamantu deponovaném na niobu. Účinnost odstranění organických polutantů z roztoku byla stanovena pomocí UV-Vis spektroskopie.

Sekce : Anorganická technologie II

Stanovení specifického povrchu vzorku biocharu metodou fyzikální adsorpce

Autor: Bc. Veronika Liworová
Ročník: M1
Ústav: Anorganická technologie
Školitel: Ing. Miloslav Lhotka, Ph.D.

Biochar (česky biouhel) je porézní materiál organického původu, který vzniká termickým spalováním bez přístupu vzduchu. Je vyráběn především ze zbytkové a odpadní biomasy, kam patří například komposty, zvířecí odpady, dřevní hmota apod. Jeho nejdůležitější složkou je organický uhlík, který tvoří 50 – 90 % celkové hmotnosti.

Cílem práce bylo stanovit specifický povrch vzorku biocharu vyrobeného z topolu. Podstata měření velikosti specifického povrchu tuhých látek spočívá v určení množství plynných molekul, potřebných k pokrytí měřeného povrchu monovrstvou. Ke stanovení specifického povrchu byla použita objemová metoda adsorpce dusíku a oxidu uhličitého. Z těchto dat byly následně sestaveny adsorpční izoterm, ze kterých byl určen specifický povrch a objem mikropórů.

Z výsledků lze konstatovat, že s rostoucí teplotou pyrolýzy roste specifický povrch. Ovšem při dosažení maximální teploty dojde k uzavírání porézní struktury a specifický povrch začne klesat, což může být způsobeno postupnou kondenzací aromatických uhlíků do shluku blížící se grafitu.

Sekce : Anorganická technologie II

Charakterizace svazkového alkalického elektrolyzéru vody s membránou Nafion

Autor: Bc. Michaela Plevová
Ročník: M1
Ústav: Anorganická technologie
Školitel: Ing. Jaromír Hnát, Ph.D.

Alkalická elektrolýza vody je jednou ze tří metod využívaných pro získání vodíku z vody. Hlavní nevýhodou tohoto přístupu je nutnost využití anorganické diafragmy jako separátoru anodového a katodového prostoru a s tím spojené použití koncentrovaného (25 – 30 hm. %) roztoku hydroxidu draselného jako cirkulujícího média. Diafragmu je možné nahradit polymerními anion selektivními membránami, které jsou schopné převzít částečně funkci hydroxidu draselného, což vede ke snížení jeho koncentrace. Tento typ membrán je však při pracovní teplotě elektrolyzéru (70 – 90 °C) nestabilní. Možným řešením je využití polymerních kation selektivních membrán, které vykazují výrazně vyšší stabilitu. Tyto membrány v případě použití hydroxidu draselného transportují draselný kation K^+ , čímž zajišťují iontový kontakt mezi elektrodami. Komerčně nejvíce dostupná je membrána typu Nafion, která je stálá i za vysokých teplot a při vyšších koncentracích používaného cirkulujícího elektrolytu hydroxidu sodného.

Cílem této práce je tedy charakterizovat zátěžové charakteristiky laboratorního svazkového alkalického elektrolyzéru se třemi celami s použitím membrány Nafion N112 při různých koncentracích KOH a při různých teplotách a ověřit tak využitelnost aplikace membrány typu Nafion v alkalické elektrolýze vody.

Sekce : Anorganická technologie II

Příprava kompozitních membrán na bázi polyimidu 6FDA-DAM:DABA a grafen oxidu

Autor: Bc. Jan Ullsperger
Ročník: M1
Ústav: Anorganická technologie
Školitel: Dr. Ing. Vlastimil Fíla, Ing. Violeta Martin

V posledních desetiletích v oblasti separace plyných směsí kromě konvenčních separačních metod nabývají na významu membránové technologie. Navzdory jejich výhodám je v současné době největším problémem, bránícím jejich širšímu použití, nízká propustnost membrán při vysoké selektivitě a jejich dlouhodobá stabilita v průmyslových podmínkách. Vývoj nových membránových materiálů je jedním z možných řešení těchto problémů. V současnosti patří mezi nejrozšířenější materiály, používané při výrobě membrán pro separaci plynů, polymery. Vykazují dobré fyzikálně–chemické vlastnosti a navíc jsou, v porovnání s jinými materiály, vhodné pro větší produkci. Jejich separační účinnost anebo fyzikálně-chemické vlastnosti lze zlepšit zabudováním specifických anorganických mikro- nebo nano-částic do jejich matrice. Takové kompozitní membrány nesou označení „mixed matrix membranes“, zkratka MMM.

V rámci této práce byly připraveny kompozitní membrány na bázi polyimidu 6FDA-DAM:DABA s částicemi oxidu grafenu. U připravených membrán byla provedena strukturní a materiálová charakterizace pomocí metod FTIR, SEM, TGA, DSC a byly stanoveny jejich separační vlastnosti v jednosložkových (He, H₂, CO₂, CH₄) a binárních (CO₂/CH₄) směsích. Připravené MMM byly porovnány se samotnou polymerní maticí.

Sekce : Anorganická technologie II

Vlastnosti polymerních roztoků pro výrobu membrán ve formě dutých vláken metodou inverze fází

Autor: Bc. Jan Ullsperger
Ročník: M1
Ústav: Anorganická technologie
Školitel: Dr. Robert Válek, MemBrain s.r.o

Struktura asymetrických dutých vláken je jeden z hlavních faktorů určující jejich potenciál a použití jako membrány pro separaci plynů – jedná se hlavně o velikost a distribuci pórů, tloušťku selektivní vrstvy, orientaci molekul v selektivní vrstvě a o defektivitu vrstvy. Tyto faktory jsou z velké části ovlivněné podmínkami při výrobě vláken metodou „dry-jet wet“ zvlákňování. Ukazuje se, že vliv na strukturu tenké selektivní vrstvy, resp. na separační výkonnost výsledných dutých vláken, mají tokové podmínky při extruzi polymerních roztoků ve spinneretu. Cílem této práce bylo určení tokových vlastností zvlákňujících roztoků polyetherimid/*N*-Methyl-2-pyrrolidon rozpouštědlo/ethanol srážedlo, tekoucích v soustředném prstenci spinneretu při výrobě dutých vláken. Rotační viskozimetr byl použit k charakterizaci reologických vlastností roztoků. Bylo objeveno Newtonské chování těchto roztoků nezávisle na jejich složení. Kromě složení roztoků se zkoumala závislost velikosti spinneretu na tokové profily ve spinneretu. Newtonský charakter zvlákňujících roztoků způsobil konstantní lineárně-rychlostní resp. smykově-rychlostní profil při určitém průtoku, nezávisle na složení roztoku. Bylo ukázáno, že rozměry spinneretu mají zásadní vliv na smykovou reformaci ve spinneretu. Bylo určeno fázové chování ternární směsi PEI/NMP/EtOH při teplotě 40 °C.

Sekce : Anorganická technologie III

Příprava a charakterizace tenkého filmu Pt/C katalyzátorů pro PEM palivové články

Autor: Bc. Michal Carda
Ročník: M2
Ústav: Anorganická technologie
Školitel: Ing. Tomáš Bystroň, Ph.D.

Nejčastěji využívaným katalyzátorem pro aplikaci v H_2/O_2 palivových článcích s protonově výměnnou membránou (PEM FC) je platina nebo její slitiny ve formě nanočástic nanesených na uhlíkovém nosiči (Pt/C). Charakterizace těchto katalyzátorů je zaměřena zejména na redukci O_2 (ORR), která je klíčová pro výkon FC. Katalytická aktivita je standardně stanovována pomocí rotační diskové elektrody (RDE), na něž je nanesen tenký film (TF) katalyzátoru. Pro středně teplotní FC neexistuje jednoduchá metoda pro charakterizaci katalyzátorů, protože komerční RDE nejsou vhodné do teplot nad $80\text{ }^{\circ}\text{C}$ a je nutné použít vhodnou alternativu, kterou je rotující tyčová elektroda (RTE) vyvinutá na našem pracovišti. S ohledem na rozdílnou hydrodynamiku elektrod je potřeba oba typy rotačních elektrod porovnat v nízkoteplotním systému, kde je možné stanovit jednotlivé transportní parametry O_2 .

Cílem této práce je porovnat RDE a RTE. V první fázi byla optimalizována metoda přípravy TF z hlediska stability a homogenity rozložení Pt. Pro studium distribuce Pt na elektrodě byla využita optická i elektronová mikroskopie. Následně byl optimalizovaný TF testován a pro oba typy elektrod byly stanoveny zdánlivé difúzní koeficienty O_2 . Nakonec byl v programu COMSOL vytvořen 2D model popisující rozdíly v hydrodynamice toku elektrolytu v okolí elektrod.

Sekce : Anorganická technologie III

Výzkum kompozitních membrán na bázi materiálu ZIF-8/Polyimid (6FDA-3,4'-ODA) pro dělení plynů

Autor: Bc. David Dlouhý
Ročník: M2
Ústav: Anorganická technologie
Školitel: Dr. Ing. Vlastimil Fíla

Membránovému dělení plynů je v současné době věnována stále větší pozornost. Klasické separační procesy pro dělení plynů, jako je např. kryogenní destilace, absorpce plynů v kapalinách, adsorpce plynů na pevných látkách nebo chemická reakce plynu s vhodným reaktantem za vzniku pevné látky, jsou často prostorově, investičně a energeticky náročné. Membránové dělení plynů představuje vhodnou alternativu těchto procesů.

Cílem práce bylo nalezení vhodných syntézních podmínek a prekurzorů pro tvorbu kompozitní membrány ZIF-8/PI (6FDA-3,4'-ODA) v jednom kroku. Kompozitní membrány se vyznačují vyšší propustností plynů v důsledku přidání aditiva se zachováním selektivity danou polymerní maticí. ZIF jsou mikroporézní materiály se strukturou izomorfní zeolitům. Materiály ZIF se vyznačují dobrou kompatibilitou s polymery. Polyimidy se řadí mezi polymery s výbornými užitnými vlastnostmi. Vynikají vysokou chemickou, tepelnou a mechanickou stabilitou. Výzkum kompozitních membrán je v současnosti zaměřen především na mísení již připraveného plnidla s roztokem polymeru. V průběhu tvorby membrány je vždy problém s homogenní distribucí částic, jejich agregací, sedimentací a kompatibilitou s polymerem. Syntéza plniva a polymeru v jednom kroku by mohla být vhodným řešením těchto problémů.

Sekce : Anorganická technologie III

Příprava porézní katody pro alkalickou elektrolýzu vody

Autor: Bc. Martin Ďurovič
Ročník: M2
Ústav: Anorganická technologie
Školitel: Ing. Jaromír Hnát, Ph.D.

Vodíkové technologie představují perspektivní způsob konverze energie, využívající jako médium pro její uskladnění právě vodík. Průmyslově nejrozšířenější procesy výroby vodíku jsou parní reforming zemního plynu a parciální oxidace ropy a ropných produktů. Alternativní variantu představuje elektrolýza vody, kdy v průmyslu nachází uplatnění zejména alkalická elektrolýza vody. Aby byla tato technologie energeticky co nejúčinnější, je potřeba zlepšit její procesní charakteristiky. Jedním z klíčových parametrů ovlivňujících účinnost elektrolýzy vody je volba vhodného katalyzátoru. Katalyzátor by měl být cenově dostupný, stabilní v provozním prostředí a měl by vykazovat dobré katalytické vlastnosti pro požadovanou reakci. Zajímavou oblast v této problematice představují slitiny vhodných kovů. Do této skupiny spadá také slitina $\text{Fe}_{60}\text{Co}_{20}\text{Si}_{10}\text{B}_{10}$, u které navíc může být katalytická aktivita při vývoji vodíku navýšena vhodně zvolenou aktivací. Cílem této práce bylo připravit porézní katodu modifikovanou katalytickou vrstvou s obsahem slitiny $\text{Fe}_{60}\text{Co}_{20}\text{Si}_{10}\text{B}_{10}$. Připravena byla série těchto elektrod a pro každou elektrodu byl zvolen jiný způsob aktivace. Vliv aktivace katalyzátoru na celkovou účinnost procesu elektrolýzy byl poté stanoven na základě zátěžových křivek a impedančních spekter získaných za podmínek alkalické elektrolýzy vody.

Sekce : Anorganická technologie III

Moření Ti kyselinou chlorovodíkovou – charakterizace změn v povrchové a podpovrchové vrstvě

Autor: Bc. Rutrlé Jakub
Ročník: M1
Ústav: Anorganická technologie
Školitel: Ing. Tomáš Bystroň, Ph.D.

Elektrolýza vody s protonově vodivou membránou (PEM) je jednou ze slibných metod výroby vodíku. Silně korozivní prostředí v elektrolyzáru však vyžaduje použití vysoce odolných a nákladných materiálů. Výsledná cena elektrolyzáru tak brání uplatnění procesu v průmyslové praxi. Nejvíce korozivní prostředí je přítomno na anodě. Ta je tvořena plynově difúzní vrstvou (GDL) z Ti nebo Ta a katalyzátorem na bázi Ir.

Předchozí experimenty ukázaly, že moření Ti GDL v HCl umožňuje zvýšit proudové hustoty dosažené v elektrolyzáru (při stejném vloženém napětí). Cílem této práce bylo blíže charakterizovat změny, k nimž dochází v povrchové a podpovrchové vrstvě Ti při moření v HCl a vysvětlit tak nárůst výkonu PEM elektrolyzáru při použití mořené GDL. K charakterizaci materiálu byla použita řada experimentálních technik, např. rtuťová porozimetrie, rentgenová fotoelektronová spektroskopie (XPS) či hmotnostní spektroskopie sekundárních iontů. Pomocí prvních dvou metod byla studována změna velikosti a složení povrchu Ti. Poslední zmíněná technika umožnila získat hloubkové profily vybraných prvků v materiálu. Druhým cílem práce byl scale-up PEM elektrolyzáru vody laboratorní velikosti na velikost bližší průmyslovým elektrolyzárum.

Sekce : Anorganická technologie III

Anodická oxidace wolframu

Vliv složení elektrolytu na fotoelektrochemické vlastnosti připravených vrstev

Autor: Bc. Eva Šustková
Ročník: M2
Ústav: Anorganická technologie
Školitel: Ing. Martin Zlámal, Ph.D.

Oxid wolframový je polovodivý materiál s fotokatalytickými vlastnostmi. Na rozdíl od nejvíce rozšířeného fotokatalyzátoru TiO_2 je excitován viditelným světlem, což je výhodné pro aplikace využívající sluneční světlo jako zdroj záření. V současnosti se, kromě fotokatalýzy, věnuje velká pozornost také fotoelektrochemickým vlastnostem fotokatalyzátorů. Především fotoelektrochemický rozklad vody by se v budoucnosti mohl stát jedním ze zdrojů vodíku jako alternativa k fosilním palivům.

V této práci byla anodickou oxidací kovového wolframu připravena vrstva WO_3 . Byly použity rozdílné elektrolyty, vodný a organický obsahující ethylenglykol, dále elektrolyt obsahoval $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ a NH_4F . Plíšek wolframu byl zapojen jako anoda, jako katoda sloužila Pt elektroda.

Cílem této práce bylo porovnat vrstvy připravené ve vodném roztoku a v roztoku ethylenglykolu, a zároveň najít vhodné podmínky anodizace pro vznik vrstvy WO_3 . Dalším cílem bylo srovnat fotoelektrochemické vlastnosti připravených vrstev ve vodném elektrolytu, kdy $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ a NH_4F byly zastoupeny v různých poměrech.

Sekce : Anorganická technologie III

Redukce organického znečištění roztoku H_3BO_3 pomocí pokročilých oxidačních procesů

Autor: Bc. Eva Šustková
Ročník: M2
Ústav: Anorganická technologie
Školitel: Ing. Martin Zlámal, Ph.D.

Tato práce je zaměřena na ověření možnosti použití fotolýzy pomocí UV záření pro degradaci organických látek v prostředí kyseliny borité. Fotolýza patří mezi tzv. pokročilé oxidační procesy (AOP - Advanced oxidation process), které jsou využívány jako účinné metody pro čištění průmyslových a odpadních vod od organických látek. Mezi AOP metody dále patří aplikace silných oxidačních činidel (H_2O_2 nebo O_3), fotokatalýza, Fentonova reakce atd. Práce se zaměřuje na problematiku přítomnosti a odstraňování nežádoucího organického uhlíku (TOC – Total Organic Carbon) ve vodných roztocích energetických provozů.

Cílem této práce je testování účinnosti AOP techniky při snižování koncentrace TOC modelového roztoku z jaderných elektráren, který obsahuje vysoké koncentrace kyseliny borité. Roztoky kyseliny borité jsou používány pro regulaci jaderných reakcí v reaktoru. Jako modelová látka (zdroj TOC) byl použit hydrogenftalát draselný. Byl studován vliv provozních parametrů procesu fotolýzy, jako je průtok či vstupní koncentrace TOC, na účinnost odstraňování organických látek z modelového roztoku.

Sekce : Kovové materiály I.

Využití hlubokomořských konkrecí k sorpci Li z roztoku

Autor: Eva Kristianová
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Hong Vu, Ph.D.

Hlubokomořské konkrece jsou perspektivní polymetalickou surovinou z důvodu vysokého obsahu manganu a dalších neželezných kovů. Konkrece jsou však charakterizovány také vysokou porozitou a velkým reakčním povrchem, čímž se rozšiřuje spektrum jejich využití také do oblasti sorpce, či katalýzy.

V práci byla zkoumána využitelnost surových konkrecí jako sorbentu lithia z vodných roztoků, s potenciální možností jejich následného využití jako surovinového zdroje pro extrakci neželezných kovů po vyčerpání sorpčních schopností.

Sekce : Kovové materiály I.

Preparation of Ag nanoparticles by Tollens method

Autor: Larissa Machado
Ročník: B1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Alena Michalcová, Ph.D.

Silver nanoparticles are very promising material due to their antimicrobial properties. Recently, the application on silver nanoparticles into foot packaging material is investigated. Due to this possible application it is necessary to prepare silver nanoparticles by so called „green way“. It means use only safe material for nanoparticles production. Tollens method of preparation silver nanoparticles is based on reduction of Ag^+ ions from water solution by saccharides.

In this study, the influence of saccharide type and addition of NH_3 and NaOH into reaction mixture on particles size was studied. It was proven that the size of prepared silver particles is dependent on used saccharide. It was also observed that the amount of silver particles and their size distribution is dependent on presence of NH_3 and NaOH in the reaction.

Sekce : Kovové materiály I.

Interakce nanostrukturovaných povrchů slitin TiNbTaSn s modelovým tělním prostředím

Autor: Květa Stehlíková
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jaroslav Fojt, Ph.D.

Expozice materiálu a sledování precipitace hydroxyapatitu z prostředí simulované tělní tekutiny patří mezi metody umožňující predikci bioaktivity povrchu. Z materiálového hlediska je v současné době pozornost zaměřena na beta slitiny titanu. Nanostrukturování povrchu patří k úpravám, který mění bioaktivitu povrchu. Nanostrukturované povrchy vznikají jako výsledek dvou konkurenčních dějů, anodického růstu oxidů a jejich rozpouštění fluoridovými ionty z elektrolytu. V rámci práce byly připraveny nanostruktury různých parametrů na slitinách Ti-25Nb-4Ta-(4-10)Sn. Takto upravené povrchy byly exponovány v modelovém tělním prostředí a byl sledován vliv úpravy povrchu na precipitaci hydroxyapatitu.

Sekce : Kovové materiály I.

Vysoce entropické slitiny FeCoCrNiX připravené konvenčním tavením a práškovou metalurgií

Autor: Bc. Alexandra Šenková
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Filip Průša, Ph.D.

Vysoce entropické slitiny jsou skupinou nových materiálů disponujících vynikajícími vlastnostmi, které v řadě případů překonávají současné slitiny určené pro vysoce náročné aplikace. Vyznačují se ultravysokými hodnotami pevností, vysokou tvrdostí, korozní odolností, tepelnou stabilitou, otěruvzdorností a řadou dalších unikátních vlastností. Jedná se o systémy tvořené většinou pěti hlavními prvky o přibližně ekvatomárním chemickém složení. Uvedené slitiny charakterizuje vysoká hodnota směšovací entropie, v jejímž důsledku dochází ke vzniku tuhých roztoků, Lavesových fází či zcela amorfních slitin. V důsledku velké rozmanitosti atomárních poloměrů jednotlivých prvků dochází ke vzniku značných pnutí v krystalové mřížce, projevujících se vysokou pevností těchto slitin, dosahující i více než 2000 MPa.

V rámci práce byly připraveny slitiny FeCoCrNiX (X = Mn, Cu, Nb) ekvatomárního složení metodou klasické tavné metalurgie a dále kombinací mechanického legování (ML) a kompaktizace slinováním v plazmatu (SPS). Pomocí optické a elektronové (skenovací, transmisní) mikroskopie byla zkoumána mikrostruktura, rentgenovou difrakční a fluorescenční analýzou zkoumáno chemické a fázové složení. Mechanické vlastnosti byly zjištěny zkouškami pevnosti v tlaku a měřením tvrdosti.

Sekce : Kovové materiály I.

Optimalizace podmínek přípravy slitiny Fe-Al-Si mechanickým legováním

Autor: Tomáš Vanka
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Kateřina Nová

Slitiny tvořené intermediálními fázemi Fe-Al a Fe-Si jsou perspektivními materiály pro použití v náročných aplikacích vyžadujících výborné mechanické vlastnosti a oxidační odolnost při zvýšených teplotách a při nižší hustotě než u běžně používaných slitin niklu nebo železa. Metoda mechanického legování umožňuje tyto materiály vyrobit přímo z prášků čistých kovů a navíc dosáhnout ultrajemnozrné struktury. Při použití vhodné techniky zhutňování, jako je slinování metodou „Spark Plasma Sintering“ je možné tuto jemnozrnou strukturu zachovat i v kompaktním materiálu. Cílem této práce bylo optimalizovat podmínky přípravy slitiny FeAl₂₀Si₂₀ s využitím těchto technologií. Byla popsána závislost mikrostruktury a fázového složení této slitiny v závislosti na podmínkách mechanického legování a slinování.

Sekce : Kovové materiály I.

Příprava a charakterizace slitiny Mg-2Y-1Zn uvažované pro aplikace v medicíně

Autor: Jaroslav Vavřík
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jiří Kubásek

Tato práce se orientuje na charakterizaci slitiny Mg-2Y-1Zn, která vyniká svými mechanickými i korozními vlastnostmi a je uvažována pro aplikace v oblasti medicíny např. jako fixační implantáty pro zlomeniny, stenty a různé výztuže. V závislosti na zpracování této slitiny dochází k zásadnímu ovlivnění struktury, především pak tvorbou různých intermetalických fází vyznačujících se rozdílným efektem na mechanické i korozní vlastnosti materiálu.

Slitina byla charakterizována v litém stavu, tepelně zpracovaném stavu a v obou těchto stavech po následné extruzi za tepla. Hodnocena je v rámci práce mikrostruktura, tvrdost a mechanické vlastnosti v tahu a tlaku. Zpracováním této slitiny bylo dosaženo velmi dobrých hodnot meze pevnosti a meze kluzu. Pozorované tažnosti se však pohybovaly pouze v rámci několika procent.

Sekce : Kovové materiály I.

Mikrostruktura slitiny Al-Si odlité technologií rheocasting

Autor: Jana Vítková
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: prof. Dr. Ing. Dalibor Vojtěch

Rheocasting je moderní metoda tlakového lití, při které se materiál lije do formy v polotuhém stavu. Slitina se za nepřetržitého míchání nechá zchladnout do polotuhého („máslovitého“) stavu a poté se natlačí do formy. Vznikne tak odlitek s homogenní strukturou a lepšími mechanickými vlastnostmi než při běžném lití pod tlakem.

V této práci jsou sledovány rozdíly v mikrostruktuře slitiny AlSi7Mg0,3 lité metodou rheocasting s a bez tepelného zpracování, lité do pískové formy s tepelným zpracováním a slitiny AlSi9Cu3(Fe) lité pod tlakem bez tepelného zpracování.

Sekce : Kovové materiály II.

Použití esenciálního media na testování bioaktivity materiálů

Autor: Petra Jarolímová
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Ing. Luděk Joska, CSc.

Bioaktivita materiálů je hodnocena obvykle v modelových roztocích simulujících tělní prostředí na základě pouze anorganického solného složení. Jedná se zejména o fyziologický roztok a simulovanou tělní tekutinu. V lidském organismu dochází ke komplexní interakci materiálů s biologickým prostředím. Pro buněčné testy se používají tzv. „esenciální media“ (MEM), obsahující jak anorganické, tak organické komponenty (proteiny).

V práci byly určeny podmínky pro testování bioaktivity titanových slitin v prostředí pro buněčné studie - komerčním Eagles MEM roztoku a stejném modelu s přídavkem hydrogenuhličitanu sodného a biologického pufru. Bylo porovnáváno chování slitin s hladkým a nanostrukturovaným povrchem. Expozice byly doplněny souborem elektrochemických měření, umožňujících monitorování probíhajících dějů.

Sekce : Kovové materiály II.

Vliv složení atmosféry na průběh reaktivní sintrace v systému Ni-Ti

Autor: Barbora Kadlecová
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Ing. Pavel Novák, Ph.D.

Materiály s tvarovou pamětí, do kterých řadíme i slitinu Ni-Ti, našly své uplatnění zejména díky výborným vlastnostem spojeným s jevem tvarové paměti. Schopnost tvarové paměti nese intermetalická fáze NiTi. Mimo ni se v systému vždy vyskytuje fáze Ti₂Ni, která je nežádoucí kvůli své tvrdosti a křehkosti. Výroba je náročná z důvodu náchylnosti na přesné chemické složení produktu. Běžné postupy tavné metalurgie toto složení nezaručují, a proto byla v práci volena prášková metalurgie s využitím reaktivní sintrace.

Byl studován vliv složení reakční atmosféry a vliv rychlosti ohřevu na vznik nežádoucí Ti₂Ni fáze. Výsledky ukazují, že výrazný vliv složení reakční atmosféry z hlediska množství vznikající fáze se uplatňuje především při velmi vysoké rychlosti ohřevu, při relativně pomalejší rychlosti ohřevu je tento vliv zanedbatelný. Z hlediska morfologie fáze dochází ke zjemnění struktury vlivem působícího kyslíku, a to nezávisle na rychlosti ohřevu.

Sekce : Kovové materiály II.

Příprava porézní hořčíkové slitiny WE43

Autor: Bc. Kateřina Mertová
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Alena Michalcová, Ph.D.

V medicíně je velká pozornost věnovaná biodegradovatelným kovovým materiálům. Jejich potenciální využití přináší výhody zejména v oblastech traumatologie a ortopedie. Za nejvhodnější kovový prvek je vzhledem ke svým významným funkcím v lidském organismu a netoxicitě i při vysokých dávkách považován hořčík. Jednou z konkrétních možností využití hořčíku a jeho slitin je aplikace porézních scaffoldů sloužících např. jako náhrada kostní tkáně. Porézní materiály se svým chováním blíží lidské kosti, vyznačují se obecně vyšší biokompatibilitou a snižují pravděpodobnost odmítavé reakce v organismu příjemce implantátu. Přítomnost pórů napomáhá také prvotnímu uchycení a proliferaci buněk na povrchu materiálu a následnému prorůstání kostní tkáně strukturou implantátu. Cílem této práce byla příprava a charakterizace hořčíkové slitiny Mg-4Y-3Nd metodami práškové metalurgie. Vstupním materiálem byl prášek slitiny Mg-4Y-3Nd připravený metodou atomizace v plynu. Postupy práškové metalurgie zahrnovaly slinování v trubkové peci či slinování v plazmatu (SPS) za různých podmínek. Výsledky prokázaly, že ke slinutí materiálu dochází již po 1 hodině při teplotě 550°C v trubkové peci, či po 10 minutách při teplotě 500 °C v rámci metody SPS. Výsledné postupy budou následně využity k přípravě porézních materiálů na bázi této slitiny.

Sekce : Kovové materiály II.

Elektrochemická příprava nanostrukturovaných povrchů titanových slitin řízená vysokonapětovým zdrojem

Autor: Jan Pinc
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jaroslav Fojt, Ph.D.

Nanostrukturované povrchy slitin titanu jsou v dnešní době zkoumány i z hlediska potenciálního využití v oblasti biomateriálů. Tyto povrchy zlepšují adhezi a proliferaci buněk a urychlují primární osseointegraci. Jedním z hojně využívaných způsobů přípravy nanostrukturovaných povrchů je anodická oxidace ve specifickém elektrolytu s vysokým obsahem fluoridových iontů. V rámci práce byla testována příprava nanostruktur na slitinách Ti-35Nb-(2-4)Zr připravených pomocí práškové metalurgie. Anodická oxidace byla realizována s využitím poloprovozního napětového zdroje. Zkoumán byl vliv expozičních podmínek a výchozího stavu povrchu materiálu na parametry výsledné nanostruktury.

Sekce : Kovové materiály II.

Změny mikrostruktury a mechanických vlastností oceli při dopravní nehodě

Autor: Jakub Šesták
Ročník: B1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Ing. Pavel Novák, Ph.D.

Automobilový průmysl v dnešní době velice dbá při výrobě nových vozidel na bezpečnost, ať už posádky vozidla, tak i chodců. Materiály pro automobily jsou proto charakterizovány z pohledu mechanických vlastností a vozidla jsou důkladně testována standardizovanými bezpečnostními testy. Pokud pak při provozu vozidla dojde k havárii a vozidlo není příliš poničeno, a může být uvedeno znovu do provozuschopného stavu, nastává otázka, zda poškozené díly vyměnit, nebo je opravit. Základní požadavkem v tomto rozhodnutí je cena. Některé díly ani není možné opravit a proto musí být vyměněny. Jiné díly, jako například vnější plechování, mohou být opraveny, ale jejich bezpečnost po opravě se již netestuje.

Tato práce je zaměřena na popis změn mechanických vlastností a mikrostruktury plechu, který se využívá na vnější plechování automobilu, při nehodě. V této práci byly použity materiály, které se řadí do nízkopevnostních ocelí. Cílem této práce bylo porovnání nedeformovaného, tedy nového materiálu s deformovaným materiálem po havárii. Bylo zjištěno, že v případě testované deformace nedochází vlivem opravy materiálu vnějšího plechu karoserie k výrazné změně ve struktuře nebo mechanických vlastnostech, které by ohrozily bezpečnost posádky.

Sekce : Kovové materiály II.

Nové nástrojové materiály na bázi intermetalických sloučenin železa

Autor: Zbyněk Veselka
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Ing. Pavel Novák, Ph.D.

V současné době se pro výrobu nástrojů hojně využívají materiály jako slinutý karbid WC či nástrojové oceli legované wolframem. V těchto materiálech, zvláště v prvním z nich, je vysoce zastoupen drahý a strategický wolfram. Snahou evropských zemí, které mají nedostatek zdrojů wolframu, je nalézt alternativu ke slinutému karbidu WC.

V této práci byla zkoumána vhodnost intermetalických kompozitů, připravených mechanickým legováním prášků nástrojových ocelí hliníkem a následnou kompaktizací metodou SPS, jako možné náhrady slinutého karbidu WC, popř. nástrojových ocelí legovaných wolframem. Byly zkoumány mechanické a tribologické vlastnosti intermetalických kompozitů. Výsledky byly porovnány s vlastnostmi výchozích nástrojových ocelí kompaktizovaných rovněž metodou SPS.

Sekce : Kovové materiály II.

Vliv podmínek přípravy na vlastnosti slitiny Mg-Nd-Zn

Autor: Ilona Voňavková
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jiří Kubásek

Hořčíkové materiály mohou nalézt uplatnění v oblasti biodegradovatelných implantátů, které jsou v organismu postupně odbourávány, aniž by došlo ke vzniku pro organismus toxických produktů. Pro zlepšení mechanických vlastností a korozní odolnosti hořčíku jsou připravovány slitiny s prvky vzácných zemin. Nejdostupnějším prvkem je v tomto ohledu neodym. Slitina Mg-3Nd-0,5Zn je již delší dobu studovaným materiálem a vyznačuje se velmi dobrými mechanickými vlastnostmi i zvýšenou korozní odolností. Vlastnosti této slitiny se však významně odvíjí od typu zpracování. Nejlepších vlastností je obecně dosahováno zpracováním materiálu intenzivní plastickou deformací (extruze, ecap) v kombinaci s vhodným tepelným zpracováním. Tato práce je orientována na přípravu a charakterizaci slitiny Mg-3Nd-0,5Zn připravenou odléváním a následnou extruzí. Materiál byl připraven extruzí lité a tepelně zpracované slitiny a získané výsledky poukázaly na zásadní rozdíly ve vlastnostech finálních produktů v závislosti na podmínkách přípravy.

Sekce : Kovové materiály - restaurování

Konzervace německého bodáku Mauser vz. 84/98

Autor: Václav Gerstnerí
Ročník: B3
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Šárka Msallamová, Ph.D.; Jaroslav Prášil, restaurátor s licenci

Německý bodák Mauser vz. 84/98 byl restaurován v rámci předmětu Semestrální práce II. Jedná se o archeologický nález z Orlických hor. Podle odkrytého sériového čísla byl předmět vyroben v roce 1935 firmou Friedrich Herder Abr. Sohn. Před zásahem byl bodák pokryt silnou vrstvou korozních produktů železa, která znemožňovala jeho vyjmutí z pochvy.

Samotná konzervace byla provedena na základě historického a materiálového průzkumu. Materiálový průzkum spočíval ve zjištění rozsahu korozního napadení, složení korozních produktů a povrchových úprav. Bodák byl vyjmut z pochvy a korozní produkty byly odstraněny až na pomezí základního materiálu. Povrch byl následně stabilizován a zakonzervován. V závěru byl pro předmět vyroben box z nekyselého kartonu a stanoven doporučený ochranný režim.

Sekce : Kovové materiály - restaurování

Korozní chování olova v prostředí alifatických monokarboxylových kyselin

Autor: Mgr. Bc. Jan Kočí
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Milan Kouřil, Ph.D.

Práce porovnává inhibiční vlastnosti ochranných monokarboxylátových vrstev vzniklých z vodného či ethanolového roztoku kyseliny dodekanové na olověných vzorcích. Tyto ochranné vrstvy byly vytvářeny ponorem čistě olověných vzorků trojího typu (vybroušených, korodovaných uhličitánem sodným, čištěných potenciostaticky v kyselině sírové) po dobu 24 hodin do roztoků kyseliny dodekanové o koncentraci $c=0,05 \text{ mol/l}$. Takto ochráněné vzorky byly dvě hodiny exponovány v roztoku neutralizované kyseliny octové o koncentraci $c=0,05 \text{ mol/l}$, což simulovalo prostředí, kterému mohou být vystaveny historické olověné buly či jiné olověné předměty v zastaralých muzejních depozitářích s různými papírovými a dřevěnými obaly.

Pomocí elektrochemických metod byl zjišťován především vliv rozpouštědla a typu povrchu vzorku na tvorbu ochranných vrstev, potažmo na korozní rychlost olova. U vzorků byl měřen polarizační odpor, potenciodynamická křivka, smáčivost povrchu a složení ochranné vrstvy.

Z výsledků vyplynulo, že nejvhodnější kombinací pro ochranu historického olova proti napadení parami kyseliny octové by byl dodekanoát sodný (hydroxidem sodným neutralizovaná kyselina dodekanová) ve vodném roztoku o koncentraci $c=0,05 \text{ mol/l}$, aplikovaný na nijak neupravované, uhličitany přirozeně korodované, olověné vzorky.

Sekce : Kovové materiály - restaurování

Halapartna

Autor: František Míček
Ročník: B3
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jiří Děd, CSc.; Jaroslav Prášil, restaurátor s licencií



Halapartna z konce 18. století je vyrobena ze svářkového železa. Skládá se z hrotu, břitu, háku, tuleje, per (kování ratiště) a v tomto případě i dochovaného fragmentu ratiště. Předmět byl mechanicky poškozen, chyběla horní část břitu a na háku byla prasklina téměř v celé tloušťce materiálu. Celý povrch

kovové části byl pokryt vrstvou korozních produktů železa, korozí byla nejvíce napadena pera, pravděpodobně v důsledku kontaktu s fragmentem ratiště. Fragment ratiště se velmi snadno drotil. Metalografickou analýzou odebraných vzorků bylo zjištěno, že restaurovaná halapartna byla vyrobena ze svářkového železa s četnými struskovými vměstky. V úvodu restaurování předmětu byl vyjmut dřevěný fragment ratiště, ten byl vakuově konsolidován roztokem paraloidu B72. Během restaurování byly mechanicky otryskáním odstraněny korozní produkty a zbylé korozní produkty na povrchu předmětu stabilizovány roztokem 10% kyseliny fosforečné v ethanolu s taninem. Následně byla doplněna chybějící část břitu a místa odběru vzorků epoxidovou pryskyřicí s kovovým plněním, ta byla poté barevně sjednocena s okolním povrchem. Povrch železné části předmětu byl zakonzervován mikrovoskem REVAX® v benzínu a nasazen na nové ratiště. Na závěr byl navržen ochranný režim s ohledem na umístění a další využití předmětu.

Sekce : Kovové materiály - restaurování

Využití solí monokarboxylových kyselin pro ochranu olova v parách kyseliny octové

Autor: Lucie Prchalová
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Milan Kouřil, Ph.D.; Mgr. Zuzana Pecenová

Olověné buly, které jsou součástí historických dokumentů, se často nachází v nevyhovujících podmínkách. Dřevo a obalové materiály, jako je například lepenka, uvolňují těžké organické kyseliny, které působí na olovo degračně. Vlivem par kyseliny octové se ve vlhké atmosféře na olovu vytváří objemné korozní produkty, které nemají soudržný charakter, a dochází k jejich odlupování.

Jednou z možností, jak ochránit olovo před další korozí, je využití roztoků monokarboxylových kyselin, které reakcí s olovem a jeho korozními produkty vytváří ochrannou vrstvu. Čím má kyselina delší uhlíkatý řetězec a vyšší koncentraci, tím je v ochraně olova účinnější. Roztoky jsou nanášeny na korodovaný povrch ponorem olověného čidla po dobu 24 hodin. V této práci je hodnocena využitelnost sodných solí kyseliny dekanové a undekanové o koncentraci $0,01 \text{ mol.l}^{-1}$ a $0,05 \text{ mol.l}^{-1}$ pro protikorozní ochranu olova. Soli jsou aplikovány na povrch vzorků s korozními produkty na bázi uhličitánů a na povrch po odstranění elektrochemickou cestou. K posouzení účinnosti je použita rezistometrická metoda.

Sekce : Kovové materiály - restaurování

Restaurování francouzských stolních kyvadlových hodin

Autor: Lenka Reinerová
Ročník: B3
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Šárka Msallamová, Ph.D.; Vojtěch Ouřada, Dis.



Jedná se o restaurování a konzervování stolních hodin francouzského typu. Hodiny pocházející z 19. století, napodobující styl rokoko jsou vlastnictvím Jihomoravského muzea ve Znojmě. Práce zahrnuje materiálový průzkum předmětu, včetně analýz materiálů a způsob výroby předmětu. Předmět se skládá z odlévaného i válcovaného zinku a plátkem zlacené mosazi, zpracované též odléváním i válcováním. Další součástí práce je umělecko-historický průzkum, včetně hledání analogií k druhotně vyrobenému rámečku se záklopkou, sloužícímu pro přístup k hodinovému strojků. Hlavní částí je samotný restaurátorský zásah. Jedná se o konzervaci materiálů, ale také výrobu doplňků a náhrad za nevhodné druhotné doplňky, jako například zmíněný rámeček. Součástí restaurování bylo také obnovení zlacení na některých částech hodin. Práci zakončuje určení vhodných podmínek uložení

předmětu, které by měl vlastník dodržovat pro zachování předmětu v jeho celistvosti a dosavadním stavu po restaurování.

Sekce : Kovové materiály - restaurování

Restaurování-konzervování barokního dveřního zámku **1720 - 1740**

Autor: Jan Růžička
Ročník: B2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Vojtěch Ouřada, DiS.



Vrchní pravý dveřní zámek s obdélníkovou kazetou a německým ústrojím pochází ze sbírek Regionálního muzea v Kolíně. Kaplička, čep klíče, zámkové zábrany a jejich roubení je zdvojené, což je pro středoevropské dveřní zámky poloviny 18. století typické. Volutový, C ' dekor krycí desky kazety je v barokním řádu přísně symetrický, podložní deska je zdobena dvěma tepanými konvexními volutami. Štítek, jež byl umístěn na vnější straně dveří, se dochoval navlečený na dřívku vnější kliky. Klíč k zámku bohužel chybí. Restaurátorský průzkum

prokázal přítomnost nepůvodního olejoprskyřičného degradovaného a podkorodovaného nátěru, jež ztratil svou ochrannou i estetickou funkci a vzhledem ke kyselé povaze měl na základní kovový materiál negativní vliv. Původní povrchovou úpravu památky tvoří žárově nanesená vrstva cínové slitiny. Ta je v důsledku nedostatečně pečlivého vypláchnutí korozi stimulujícího roztoku letovací vody a zvýšené vlhkosti během uložení poškozena korozi základního železného materiálu. Restaurátorský zásah zahrnoval demontáž, čištění, odstranění korozních produktů železa, jež nebyly pevně spojeny s podkladem, stabilizaci povrchu roztokem taninu, sušení, konzervaci mikrokrystallickým voskem a montáž.

Sekce : Kovové materiály - restaurování

Raná metalurgie mědi ve starověkém Egyptě **– případová studie na materiálu z Ägyptisches Museum** **der Universität Leipzig**

Autor: Bc. Jiří Kmošek
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Šárka Msallamová, Ph.D.

Projekt je zaměřen na materiálový průzkum vybraného souboru předmětů z lokalit starověkého Egypta a Nubie, které se nacházejí ve sbírkách Ägyptisches Museum – Georg Steindorff – der Universität Leipzig. Zkoumané předměty byly objeveny na několika významných nalezištích: Abydos, Abusir, Giza a Aniba. Prezентují vývoj metalurgie mědi ve starověkém Egyptě od první dynastie (přibližně 3100 – 2900 př. n. l.) až téměř ke konci Nové říše (přibližně 1200 př. n. l.). Soubor 86 analyzovaných předmětů a téměř 100 vzorků pokrývá různé typologické skupiny předmětů, jako jsou funkční nástroje, jejich modely, nádoby, zrcadla, atd. Přírodovědné analýzy byly při studiu předmětů využity s cílem získat detailní informace o chemickém a fázovém složení předmětů, s využitím širokého spektra analytických technik. Všechny předměty byly dokumentovány rentgenograficky a složitější předměty pomocí počítačové rentgenové tomografie. Za účelem lepšího porozumění výrobním technologiím a mechanickým vlastnostem materiálu byly vybrané předměty studovány metalografickými metodami v kombinaci s měřením mikrotvrdosti. Analýzy chemického složení byly provedeny metodami XRF, SEM/EDS a NAA, s cílem charakterizovat použité slitiny a přítomné doprovodné prvky. Za účelem určení přibližné provenience měděných rud, použitých při výrobě předmětů, byly metodou MC-ICP-MS ve vybraných vzorcích analyzovány poměry stabilních izotopů olova. Na souboru analyzovaných předmětů je jasně čitelný vývoj slitin použitých napříč sledovaným obdobím a geografickými oblastmi. Všechna získaná analytická data byla statisticky vyhodnocena v kontextu prostorové distribuce, datace a funkce analyzovaných předmětů.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Příprava a charakterizace vysoceporézní hydroxyapatitové **keramiky**

Autor: Anastasia Bridneva
Ročník: M1
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Eva Gregorová, CSc.

Práce je zaměřena na přípravu a charakterizaci porézní hydroxyapatitové keramiky. První část se zabývá reologickým chováním hydroxyapatitových suspenzí; nalezením optimálního typu ztekutiva a optimální koncentrace lící suspenze. Bylo odzkoušeno 6 typů ztekutiv a na základě měření závislosti smykového napětí a zdánlivé viskozity byla stanovena jako vhodná suspenze s koncentrací 35 hm.% hydroxyapatitu a 0,7 hm.% Dolapixu CE64. Do vodné suspenze byla přidána pórotvorná a tělesotvorná látka, suspenze byla homogenizována 6 hodin na třepačce, nalita do kovové formy a 4 hodiny udržována při teplotě 80 °C. Vyjmutý vzorek byl následně vysušen a vypálen na teplotu 850 °C s dobou výdrže 4 h. Pomocí rentgenové fázové analýzy bylo prokázáno, že při této teplotě je jedinou přítomnou fází hydroxyapatit. Charakterizace mikrostruktury pak byla provedena na snímcích zhotovených na optickém a elektronovém mikroskopu z leštěného nábrusu.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Testování biopersistence skelných vláken in-vitro

Autor: Ingrid Czudková
Ročník: M1
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: prof. Ing. Aleš Helebrant, CSc.
Konzultant: Ing. Helena Hradecká

V současné době je snaha nahradit azbest, který způsoboval různá onemocnění, novými typy skleněných vláken, která jsou rozpustná v plicích. Rozpouštění vláken lze sledovat pomocí dvou metod – in-vivo a in-vitro testy.

V bakalářské práci bylo testováno rozpouštění 4 typů komerčně vyráběných skleněných vláken (E-vlákná, vlákna ANTI-CRACK HD, Promaglaf 1200 a Promaglaf 1250) do roztoku SLF. Modelové testy loužení probíhaly formou statických testů při teplotě 36,5°C po dobu 10 – 60 dní. Ve výluzích bylo měřeno pH, byly sledovány hmotnostní úbytky vláken a byla stanovena koncentrace Si, Ca a Mg metodou AAS.

Z výsledků vyplývá, že E-vlákná se rozpouštějí inkongruentně, ostatní prakticky kongruentně. Dále je patrné, že v prostředí SLF o pH 7,4 se vlákna rozpouštějí výrazně více než v SLF o pH 4,5. V SLF o pH 7,4 se dobře rozpouštějí vlákna Promaglaf 1200, Promaglaf 1250 i E-vlákná, naproti tomu vlákna ANTI-CRACK HD jsou rozpustná minimálně. V SLF o pH 4,5 se všechna vlákna rozpouštějí málo. Z výše uvedeného vyplývá, že vlákna ANTI-CRACK HD lze při vdechnutí do plic považovat za zdravotně nebezpečná, vlákna Promaglaf 1200, Promaglaf 1250 a E-vlákná mohou být považována za méně škodlivá.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Vliv složení roztoků a podmínek in vitro testů na rozpouštění skelných vláken

Autor: Aneta Hepnerová
Ročník: M1
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: prof. Ing. Aleš Helebrant, CSc.
Konzultant: Ing. Helena Hradecká

Cílem této práce bylo testovat rozpustnost jednoho typu E-vláken v různých simulovaných plicních roztocích (simulated lung fluid - SLF). Byly připraveny tři typy korozních roztoků - SLF, SLF bez CaCl_2 a MgCl_2 a demineralizovaná voda. Všechny tyto roztoky měly pH upravené na hodnotu 7,4, což je hodnota pH extracelulární plicní tekutiny, ve které začíná rozpouštění cizorodých částic. Sledován byl vliv chemického složení SLF a vliv podmínek in-vitro testů na kinetiku rozpouštění tohoto typu vláken. Pro porovnání byly provedeny statické testy s mícháním vzorků (na třepačce) a bez míchání vzorků (v biologickém termostatu). Výsledkem byly časové závislosti koncentrací složek (Si, Ca a Mg) přešlých z vláken do výluhu (AAS) a hmotnostních úbytků vláken.

Z výsledků vyplývá, že vlákna se rozpouštějí srovnatelně v SLF a v SLF bez CaCl_2 a MgCl_2 . Výrazně méně se vlákna rozpouštěla v demineralizované vodě s upraveným pH. Míchání vzorků rychlost rozpouštění vláken za podmínek testu (0,1 g vláken do 100 ml roztoků, teplota 36,5 °C, doba loužení 1 – 21 dní) neovlivnilo. Hmotnostní úbytky vláken v SLF a v SLF bez CaCl_2 a MgCl_2 po 40 dnech jsou srovnatelné s výsledky testu, který byl proveden na krysách v akreditované laboratoři.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Sklo s nanočásticemi Ag⁰ pro elektrooptické modulátory

Autor: Cecilie Hornofová
Ročník: B2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: doc. Dr. Ing. Martin Míka, Ing. Kristýna Rysová

Cílem práce bylo připravit vzorky skla s nanočásticemi Ag⁰ pro elektrooptické modulátory světla, včetně srovnávacího vzorku bez nanočástic, a změřit jejich optické vlastnosti. Takové sklo je potenciálně vhodným materiálem pro systémy zpracovávající optické signály na principu elektrooptického jevu, kdy se využívá toho, že intenzita indexu lomu je variabilní díky její závislosti na přiloženém napětí. Jako suroviny pro sklo byly zvoleny oxidy těžkých kovů s vysokým protonovým číslem, dále oxid stříbrný, zdroj pro tvorbu nanočástic, a oxid antimonu, jako redukční činidlo. Směs oxidů byla homogenizována mísením v třecí misce a následně tavena v PtRh kelímku v superkanthalové elektrické peci. Při konstantní teplotě 1050 °C bylo sklo po vyčeření dvakrát mícháno v patnáctiminutových intervalech, kdy celková doba tavení byla 60 min. Vzorek byl odlit do kovové formy o 120 °C a následně ochlazen do dosažení laboratorní teploty. Poté byly vyvíjeny nanočástice Ag⁰ zahřátím na 350 °C po různou dobu v rozsahu 5 až 20 minut v temperovací elektrické peci a měřeny optické vlastnosti připraveného skla.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Skla dopovaná Eu a Tb pro aplikace v medicíně

Autor: Simona Chrenová
Ročník: M1
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: doc. Dr. Ing. Martin Míka, Ing. Kristýna Rysová

Cílem práce bylo připravit sodnozinečnatokřemičitá skla dopovaná europiem a terbiem a porovnáním jejich transmisních, emisních a excitačních spekter nalézt jejich uplatnění v medicíně. Laserová skla jsem připravovala oxidační a redukční tavbou. V obou případech byly nejprve naváženy suroviny a poté byla směs homogenizována 10 minut v třecí misce. Tavení probíhalo v superkanthalové peci. Tavící teplota oxidačně připravených luminoforů byla 1480°C. U luminoforů obsahujících redukující křemík byla tavící teplota zvýšena na 1500°C a osvědčilo se použití korundového kelímku na rozdíl od PtRh použitého při oxidační tavně. Důležité bylo i předeřtí kelímku před vložením do tavící pece. Bez předeřtí kelímek praskal. V obou případech tavení probíhalo 2h a tavící teplota byla 10 min před koncem tavně zvednuta o 50°C, z důvodu lepšího odlévání. Po utavení byl vzorek odlit do nerezové formy a temperován v chladicí peci 1h na 550°C. Poté vzorek chladl až na laboratorní teplotu. Připravené luminofory lze použít např. ve fotodynamické terapii (Photodynamic therapy, PDT), využívané při diagnostice a léčbě tumorů, s optimálním rozmezím 600-700 nm a zdrojem buzení v rozmezí 250-380 nm vlnové délky. Nejvýraznější luminiscence nastává okolo 1000 nm. Výhodou záření generujícího v této oblasti je hlubší penetrace do tkáně, čehož se využívá ve fyzioterapii.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Vlastnosti nových typů biorozpustných vláken

Autor: Bc. Eva Kohoutová
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Jan Macháček, Ph.D.

Práce navazuje na předešlé experimentální sledování čtyř biorozpustných vláken ve formě izolačních rohoží. Potvrdilo se, že ve vláknech při tepelné expozici krystalizuje cristobalit, který je klasifikován jako karcinogen I. třídy a je tudíž zdravotně závadný (přestože výrobci tvrdí opak). Proto byly rohože podrobeny měření dalších fyzikálních vlastností a parametrů jako je hustota, množství granulí, měrný povrch aj. V neposlední řadě byl též proveden dynamický průtokový korozní test, který je schopen simulovat lidské prostředí plic a to intracelulární i extracelulární a dokázat tak, zda se vlákna v plicích rozpouštějí či nikoliv. Tento průzkum je zatím díky své časové náročnosti v počátcích, nicméně první výsledky pro demonstraci problému jsou hotovy.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Hydratácia sulfátovápenatého popolčeka

Autor: Bc. Július Kuzma
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Doc. RNDr. František Škvára, DrSc.

Pri výrobe elektriny v českých elektrárnách spaľujúcich hnedé uhlie vznikajú milióny ton sekundárnych energetických produktov ročne. Táto práca študuje úletový popolček a fluidný (sulfátovápenatý) popolček zo suchého odsírovania za použitia metód XRD, SEM a stanovenia voľného CaO.

Úletový popolček vzniká pri teplote 900 – 1100 °C, má guľovité častice s prevahou kremičitej sklenej fázy doprevádzanej nespáliteľnými látkami pochádzajúcich z uhlia. Sulfátovápenatý popolček vzniká pri spaľovaní práškového hnedého uhlia za prídania mletého vápenca pri teplote do 850 °C, kedy dochádza k reakcii vápenca s SO₂. Obsahuje CaSO₄ anhydrit II, zvyšky CaO a čiastočne spečené častice nespáliteľných aluminosilikátových látok. Úletový popolček reaguje s vodou len obmedzene, zatiaľ čo sulfátovápenatý popolček s vodou reaguje za vzniku hydratačných produktov ako ettringit a čiastočne C-S-H fázy. Vznik ettringitu spôsobuje objemovú nestálosť zmesí so sulfátovápenatým popolčekom.

V práci bola ďalej študovaná hydratácia zmesi úletový popolček – sulfátovápenatý popolček - Ca(OH)₂ za použitia röntgenovej difrakcie, kalorimetrie a sledovania vývoja pevností. Práca je podporovaná spoločnosťou ČEZ Energetické produkty s.r.o.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Optimalizácia zloženia nových zdravotne nezávadných skiel

Autor: Mária Dobáková
Ročník: M1
Ústav: Skla a keramiky
Školiteľ: Ing. Miroslav Rada, CSc.

Cieľom práce bol návrh nových zložení skiel bez obsahu olova, arzénu a bária so zachovaním dôležitých technologických a úžitkových parametrov a s možnosťou využitia i vo farmaceutickom priemysle. Ohľad bol tiež braný na cenovú náročnosť kmeňa.

Konkrétne bolo navrhnutých a pripravených celkom 8 nových skiel bez obsahu spomínaných toxických prvkov. Jednotlivé zloženia boli volené tak, aby boli vyhovujúce nasledujúce dôležité parametre skiel: merná elektrická vodivosť, viskozitné a kryštalizačné charakteristiky, dilatometrické parametre a hydrolytická odolnosť.

Práca sa zaoberala návrhom nových zložení skiel jednak s obsahom oxidu stronťnatého, ale aj s využitím prítomnosti dolomitu a vápenca, len vápenca a len dolomitu v kmeni.

Ako najlepšie vyhovujúce boli vyhodnotené dve sklá, ktoré okrem toho, že najlepšie spĺňali spomínané parametre disponovali i inými významnými vlastnosťami, ako napríklad priaznivými hodnotami povrchového napätia, ktoré možno považovať za záruku dobrej tvarovateľnosti výrobu.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Skla s indexem lomu vyšším než 1,55

Autor: Radek Kovařík
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školiteľ: Ing. Miroslav Rada, CSc.

Cílem této práce je najít taková složení skel, která budou mít index lomu vyšší než 1,55 a zároveň budou vykazovat co nejvyšší Youngův modul pružnosti, který je zárukou vysoké mechanické pevnosti i Vickersovy mikrotvrdosti. Tato skla by mohla najít využití při výrobě skleněných mikrokuliček, které se používají v dopravním značení. Na čtyřech různých složení skel byl stanoven index lomu, Youngův modul pružnosti a Vickersova mikrotvrdost. Dále budou zkoumány i další parametry jako jsou krystalizační a dilatometrické charakteristiky, popř. chemická odolnost.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Vlastnosti keramiky ZrO₂

Autor: Marek Malec
Ročník: M1
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Eva Gregorová, CSc.

Práce se zabývá přípravou zirkoničité keramiky lisováním a její charakterizací. Z prášku TZ-3YB-E byly tlakem 50 MPa nalisovány vzorky ve tvaru trámečků a následně vypáleny na teploty v rozmezí 900–1600 °C. Vzorky byly charakterizovány pomocí kritérií hutnosti (objemová hmotnost, skutečná a zdánlivá pórovitost) a smrštění. Podařilo se připravit zirkoničitou keramiku s pórovitostí v rozmezí 1,1–59,9 %. Metodou impulsní excitace byl stanoven Youngův modul, přičemž byla experimentální data porovnána s teoretickými předpověďmi závislosti Youngova modulu na pórovitosti. U vybraných vzorků byla rovněž určena teplotní závislost Youngova modulu v rozmezí 25–1000 °C. Pomocí křížového vztahu byla vypočtena teplotní vodivost těchto vzorků za účelem budoucího srovnání s hodnotami naměřenými metodou laser flash ve stejném teplotním rozsahu a na stejných vzorcích.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Laserová skla pro fotodynamickou terapii a dermatologii

Autor: Aleš Mareška
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: doc. Dr. Ing. Martin Míka

Cílem práce je laboratorní příprava skel dopovaných oxidy lanthanoidů, které nám slouží jako modulátory vlnové délky laserových zdrojů či LED zdrojů ve fotonice a v dalších odvětvích, jako například ve fotodynamické terapii. Všechna námi připravená skla jsou na bázi SiO₂ – Al₂O₃ – ZnO – Na₂O – SO₃ – Eu₂O₃ (Tb₂O₃, Sm₂O₃), kde vhodný lanthanoid, nebo jejich kombinaci, volíme na základě vlnové délky zdroje záření. Pro každý luminofor měříme absorpční spektrum a vyhodnocujeme pro něj optimální zdroj z hlediska vlnové délky. Jedná se tedy ve své podstatě o sodno-hlinito-křemičitá skla s vyšším obsahem oxidu zinečnatého, který slouží jako prostředek ke zvýšení výsledné luminiscence. Lanthanoidy nám díky své vysoké absorpci v modré a v zelené oblasti spektra umožňují posouvat výsledné záření do oblasti červené. Skla jsou následně využívána buďto jako skelné destičky – luminofory, které slouží ke změně vlnové délky, nebo jako skelný prášek o mikronových až nanometrických velikostech částic, které se využívají ve fotodynamické terapii k vyvolání tzv. dvoufotonové chemické reakce, při níž je dosaženo optimálního fotodynamického efektu. Fotodynamická terapie je perspektivní metoda léčby nádorových onemocnění založená na spolupráci tří složek – vhodném zdroji záření, fotosensitivní látce a molekulárním kyslíku.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Silikátová keramika na bázi kaolinu a mastku

Autor: Tereza Smolíková
Ročník: M1
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Eva Gregorová, CSc.

Tato práce se zabývá přípravou keramiky v soustavě $\text{MgO-Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$. Jako výchozí suroviny byly použity český kaolin Sedlec la a australský mastek, které byly smíchány v hmotnostních poměrech 1:0, 8:2, 6:4, 4:6, 2:8 a 0:1. Po homogenizaci za mokra byly směsi vysušeny, rozetřeny a vzorky byly připraveny uniaxiálním lisováním tlakem 40 MPa ve tvaru trámečků a tablet. Následoval výpal na teplotu 1290 °C. Vzorky byly charakterizovány pomocí Archimédovy metody k určení objemové hmotnosti a zdánlivé pórovitosti a byly na nich měřeny elastické konstanty metodou impulsních excitací. Zároveň byla na těchto vzorcích provedena kvalitativní a kvantitativní rentgenová fázová analýza. Na základě této analýzy byly, po převedení obsahů jednotlivých fází na objemové frakce, spočítány teoretické hustoty a z nich poté skutečné pórovitosti vzorků. Z této analýzy je zároveň patrné, že tímto způsobem byla připravena keramika s proměnlivým obsahem 4 krystalických fází (mullit, cordierit, enstatit a cristobalit).

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Laserově aktivní skla pro fotoniku

Autor: Yulia Sultanbekova
Ročník: B3
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: doc. Dr. Ing. Martin Míka; Ing. Kristýna Rysová

Laserově aktivní skla obsahující oxidy lanthanoidů představují perspektivní materiály pro konstrukci nových laserů, optických zesilovačů, nebo velmi účinných LED zdrojů. Pro tyto aplikace byla připravena sodnozinečnatohlinitokřemičitá laserová skla dopovaná zejména oxidy Eu, Sm a Tb. Tato skla byla připravována z vysoce čistých uhličitánů a oxidů. Pro dosažení dokonalé homogenity byla směs surovin důkladně míchána 10 min v třecí misce a následně tavena v PtRh kelímku v elektrické superkanthalové peci při teplotě 1480°C. Za účelem zajištění vysoké homogenity skloviny, byla tavenina pětkrát po 15 minutách míchána. Po homogenizaci byla sklovina odlita do kovové nerezové formy a byl získán vzorek skla ve tvaru kvádru, který byl pomalu ochlazen na laboratorní teplotu, aby se zabránilo jeho popraskání. U připravených vzorků skel byla měřena jejich absorpční a emisní spektra vláknovým spektrometrem Ocean Optics 2000.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Tvorba a měření vybraných vlastností Ti-Ag-Ca-P sol-gel povlaků na titanu

Autor: Kristýna Švagrová
Ročník: M1
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Diana Horkavcová, Ph.D.

Výzkum biomateriálů je čím dál více probíraná oblast, jdoucí ruku v ruce s náročnějším životním stylem, narůstajícím věkem populace a závažnějšími nemocemi a úrazy. Cílem tedy je vytvoření vhodných implantátů s požadovanými vlastnostmi. Ty se nejjednodušeji dají ovlivnit vhodnou úpravou jejich povrchu. Materiál se tedy za pomoci metody sol-gel a techniky *dip-coating* potáhne a vytvoří se multifunkční titaničitý povlak s přídavkem stříbra a různých forem vápníku a fosforu. Cílem je dosáhnout antibakteriálních a bioaktivních vlastností. Bioaktivita byla testována 14denním *in vitro* testem v simulované tělní tekutině za statických podmínek. Antibakteriální vlastnosti byly testovány vůči gram-negativní bakterii *Escherichia coli*, po dobu 24 hod. Poslední sledovanou vlastností byla adheze povlaku k substrátu, která se stanovovala *tape* testem. Statickým *in vitro* testem nedošlo k precipitaci hydroxyapatitu. Povlaky s obsahem stříbra vykazovali 100% antibakteriální účinek vůči bakterii *E. coli*. Přilnavost povlaků k substrátu byla vyhodnocena za pomoci klasifikační tabulky jako „velmi dobrá“. V nastávajících experimentech dojde k optimalizaci celého procesu tvorby titaničitých povlaků, bude se navyšovat koncentrace Ca, P iontů a v neposlední řadě budou povlaky podrobeny testům cytotoxicity vůči buňkám myších fibroblastů a buňkám lidského osteosarkomu.

Sekce : Anorganické nekovové materiály III

Precipitační reakce při korozi skel

Autor: Petr Čálek
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: prof. Ing. Aleš Helebrant, CSc.
Konzultant: Ing. Jan Macháček, Ph.D.

Cílem práce bylo vytvořit souhrn existujících modelů pro popis kinetiky koroze skla se zvýšeným důrazem na modely uvažující precipitační reakce ve vodných roztocích, a pokusit se simulovat průběh korozního děje pomocí programu FactSage. Pro možnost simulování průběhu koroze byl přijat předpoklad kongruentního rozpouštění a zpětného srážení, podobně jako např. v modelu Geislera. Při simulaci se předpokládalo rozpouštění různého molárního množství skla v jednom litru destilované vody a bylo sledováno přesycení vůči možným precipitátům. Některé z teoreticky vysrážených produktů byly očekávané a společné pro většinu skel, jiné pak byly typické pro jednotlivá složení skel. K první skupině se řadí především H_4SiO_4 nebo albit. Příklady druhé skupiny jsou HBO_2 pro boritokřemičité sklo, $\text{Mg}_3\text{Si}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$ pro modelové sklo složení (v mol. %) 15 Na_2O , 10 MgO , 75 SiO_2 a $\text{Na}_2\text{Ca}_3\text{Si}_6\text{O}_{16}$ pro obdobné sklo soustavy Na_2O - CaO - SiO_2 . Na plochem skle je možná precipitace jak $\text{Mg}_3\text{Si}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$, tak $\text{Na}_2\text{Ca}_3\text{Si}_6\text{O}_{16}$. Hodnota tlaku neměla podle očekávání na vysrážené produkty žádný vliv, zatímco hodnota teploty ano. Při přebytku rozpuštěného skla a pokojové teplotě se přebytečný křemík srážel ve formě SiO_2 , kdežto při teplotě 98°C se srážel ve formě $\text{H}_6\text{Si}_2\text{O}_7$.

Sekce : Anorganické nekovové materiály III

Vývoj nových křišťálových skel bez obsahu olova a barya

Autor: Lenka Dillingerová
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Miroslav Rada, CSc.

Zaměřením této práce je eliminace obsahu toxického olova a barya ve složení nových křišťálových skel. Důvody pro hledání možností náhrady olova a barya ve skle jsou nejen jejich zdravotní závadnost, ale hlavně jejich ekologické následky pro prostředí, tj. odpady z výroby. Těmto následkům se v případě olova již aktivně zabráňuje pomocí legislativy a v případě barya se tyto kroky dají do budoucna očekávat.

Při zvažování nových složení skel se v této práci nejvíce klade důraz na získání vysokého měrného elektrického odporu v tavenině u nových skel, aby se tato skla dala elektricky tavit i cínčitými elektrodami, a dále na přiblížení jejich vlastností výhodným vlastnostem olovnatých křišťálových skel s obsahem PbO 24 hmot. %.

Při navrhování nových složení skel je snaha o prozkoumání nových kombinací tradičnějších oxidů, kdy se bere v úvahu jejich dostupnost i cenová relace. Složení jednotlivých skel byla volena tak, aby byl vyšetřen vliv přítomnosti vybraných oxidů především na měrné elektrické odpory, teploty liquidus, teploty maximálních krystalizačních rychlostí, teploty tavení, teplotní roztažnosti a hydrolytické odolnosti zkoumaných skel.

Sekce : Anorganické nekovové materiály III

Optické vlastnosti spinelových suspenzí a jejich modelování

Autor: Soňa Hříbalová
Ročník: B3
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: prof. Dr. Willi Pabst

Spinel MgAl_2O_4 je kubický krystal, který je vhodný pro přípravu opticky transparentní keramiky. Optické vlastnosti, např. transmitance (tj. optická propustnost), této keramiky jsou pak určeny indexem lomu a popř. zbytkovou pórovitostí a velikostí pórů. Podobná situace nastává u spinelové suspenze, kde jsou částice spinelového prášku obklopeny vodou. Stejně jako v případě spinelové keramiky, kde dochází ke snížení transmitance póry, tj. inkluzemi s odlišným indexem lomu, dochází ke snížení transmitance i ve spinelových suspenzích rozptylem světla v závislosti na velikosti těchto částic, a to tím více, čím vyšší je koncentrace spinelu v těchto suspenzích. V rámci této práce byly připraveny suspenze s různou koncentrací komerčního spinelového prášku ve vodě (0,0003–0,0640 hm%) a jejich transmitance byla proměřena na spektrofotometru Shimadzu UV-2400PC v rozsahu vlnových délek 190–900 nm. Velikost částic spinelového prášku byla proměřena laserovou difrakcí (Fritsch Analysette 22 NanoTec) a hodnota mediánu naměřeného rozdělení (242 nm) byla použita, spolu se závislostí indexu lomu vody a spinelu na vlnové délce, jako vstupní informace do modelů rozptylu založeného na Rayleighově a Fraunhoferově aproximaci resp. na Mie teorii. Získané závislosti transmitance byly srovnány s teoretickými předpověďmi.

Sekce : Anorganické nekovové materiály III

Úprava povrchu skla Float nanopráškami a ich vplyv na vybrané parametre

Autor: Adriana Krajčiová
Ročník: M1
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Miroslav Rada, CSc.

Cieľom práce bola úprava povrchu skla typu Float dvomi druhmi nanopráškov, a to konkrétne oxidu hlinitého (Al-1) a oxidu zirkoničitého (Zr-1), nájdenie ich optimálneho pomeru v zmesi za použitia metódy tlakového vstrekovania a následné vyšetrenie vplyvu týchto úprav povrchu na mikrotvrdosť, pevnosť v ohybe a hydrolytickú odolnosť.

Ako najlepšia bola vyhodnotená pomocou Vickersovej metódy merania mikrotvrdości zmes nanopráškov o zložení 27,5 % Al-1 + 72,5 % Zr-1 (v hmot. %), ktorej hodnoty zlepšenia mikrotvrdości vykazovali 134 % na necínovej strane a 130 % na strane cínovej voči hodnote mikrotvrdości slepej vzorky pri zaťažení 10 g.

Tento optimálny pomer sa pri meraní pevnosti v ohybe ukázal taktiež ako najlepší pri zlepšení o 23 % vztiahnuté voči slepej vzorke. Hydrolytická odolnosť vzoriek, zisťovaná metódou merania mernej elektrickej vodivosti vo výluhu (pre vzorky ošetrované Al-1 zníženie o 27 %) a stanovením koncentrácií prvkov Na, Ca, Mg, Al a Si metódou AAS (pre radu vzoriek ošetrovaných Al-1 zníženie koncentrácie Na o 35 %), sa v oboch prípadoch zlepšovala v rade Zr-1 < 27,5 % Al-1 + 72,5% Zr-1 < Al-1, vztiahnuté voči hodnotám slepej vzorky.

Sekce : Anorganické nekovové materiály III

Příprava povrchových vrstev na slitině hořčíku metodou sol-gel

Autor: Bc. Kateřina Mertová
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Horkavcová Diana, Ph.D.

V oblasti biomateriálů jsou v poslední době velmi zkoumaným materiálem biodegradovatelné kovy. Mezi jednu z největších výhod použití biodegradabilních kovů patří skutečnost, že po implantaci biodegradabilního materiálu není nutná reoperace pacienta. Hořčík je pro tyto aplikace dlouhou dobu již zkoumán kvůli svým vlastnostem, které se blíží vlastnostem lidské kosti. Příliš rychlá degradace a uvolňování vodíku brání prozatím širšímu využití těchto materiálů v praxi. Pro snížení počáteční vysoké korozní rychlosti materiálu v lidském těle a zvýšení biokompatibility jsou vytvářeny na hořčíkových implantátech povrchové vrstvy.

Cílem této práce bylo připravit metodou sol-gel na slitině hořčíku anorganické vrstvy, které mohou jeho počáteční degradaci efektivně zpomalit a přispět ke zvýšení biokompatibility materiálu. V rámci práce se změnou podmínek procesu podařilo připravit z ethanolového solu rovnoměrné, dobře přilnavé vrstvy, které byly tvořené především uhličitánem vápenatým. Po provedení korozních zkoušek se nám potvrdila zvýšená korozní odolnost slitiny s vrstvou.

Sekce : Anorganické nekovové materiály III

Příprava spinelové keramiky technikou ECAS se zvláštním ohledem na snížení uhlíkového znečištění

Autor: Bc. Vojtěch Nečina
Ročník: M1
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: prof. Dr. Willi Pabst

Transparentní spinelová keramika je vhodným materiálem pro neprůstřelná okna a jiné podobné aplikace. Jedna z možných metod příprav je technika ECAS (electric current assisted sintering), více známá pod názvem SPS (spark plasma sintering), která se v posledních letech hojně používá pro přípravu hutných materiálů, dosahujících prakticky teoretické hustoty, což je základní předpoklad pro docílení transparentnosti. Pro slinování keramických materiálů se zpravidla používá grafitová forma, která je navíc vystlána grafitovým papírem. V důsledku vysokých teplot způsobených průchodem elektrického proudu skrze formu a slinováním za vakua dochází k sublimaci uhlíku, který je zdrojem znečištění v konečném produktu. Takovéto znečištění má výrazný vliv na výslednou transparentnost. Cílem této práce je příprava spinelové keramiky z komerčně dostupného prášku bez přídavku aditiv a vyzkoušení postupů, které by mohly vést ke snížení znečištění uhlíkem. Vzorky byly připraveny ze submikronového MgAl_2O_4 prášku S25CRX (Baikowski, Francie). Procesní parametry, které byly řízeny, zahrnují rychlost ohřevu, maximální teplotu, výdrž na maximální teplotě a slinovací atmosféru (vakuum resp. argon). Propustnost (transmitance) byla naměřená spektrofotometrem a možné mechanismy vedoucí ke vzniku uhlíkového znečištění a možnosti jeho snížení jsou prodiskutovány.

Sekce : Anorganické nekovové materiály III

Charakteristika kaolinů a bentonitů pro použití ve farmaceutickém průmyslu

Autor: Bc. Štěpánka Veselá
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Alexandra Kloužková CSc.; Ing. Mária Kavanová

Bentonity i kaoliny mají ve farmaceutickém průmyslu široké uplatnění. Používají se především jako pomocné látky, v případě antidiaroidů jsou látkami účinnými. Díky svým sorpčním schopnostem se uplatňují zejména jako nosiče léčiv, které indukují uvolňování účinné látky a zlepšují biologickou dostupnost léčiva (množství podaného léčiva, které se v nezměněné (nebo aktivní) formě dostane na místo účinku).

Cílem této práce je charakterizovat vybrané tuzemské kaoliny a bentonity z hlediska chemického a mineralogického složení a provést některé lékopisné zkoušky (např. sedimentační objem), které by posoudily možnost jejich užití pro farmaceutický průmysl. Byly provedeny zkoušky zpracovatelnosti jílu pro tuto oblast, které zahrnovaly přípravu tabletoviny a lisování vzorků s následným hodnocením jakostních kritérií farmaceutických tablet (oděr, pevnost a rozpadavost). Na základě výsledků lékopisných zkoušek byly vybrány jeden kaolin jako pomocná látka-nosič, v případě bentonitu lze navrhnout jeho použití jako látky účinné pro farmaceutické účely.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Srovnání sorpčních vlastností různých typů cihelného obrusu

Autor: Bc. Petr Bárta
Ročník: M1
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: doc. Ing. Barbora Doušová, CSc.

I na počátku 21. století představuje znečištění vody toxickými ionty závažný problém. K čištění vody existuje mnoho metod, jednou z nejčastěji používaných je pak adsorpce na materiály s vhodnými povrchovými vlastnostmi. Nedávno začal být testován odpadní cihelný prach, který by mohl být vhodným sorbentem jak z ekonomického, tak ekologického hlediska.

Porovnání byly podrobeny tři typy odpadního prachu, každý z jiného zdroje. Bylo zjištěno chemické (RTG fluorescence) a fázové (RTG difrakce) složení a dále specifický povrch sorbentu (S_{BET}). Dalšími měřeními vlastnostmi byly pucolánová aktivita a pH_{ZPC} . Sorpční vlastnosti cihelného prachu byly testovány na dvou kationtech (Pb, Cd), poté byly provedeny vyluhovací testy, které měly za úkol ověřit stabilitu toxických kationtů vázaných ve vysycených sorbentech.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Kryštalové fázy azulonu

Autor: Bc. Dominika Bocková
Ročník: M2
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: Ing. Jan Čejka, Ph.D.

Azulon je modrá kryštalická látka s farmaceutickým účinkom. Má veľmi nízku teplotu topenia, blízku teploty tela, preto sa používa vo forme masť ako dermatologikum. Nie je možné z neho vytvoriť tablety. Tento zásadný fyzikálne-chemický problém sa pokúšam vyriešiť prípravou novej čistej formy, ktorá by mala teplotu topenia vyššiu. Po prevedení kokryštalizačného screeningu boli pripravené tri nové pevné formy azulonu, a to s tromi koformermi. Jedná sa o kokryštalý azulonu s tetrakyanochinodimetánom, tetrakvanoetylénom a tetrakyanobenzénom. Mojim hlavným cieľom je pripraviť tieto kokryštalý čisté, bez prímiesy azulonu a konkrétneho kokryštalizačného partnera. Čisté formy pripravujem pomocou rôznych kryštalizačných metód, ako napríklad spoločné mletie za sucha alebo s prídavkom vody, spoločné tavenie, spoločná sublimácia a ďalšie iné. Pri spoločnej sublimácii používam ďalšie látky, o ktorých je známe, že sublimujú alebo sú štruktúrne podobné azulonu. Doposiaľ bola úspešná príprava čistého kokryštalú azulonu s tetrakvanoetylénom.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Porovnání efektivity kokryystalizačních technik na základě screeningu modelových kokryystalů

Autor: Bc. Artemiy Bushuev
Ročník: M1
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc.

Důvodem této práce je skutečnost, že se ve většině publikací věnuje pozornost pozitivním výsledkům, již se neuvádějí ty negativní. Nicméně negativní výsledky jsou též důležité. Proto byl proveden screening modelových kokryystalů, aby byla obdržena nejen pozitivní, ale veškerá informace ohledně efektivity různých metod.

Pro systematický kokryystalový screening bylo použito 5 kokryystalizačních technik: suché mletí, mletí s přikapáváním rozpouštědla, společné tavení, pomalé odpaření a kokrystalizace ze suspenze. Modelové kokrystaly byly vybrány na základě literární rešerše. Výsledné vzorky byly podrobeny RTG práškové difrakci a výsledky analýzy byly porovnány s teoretickými záznamy vytvořenými na základě krystalografických dat stažených z CCDC – Cambridge Crystallographic Data Centre. Podařilo se připravit řadu kokryystalů. Na základě získaných výsledků bylo provedeno porovnání efektivity uvedených kokryystalizačních technik jednak z pohledu procentuálního podílu úspěšně připravených kokryystalů danou metodou, jednak z pohledu dokonalosti konverze vstupních komponent. Fyzikální směsi kokryystalizačních složek byly vyhodnoceny z hlediska náchylnosti k vytvoření kokryystalů.

Provedená práce poskytla informace ohledně efektivity vybraných kokryystalizačních metod a povahy řady kokryystalizačních partnerů, které se využijí pro budoucí práci.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Rentgenová strukturní analýza sodné soli acetylsalicylové kyseliny

Autor: Bc. Miroslava Dědová
Ročník: M2
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: Ing. Jan Čejka, Ph.D.

Acetylsalicylová kyselina se v lékařství používá již přes 110 let. I přesto se stále objevují její nová využití. V nedávné době se začala používat k léčbě akutního infarktu, nestabilní anginy pectoris a jako prevence kardiovaskulárních onemocnění. Perspektivní se také zdá být její aplikace k prevenci karcinomu tlustého střeva, jícnu a žaludku a při léčbě stařecké demence.

Nevýhodou acetylsalicylové kyseliny je její špatná rozpustnost ve vodě a kyselých roztocích. Možným řešením je použití jednoduchých solí. V minulém století bylo publikováno mnoho patentů, které se zabývaly přípravou acetylsalicylátu sodného. Jsou v nich zmiňovány dvě pevné formy sodné soli – stabilní anhydrát a nestabilní dihydrát. Tyto formy dosud nebyly strukturně charakterizované a popsány postupy přípravy jsou bez dalších úprav nereprodukovatelné.

Podařilo se připravit monokrystaly anhydrátu i dihydrátu acetylsalicylátu sodného a charakterizovat je metodou rentgenové difrakce na monokrystalu. Anhydrát byl připraven přímou krystalizací z roztoku, ale také byl nalezen postup dehydratace dihydrátu, který vede ke stejnému práškovému produktu. Dále byla objevena úplně nová forma, monohydrát acetylsalicylátu sodného, a vyřešena její struktura.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Automatizace řešení struktury z prášku metodou simulovaného žíhání

Autor: Bc. David Draisaitl
Ročník: M1
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: doc. Dr. Ing. Michal Hušák

Zcela běžnou metodou pro určení krystalové struktury je strukturní analýza z RTG monokrystalové difrakce. Ovšem esenciální podmínkou pro její užití, je dostatečně kvalitní monokrystal. A ten se nám nepodaří vždy získat. V mnoha případech můžeme pracovat pouze s vzorky ve formě polykrystalického prášku. V takovém případě musí být použita RTG strukturní analýza z práškových vzorků. Dalo by se říci, že RTG strukturní analýza z prášku je také téměř rutinní metodou. Ovšem její automatizace skýtá spoustu složitostí a stále několik nevyřešených problémů. Na strukturní analýzu z práškových dat existuje již více softwarů, zde se omezuje na software DASH. Ten jako metodu pro extrakci struktury z prášku využívá jednu z metod Globální optimalizace a to tzv. Simulovaného žíhání. Jak bylo naznačeno, existují situace, které tento software řešit neumí. První z nich je určení prostorové grupy při absenci vyhasínání reflexí. Druhou situací je výběr správné konformace dané látky. A situací třetí je rozložení výpočtů na více procesorů pro zvýšení výpočetní síly. Poslední zmiňovanou situaci řeší např. softwary m-dash, c-dash, nebo g-dash. Ovšem i tyto programy mají své nevýhody. Ať těžce ovladatelné uživatelské rozhraní, kompatibilitu či finanční nákladnost. Cílem této práce je tyto situace řešit, a to pomocí programu, který automatizuje nastavení a ovládání programu DASH.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Dehydratace ethanolu geopolymerními zeolity

Autor: Bc. Eliška Gáliková
Ročník: M1
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: Ing. David Koloušek, CSc.

Práce je věnována adsorpčním schopnostem alkalicky aktivovaných aluminosilikátů (geopolymerů) při dehydrataci azeotropické směsi ethanol-voda. Pro tento účel byly připraveny alkalicky aktivované aluminosilikáty smísením metakaolinu S-meta, hlinitanu sodného a vody v různých molárních poměrech $\text{Na}_2\text{O}/\text{Al}_2\text{O}_3$. Tepelné zpracování připravených směsí probíhalo při 95 °C a při různých expozičních časech. Práškovou rentgenovou difrakcí byly v produktech zjištěny fáze zeolit A a hydroxysodalit v nejrůznějších hmotnostních poměrech. Testování geopolymerů na dehydrataci ethanolu probíhalo v kolonovém uspořádání při hmotnosti sorbentu 1–2 g, rychlost průtoku ethanolu $0,00023 \text{ l.s}^{-1}$ a tlaku 0,4 Pa.

Ze všech testovaných materiálů se ukázal být nejvhodnější preparát, který má molární poměr $\text{Na}_2\text{O}/\text{Al}_2\text{O}_3$ 1,17. Produkt zvýšil obsah ethanolu na 99,91 hm. % v testované azeotropické směsi. Bylo prokázáno, že alkalicky aktivované aluminosilikáty účinněji dehydratují ethanol než současně používané adsorbenty zeolitového typu v průmyslových aplikacích.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Screening nových forem aktivních farmaceutických látek pomocí společné sublimace

Autor: Bc. Monika Hanousková
Ročník: M1
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: Ing. Jan Čejka, Ph.D.

Sublimace je jednou z nejméně probádaných metod přípravy kokrystalů. Pravděpodobným důvodem je velmi omezený počet látek, které lze kokrystalovat v běžné sublimační aparatuře. Největším problémem je rozdílná rychlost sublimace látek, které musí mít podobnou teplotu sublimace, a nedostatečná interakce par v sublimační komoře. V rámci bakalářské práce byla prokázána nevhodnost běžných metod sublimace, jako je sublimace ve vakuové peci nebo sublimace se společným zdrojem tepla. Proto jsem navázala na vývoj prototypu sublimátoru s nezávislým ohřevem látek. Hlavním cílem práce bylo tuto aparaturu optimalizovat a díky ní provést řízenou sublimaci více složek zahříváných individuálně s krystalizací na chlazeném prstu. Tímto způsobem se vylepšuje a v řadě případů umožňuje interakce par látek s rozdílnou teplotou sublimace. Dále se omezila desublimace mimo sublimační komoru a zvětšil se prostor pro mísení par. V nové aparatuře byly připraveny kokrystaly kofeinu s kyselinou šťavelovou, glutarovou, maleinovou a 4-hydroxybenzoovou.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Toxický antimon v místech zatížených dopravou

Autor: Bc. František Kroupa
Ročník: M1
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: doc. Ing. Barbora Doušová, CSc.

Antimon se dostává do životního prostředí převážně z antropogenních zdrojů. Hlavním zdrojem znečištění je doprava, kdy se otíráním brzdových destiček dostává antimon do atmosférické depozice a silničního prachu, odkud může přecházet do půd a povrchových vod.

Cílem práce bylo porovnat tři různé lokality extrémně zatížené dopravou v závislosti na naměřené koncentraci antimonu v odebraných vzorcích půd a silničního prachu. Jako místa odběrů byla vybrána Ostrava, České Budějovice a Praha. Pevné vzorky se mineralizovaly v rozkladném zařízení Berghof a koncentrace antimonu se stanovila na atomovém fluorescenčním spektrometru s generací hydridů (HG-AFS) Millenium Excalibur. Vzorky silničního prachu a půd byly dále charakterizovány z hlediska velikosti částic, semikvantitativního chemického složení (RTG fluorescenční analýza) a specifického povrchu (S_{BET}), aby bylo možné porovnat zatížení sledovaných lokalit antimonem v závislosti na strukturních a povrchových vlastnostech přirozených adsorbentů (půda, silniční prach), ale také na době odběru vzorků.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Příprava kokrystalů metodou společného zahřívání

Autor: Bc. Alžběta Maroušková
Ročník: M2
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc.

Kokrystaly jsou stechiometrické multikomponentní pevné fáze. V případě, že jednou z komponent kokrystalu je aktivní farmaceutická substance (API), hovoříme o tzv. farmaceutických kokrystalech. Ty jsou v poslední době zkoumány především pro možnost úpravy fyzikálně-chemických vlastností pevné formy API. Jelikož se však stále nedaří předpovídat, jaké látky a za jakých podmínek spolu vytvoří kokrystal, jsou zkoumané aktivní substance podrobeny důkladnému kokrystalizačnímu screeningu s mnoha kokrystalizačními partnery. Během něj se využívají metody přípravy kokrystalů v přítomnosti rozpouštědla (např. pomalá krystalizace z rozpouštědla nebo krystalizace ze suspenze) nebo naopak bez přítomnosti rozpouštědla (společné mletí, společné tavení).

Tato práce se zabývá další slibnou metodou přípravy kokrystalů bez přítomnosti rozpouštědla. Jde o metodu společného zahřívání, která by mohla mít oproti společnému mletí či tavení určité výhody. Principem metody je společné zahřívání směsi API a kokrystalizačního partnera při teplotě, která je nižší než teplota tání níže tající komponenty. Metoda byla testována na modelových systémech kokrystalů kofeinu, tropsium chloridu a theofylinu. Taktéž bylo zkoumáno, jak přeměna modelových systémů na kokrystal závisí na teplotě a času zahřívání.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Studium biorelevantních médií při disoluci perorálních léčivých přípravků

Autor: Bc. Michal Mrštík
Ročník: M1
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc.

Trendem dnešní doby je perorální podání léčiva prostřednictvím pevné lékové formy, neboť tato aplikace nevyžaduje asistenci lékařského personálu. Jednou z možností, jak v rámci laboratorních podmínek studovat *in vivo* chování léčivého přípravku, je použití biorelevantních médií při disolučních studiích. Biorelevantní média svým složením napodobují fyziologické parametry v gastrointestinálním traktu (GIT) blíže než je tomu u běžně užívaných lékopisných médií. Z tohoto důvodu je jejich použití velkým přínosem pro predikci *in vivo* hodnot rozpustnosti a rozpouštěcí rychlosti.

Tato práce se zaměřuje na porovnání výsledků z disolučních testů v lékopisem stanovených disolučních médiích o rozdílné hodnotě pH s výsledky z disolučních testů v biorelevantních médiích simulujících žaludeční a střevní podmínky ve stavu nalačno. Disoluční testy byly provedeny s komerčními tabletami léčivé látky vinanu zolpidemu od společnosti Teva Czech Industries s.r.o. Vinan zolpidemu je běžně užíván jako hypnotikum sloužící k léčbě nespavosti, při které má pacient problémy s usínáním. Z výsledků disolučních testů plyne, že rozpustnost vinanu zolpidemu je vysoce závislá na hodnotě pH a složení disolučního média. Výsledky práce potvrzují rozdílné chování léčivé látky v biorelevantních médiích.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Ternární fázové diagramy kokrystalů trospium chloridu

Autor: Bc. Tereza Skalická
Ročník: M2
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc.

Cílem práce bylo sestavit ternární fázové diagramy farmaceutických kokrystalů trospium chloridu (TCI) na základě predikce a experimentální konstrukce. Přínos ternárních fázových diagramů spočívá v plánování robustní výroby kokrystalu.

Predikce diagramů probíhala na základě naměřených rozpustností vstupních komponent a kokrystalu. Rozpustnosti byly stanoveny pomocí UV-VIS spektrofotometru. Hodnoty rozpustností vstupních komponent byly také získány gravimetrií. Kromě experimentálního stanovení rozpustnosti byly některé údaje o rozpustnosti převzaty z literatury.

Experimentální konstrukce diagramů probíhala na základě podrobné analýzy vzorku. Tento způsob konstrukce je založen na přípravě fyzikálních směsí (léčivá látka + koformer) o různých poměrech, které jsou smíchány s rozpouštědlem za vzniku suspenze. Jako rozpouštědla byl použit *n*-propanol a *n*-butanol, protože v těchto rozpouštědlech nedochází ke vzniku solvátů, které konstrukci diagramů značně komplikují. Pro konstrukci diagramů je potřeba analyzovat pevný i kapalný podíl ze suspenze. Pevný podíl byl analyzován pomocí rentgenové práškové difrakce. Pro vizualizace predikovaných i experimentálně konstruovaných ternárních fázových diagramů byl použit software ProSim Ternary Diagram.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Využití zeolitových filtrů při chovu ryb a jejich vliv na nitrifikační mikroorganismy

Autor: Bc. Kateřina Skleničková
Ročník: M1
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: Ing. David Koloušek, CSc.

Práce byla věnována charakterizaci minerálů typu tektosilikátů při sorpci NH_4^+ z akvariálních vod. Sledována byla vzájemná interakce tektosilikátových sorbentů a biologického prostředí akvária.

Byly testovány čtyři tektosilikátové preparáty, dva z nich byly přírodního typu a povrchově neupravené a jeden byl povrchově upravený. Posledním testovaným preparátem byl v laboratoři připravený geopolymerní zeolit A. Materiály byly vloženy do vnitřního filtru, přes který cirkulovala akvariální voda v týdenních cyklech. Žádný z preparátů kriticky neovlivnil život ryb. Jediný negativní účinek těchto filtrů byl spojen se zvyšováním pH akvariální vody díky iontové výměně kationtů alkalických kovů a alkalických zemin během průběhu experimentů. Ze všech testovaných materiálů se ukázal být nejvhodnějším přírodní tektosilikát klinomangan, který udržoval hodnotu pH vody v optimálním rozmezí hodnot 7,0–7,2.

Všechny preparáty snižovaly koncentrace NH_4^+ na hodnotu kolem 1 mg l^{-1} . Z hlediska snižování obsahu amonného kationtu se ukázal být nevýhodnější geopolymerní zeolit A. Přestože voda z vodovodního řádu obsahovala $5 \text{ mg l}^{-1} \text{ Na}^+$, $21 \text{ mg l}^{-1} \text{ K}^+$, $8 \text{ mg l}^{-1} \text{ Mg}^{2+}$ a $50 \text{ mg l}^{-1} \text{ Ca}^{2+}$, tak afinita všech preparátů byla výrazně posunuta ve směru sorpce NH_4^+ .

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Metody řešení složitějších molekul z práškových difrakčních dat

Autor: Bc. Simona Žížková
Ročník: M1
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: doc. Dr. Ing. Michal Hušák

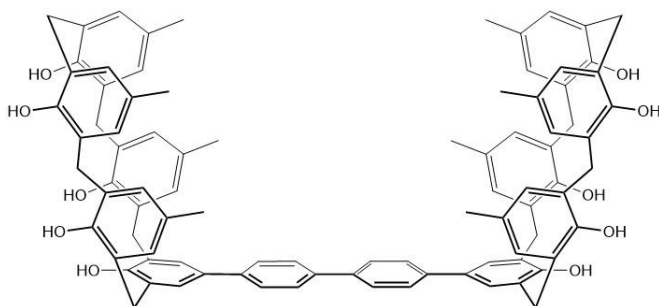
Cílem této práce je hledání a srovnání postupů řešení struktury složitějších molekul z práškových difrakčních záznamů a následné realizaci těchto postupů v praxi. Složitost látky je s ohledem na řešení struktury z prášku definována jako počet torzních úhlů a možností posuvu/rotace fragmentů v buňce (tzv. DOF, počet stupňů volnosti).

Výběr těchto složitých molekul byl prováděn vyhledáváním v CSD (The Cambridge Structural Database), při čemž bylo nastaveno omezené vyhledávání pouze na látky řešené z prášku po roce 2006, látky organické, a dále pouze molekuly s vyšším počtem uhlíků než 12. Celkový počet nalezených struktur byl 506. U všech těchto molekul byl proveden výpočet stupňů volnosti a následně bylo vybráno 40 molekul, které dosahovaly nejvyššího počtu stupňů volnosti. Ke každé z těchto molekul byl vyhledán odborný článek s podrobným postupem řešení této struktury. Nejvyšší počet stupňů volnosti měla látka s CSD kódem COYGAZ, a to celých 66. Nicméně při řešení struktur u většiny látek s takto vysokým počtem stupňů volnosti byla brána v úvahu pouze translace a rotace rigidní části molekuly a stupně volnosti v úvahu brány nebyly - nejedná se o strukturu skutečně vyřešenou z prášku. Řešení struktur bylo prováděno nejčastěji v programu FOX a DASH.

Sekce : Organická chemie M1

Syntéza receptorů fullerenu na bázi calix[5]arenu

Autor: Matěj Sommer
Ročník: M2
Ústav: Organická chemie
Školitel: doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.



Oproti calixarenům se sudým počtem fenolických jednotek mají calix[5]areny mnohonásobně náročnější syntézu. Jejich předností je však možnost komplexace fullerenu. V naší laboratoři už byly dříve připraveny calix[5]areny s jednou funkční skupinou pomocí konvergentní syntézy.

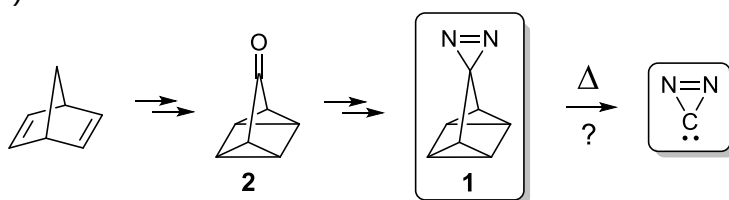
Takto připravené calix[5]areny samy o sobě vhodné nejsou, avšak mohou sloužit jako stavební bloky pro větší molekuly určené k molekulovému rozpoznávání a komplexaci fullerenu. Cílem této práce je transformovat monobromderivát pomocí cross-coupling reakcí a mononitroderivát na amidické, případně močovinové bis(calix[5]areny), které by mohly být velmi perspektivními pro komplexaci a rozpoznávání fullerenu.

Sekce : Organická chemie M1

Syntéza 7-azikvadricyklanu jako prekursoru cyklického karbenu CN_2

Autor: Filip Gracias
Ročník: M1
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Tomáš Martinů, Ph.D.

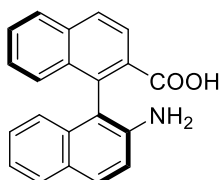
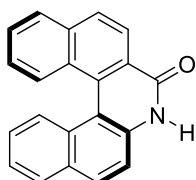
Cílem mé práce je syntéza 7-azikvadricyklanu, dosud nesyntetizované pentacyklické sloučeniny s vysokým pnutí, jako potencionálního prekursoru $c\text{-CN}_2$ karbenu, jehož existenci v roztoku a plynné fázi se v naší laboratoři podařilo nepřímo prokázat. Při vakuové pyrolýze s izolací produktů v kryogenní matrici je očekávána vyšší kinetická stabilita diazirinového cyklu k denitrogenaci sloučeniny **1** ve srovnání s jejím známým tetracyklickým diazo izomerem. Syntéza **1** vychází z norbornadienu a zahrnuje 9 reakčních kroků, klíčovým intermediátem je kvadricyklan-7-on (**2**).



Sekce : Organická chemie M1

Příprava axiálně chirální aminokyseliny na bázi binaftalenu

Autor: Kristýna Janků
Ročník: M1
Ústav: Organické chemie
Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.



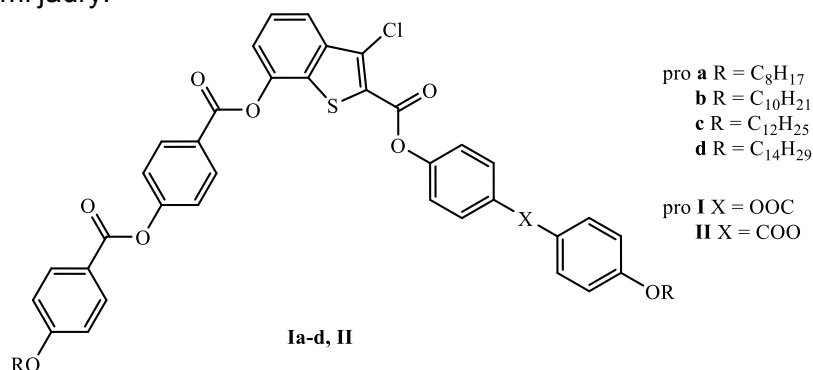
Chirálním aminokyselinám nepřírodního typu se věnuje velká pozornost. Začaly se například využívat ve vývoji nových léčivých látek jako chirální stavební jednotky peptidových řetězců. Cílem mé práce bylo připravit axiálně chirální aminokyselinu na bázi binaftalenu. Již dříve byla publikována syntéza jejího (S) enantiomeru, která je ale poněkud složitá. Proto byl zkoumán jednodušší postup přípravy této aminokyseliny.

Sekce : Organická chemie M1

Syntéza 2,4- a 2,7- disubstituovaných derivátů benzothiofenu

Autor: Michal Šmahel
Ročník: M1
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Václav Kozmík, CSc.

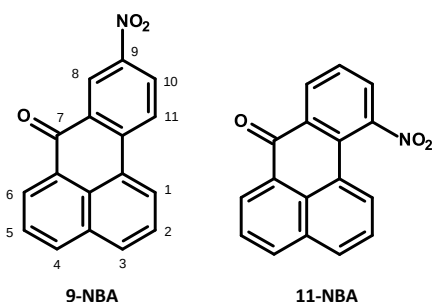
Projekt se zabývá syntézou potenciálních kapalně-krystalických materiálů lomeného tvaru odvozených od 3-chlor-7-methoxybenzo[*b*]thiofen-2-karboxylové kyseliny a 3-chlor-4-methoxybenzo[*b*]thiofen-2-karboxylové kyseliny, jako centrálních jader nových kapalných krystalů. Byla vypracována syntéza obou centrálních jader, deprotektce a selektivní chránění hydroxylové skupiny 2,7-disubstituovaného benzothiofenového derivátu. S využitím tohoto centrálního jádra bylo následně připraveno 5 potenciálních mesogenů **Ia-d** a **II** lišících se délkou terminálních řetězců (OC_8H_{17} , $\text{OC}_{10}\text{H}_{21}$, $\text{OC}_{12}\text{H}_{25}$, $\text{OC}_{14}\text{H}_{29}$), popřípadě orientací esterové spojky mezi benzenovými jádry.



Sekce : Organická chemie M1

Syntéza nitrobenzanthronů

Autor: Michal Vetýška
Ročník: M2
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Michal Himl, Ph.D.



Nitrobenzanthrony (NBA) jsou polyaromatické nitro sloučeniny, které se nacházejí v emisích spalovacích motorů a v cigaretovém kouři. Některé isomery NBA patří mezi nejsilnější známé mutageny.

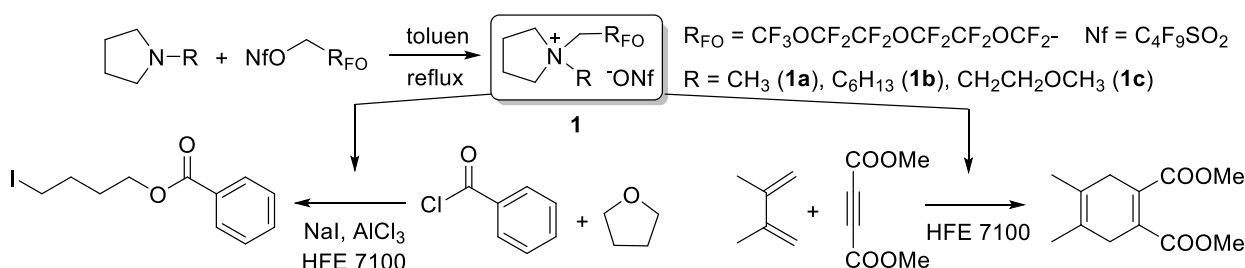
V naší laboratoři byly již v minulosti syntetizovány 2-NBA a 3-NBA a tato práce se zabývá syntézou dalších dvou isomerů NBA – 9-NBA a 11-NBA. Jejich syntéza byla již v literatuře popsána, ale Ullmannova reakce, použitá v klíčovém kroku poskytuje neuspokojivé výsledky. Z těchto důvodů byla zvolena nová syntetická strategie,

která v klíčovém kroku využívá Suzukiho reakce. Připravené látky budou sloužit pro studie závislosti mutagenity na chemických vlastnostech, zejména redoxních potenciálech.

Fluorové iontové kapaliny s pyrrolidiniovým jádrem

Autor: Nikola Štěpánková
 Ročník: M1
 Ústav: Organická chemie
 Školitel: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Cílem mé práce byla syntéza nových typů fluorofilních iontových kapalin s pyrrolidiniovým heterocyklickým jádrem, recyklovatelných fluorovými separačními metodami. Zatímco první získaná sůl **1a** s methylovou skupinou má vysokou teplotu tání, sůl **1b** s hexylovou skupinou je iontovou kapalinou s t.t. ~ 100 °C a sůl **1c** patří mezi RTIL, čili iontové kapaliny s t.t. < 25 °C. Pro izolaci všech solí jsem s výhodou využila fluorové separační metody. Soli **1a-1c** byly testovány jako korozpouštědla s hydrofluoretherem HFE 7100, sůl **1c** i jako rozpouštědlo při modelových reakcích. V případě Dielsky-Alderovy reakce byly soli **1** úspěšně recyklovány.

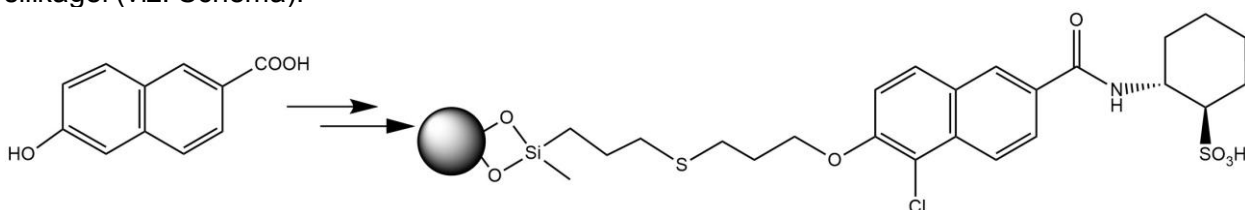


Syntéza nových stacionárních fází pro HPLC

Autor: Bc. Jana Herciková
 Ročník: M1
 Ústav: Organická chemie
 Školitel: Ing. Michal Kohout, Ph.D.

Vysokotlaká kapalinová chromatografie (HPLC) je v dnešní době jedna z nejdůležitějších separačních metod pro určení optické čistoty léčiv. Díky různým chirálním stacionárním fázím je možné separovat nejrozumnější racemické látky často však s výjimkou látek vysoce polárních. Chirální katexy syntetizované v této práci jsou mimořádně vhodné právě pro enantioseparaci ionizovaných či ionizovatelných látek především pak chirálních aminů.

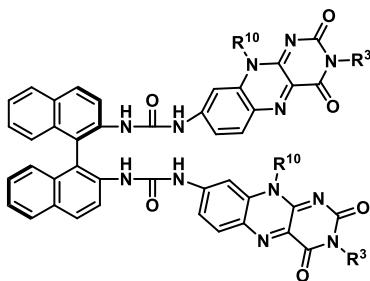
Cílem práce bylo připravit dvě nové chirální stacionární fáze, které jsou analogy již existující experimentální stacionární fáze na bázi 7-hydroxynaftalen-2-karboxylové kyseliny. Syntéza nových stacionárních fází vycházela z 6-hydroxynaftalen-2-karboxylové kyseliny, která byla sekvencí reakcí převedena na odpovídající amidy, které byly následně imobilizovány na silikagel (viz. Schéma).



Sekce : Organická chemie M2

Syntéza axiálně chirálních ligandů nesoucích flavinové zbytky

Autor: Leoš Valenta
Ročník: M1
Ústav: Organické chemie
Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.



Deriváty močoviny jsou široce zkoumanou skupinou látek díky jejich schopnosti nekovalentní interakce s vhodnými organickými molekulami. Lze je tedy využít jako ligandy pro komplexaci. Použitím binaftalenové jednotky, která vykazuje axiální chiralitu, vzniká možnost enantiomerní komplexace, kdy binaftalen vytváří kavitu pro hostitelskou molekulu.

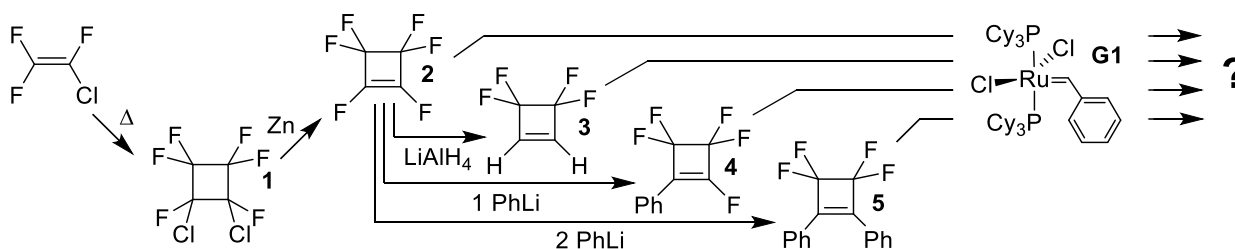
Dříve byl tento jev zkoumán hlavně pomocí ^1H NMR. Zavedením flavinové jednotky do molekuly močoviny vznikají nové možnosti, jak vznik komplexu studovat, jelikož flaviny obecně vykazují velmi silné optické vlastnosti. Jako další analytické metody by tedy bylo možné využít měření fluorescence, popř. UV/VIS spektrometrie.

Sekce : Organická chemie M2

Polyfluorované cyklobuteny jako substráty metateze alkenů

Autor: Kateřina Kučňírová
Ročník: M2
Ústav: Organické chemie
Školitel: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

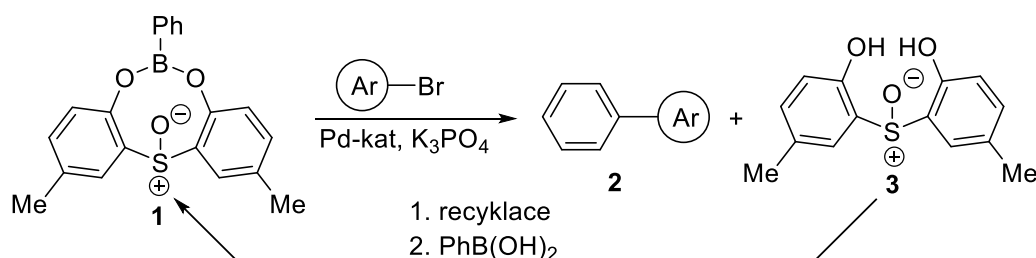
Metateze alkenů s otevřením cyklu (ring opening metathesis, ROM) je užitečným nástrojem pro syntézu nesymetrických 1,5-dienů. Ačkoli takové polyfluorované dieny jsou zajímavými stavebními bloky, ROM polyfluorocykloalkenů dosud nebyla studována. Cílem mé práce byla proto syntéza polyfluorocyklobutenů **2-5** jako výchozích substrátů pro ROM. Syntéza vycházela z dichlorhexafluorocyklobutanu **1**, získaného termickou dimerizací chlortrifluorethenu. Jeho dehalogenací jsem získala klíčový perfluorocyklobuten (**2**), který následně reakcí s nukleofilními činidly poskytl polyfluorocyklobuteny **3-5**. První fázi projektu jsem zahájila studiem reakce alkenů **2-5** s rutheniovými komplexy, např. Grubbsovým prekatalyzátorem 1. generace.



Příprava nových esterů boronových kyselin a studium jejich vlastností a reaktivity

Autor: Marek Čubiňák
 Ročník: M1
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: doc. Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D.

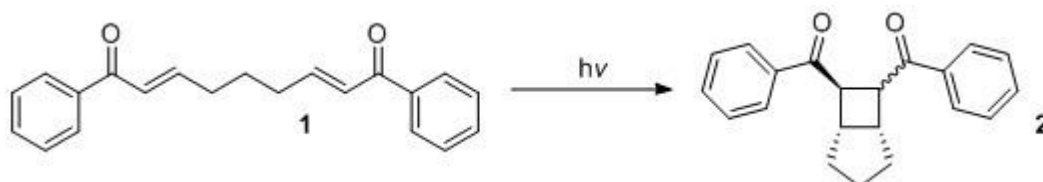
Boronové kyseliny jsou organokovové sloučeniny, které se využívají pro tvorbu vazby C–C Suzukiho reakcí. Boronové kyseliny jsou nestabilní sloučeniny a proto se velmi často převádějí na stabilní estery boronových kyselin odvozených např. od pinakolu, katecholu a MIDA. Příprava esterů boronových kyselin **1** nebyla doposud publikována a proto jsem se ve své práci zaměřil na vypracování metodiky na syntézu těchto látek a studium reaktivity v Suzukiho reakci. V příspěvku bude také diskutována možnost regenerace sulfoxidu **3** ze surové reakční směsi a jeho opětovné využití pro přípravu esteru **1**.



Stereoselektivita intramolekulární [2 + 2] fotocykloadice α,β -nenasycených ketonů

Autor: Adam Pokluda
 Ročník: M1
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: doc. Ing. Radek Cibulka, Ph.D.

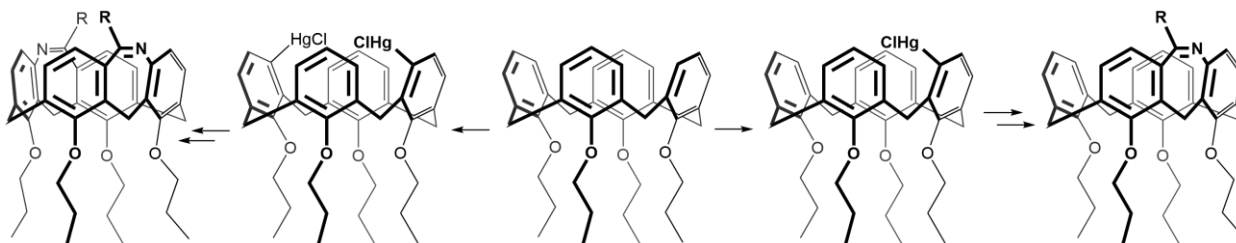
V uplynulé době bylo popsáno několik fotosystémů, které umožňují provádět [2 + 2] fotocykloadice s využitím viditelného světla a vhodného katalyzátoru. Aplikace těchto fotosystémů na substrát **1** vede ke tvorbě odlišných stereoisomerů cykloaduktu **2**. Tato práce si bere za cíl objasnit, jakým způsobem závisí stereoselektivita intramolekulární [2 + 2] fotocykloadice modelového substrátu **1** na podmínkách experimentu a použitém fotosystému.



Příprava intramolekulárně přemostěných calix[4]arenů se sedmičlennými cykly

Autor: Martin Tlustý
 Ročník: M2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: prof. Ing Pavel Lhoták, CSc.

Derivatizace horního okraje (aromatické části) calixarenů je zaměřena především na substituci v *para*-poloze vůči fenolické skupině, a to kvůli vyšší reaktivitě této polohy při elektrofilní aromatické substituci. Nedávno však bylo v naší skupině zjištěno, že merkurace tetrapropoxycalix[4]arenu v kónické konformaci vede selektivně k *meta*-substituovanému produktu. Při použití dvou ekvivalentů merkuračního činidla lze získat dva produkty substituce na distálních jádrech – *meta-meta* a *meta-para* disubstituované produkty. Všechny tyto sloučeniny lze využít pro přípravu intramolekulárně přemostěných calix[4]arenů. Merkurované calixareny byly převedeny na amidy a poté cyklizovány pomocí Bischler-Napieralského reakce. Získané deriváty jsou inherentně chirálními sloučeninami. V případě jednoho derivátu byla provedena separace enantiomerů pomocí chirální HPLC. Připravené sloučeniny by mohly být využity pro přípravu složitějších inherentně chirálních receptorů.



Syntéza aduktů cysteinu a N-acetylcysteinu se styrenoxidem

Autor: Aneta Bednářová
 Ročník: M1
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: doc. Ing. Igor Linhart, CSc.

Styren-7,8-oxid (SO) je klíčovým elektrofilním metabolitem styrenu, který v buňkách reaguje s tripeptidem glutathionem a vzniklé adukty se pak dále přeměňují až na S-substituované deriváty N-acetylcysteinu, merkapturové kyseliny. Merkapturové kyseliny vznikají i reakcí SO s globinem, následným štěpením a metabolickou přeměnou vzniklých aduktů. SO může dále v organismu reagovat s volnými sulfanylovými a amino-skupinami aminokyselin za vzniku tzv. proteinových aduktů.

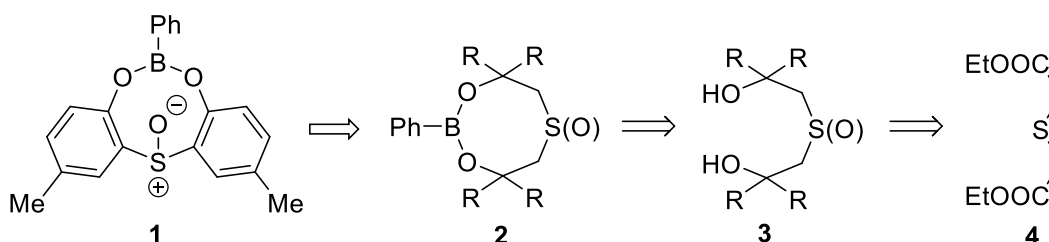
Cílem této práce bylo připravit referenční standardy pro studium tvorby a dalšího metabolismu proteinových aduktů SO. Byla optimalizována syntéza merkapturových kyselin odvozených od SO, N-acetyl-S-(1-fenyl-2-hydroxyethyl)-L-cysteinu a N-acetyl-S-(2-fenyl-2-hydroxyethyl)-L-cysteinu, a připraveny jejich jednotlivé diastereomery poskytované reakcí enantiomerně čistého SO s methyl-N-acetyl-L-cysteinátem. Dále je optimalizována syntéza cysteinových aduktů, S-(1-fenyl-2-hydroxyethyl)-L-cysteinu a S-(1-fenyl-2-hydroxyethyl)-L-cysteinu s využitím 9H-fluoren-9-ylmethoxykarbonylové chránicí skupiny.

Sekce : Organická chemie M3

Příprava sekundárních a terciárních alkoholů odvozených od 3-thiapentandialu

Autor: Eliška Fikejzlová
Ročník: M1
Ústav: Organické chemie
Školitel: doc. Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D.

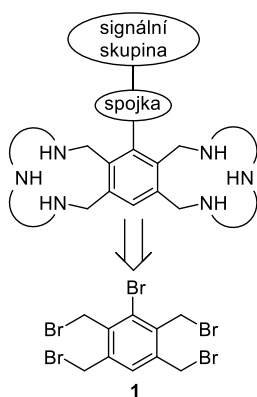
V naší laboratoři byla vyvinuta metodika pro přípravu nového typu esterů boronových kyselin **1**. Ve své práci jsem proto navázala na tyto výsledky a pokusila jsem se připravit analogické estery boronových kyselin **2** odvozených od 3-thiapentandiolu **3**. Diethyl-3-thiapentandioát (**4**) byl zvolen jako výchozí látka pro přípravu terciárních alkoholů **3** reakcí s Grignardovými a organolithnými činidly. V rámci prezentace budou diskutovány výsledky získané při přípravě alkoholů **3** a esterů boronových kyselin **2**.



Sekce : Organická chemie M3

Syntéza senzoru pro biologicky zajímavé anionty

Autor: Nikola Hofrová
Ročník: M2
Ústav: Organické chemie
Školitel: doc. Dr. Ing. Jana Hodačová



Anionty jsou nedílnou součástí mnoha chemických a biologických procesů. Velká pozornost je proto věnována vývoji senzorů, které mohou sloužit k detekci specifických aniontů. Tato práce se zabývá syntézou ligandů schopných komplexovat biologicky zajímavé anionty (oxalátový dianion nebo různé fosfáty) a dále plnit funkci chemosenzoru připojením vhodné signální funkční skupiny.

Klíčovým prekurzorem pro syntézu ligandu je 3-brom-1,2,4,5-tetrakis(brommethyl)benzen (**1**). Při jeho syntéze byly vyzkoušeny tři různé syntetické cesty. Pokus o převod získaného prekurzoru **1** na žádaný ligand nebylo zatím úspěšné, proto byly pro optimalizaci reakčních podmínek zvoleny snadněji dostupné substráty 1-brom-2,3-bis(brommethyl)benzen a 1-brom-3,4-bis(brommethyl)benzen.

Kvapalné kryštály sú známe predovšetkým vďaka ich použitiu v zobrazovacej technike. V posledných rokoch sú hlavným predmetom záujmu látky tvoriace biaxiálne nematickú fázu. Pomocou kvantovej mechaniky bolo spočítané, že displeje s použitím takýchto látok by mali omnoho kratšiu odozvu. Problémom je, že pre použitie v displejoch sú potrebné látky s nízkou molekulovou hmotnosťou a zároveň musí takáto fáza vznikať pri teplotách výrazne neprekračujúcich izbovú teplotu.



$$\text{RO-C}_6\text{H}_3(\text{OR})_2\text{-C(=O)-O-(CH}_2\text{)}_n\text{-O-C(=O)-C}_6\text{H}_3(\text{OR})_2\text{-OR}$$

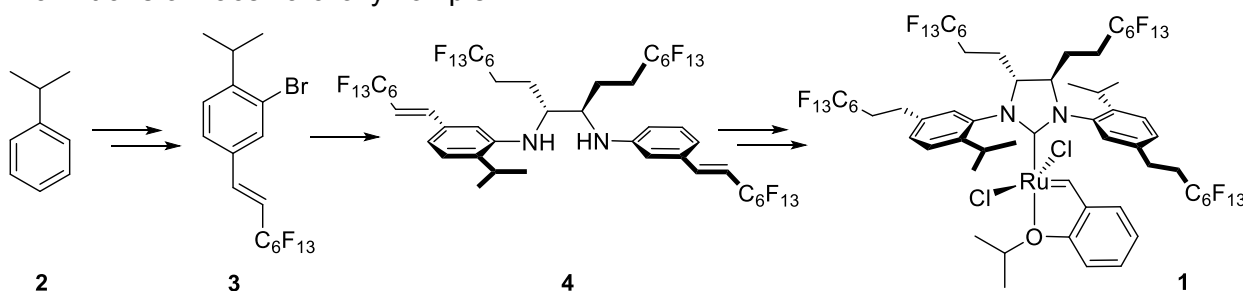
$$n = 2, 10$$



$$\text{R} = \text{C}_{14}\text{H}_{29}\text{O-C}_6\text{H}_4\text{-Y-C}_6\text{H}_4\text{-C(=O)-}$$

$$\text{Y} = -, \text{COO}, \text{N=N}$$

Cílem mé práce byla syntéza enantiomerně čistého fluorového analoga Hoveydo-Grubbsova prekatalyzátoru II. generace (**1**) umožňujícího asymetrickou metatezi alkenů. Díky čtyřem poly-fluorovaným řetězcům by navíc mělo být možné komplex **1** recyklovat fluorovými separačními metodami. Celá syntéza vychází z kumenu (**2**) a sestává z 9 kroků, kde klíčovými kroky byly Heckova reakce vedoucí k polyfluoralkenu **3**, jeho Buchwaldův-Hartwigův coupling s chirálním diaminem na fluorový diamin **4**, příprava intermediární dihydroimidazoliové soli a její finální transformace na cílový komplex **1**.



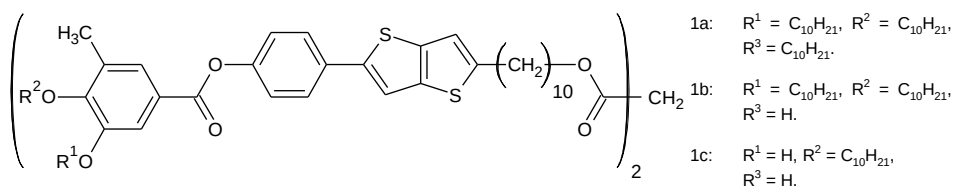
Sekce : Organická chemie M3

Syntéza nových kapalně-krystalických látek na bázi thieno[3,2-b]thiofenu

Autor: Bc. Roman Halaksa
Ročník: M2
Ústav: Organické chemie
Školitel: prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

Cílem práce je syntéza série nových kapalně-krystalických látek s potenciálem využití v optoelektronických aplikacích. Syntéza jádra spočívala v arylaci thieno[3,2-b]thiofenu v poloze 2 4-jodanisolem pomocí Stilleho zkřížené kaplinkové reakce. Syntéza ramen byla provedena alkylací methyl-hydroxybenzoátů decylbromidem za podmínek Williamsovy syntézy etherů.

Spojovací článek mezi jádrem a malonátem byl připraven monobromací dekan-1,10-diolu a následnou protekcí volného hydroxyly THP-skupinou. Derivatizace thieno[3,2-b]thiofenu v poloze 5 byla provedena převedením substrátu na lithnou sůl, která byla alkylována THPO – chráněným decylbromidem. Ramena budou k jádru připojena acylační reakcí decyloxybenzoylchloridy. Dimerizace molekuly bude provedena acylací malonyldichloridem.

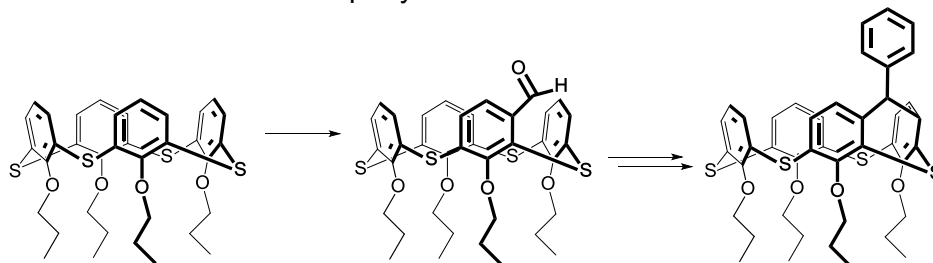


Sekce : Organická chemie M3

Derivatizace horního okraje thiacalix[4]arenu a následné intramolekulární přemostění

Autor: Victoria Tarus
Ročník: M1
Ústav: Organické chemie
Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

V naší skupině byla v nedávné době publikována unikátní metoda přípravy intramolekulárně přemostěných calixarenů, avšak přemostění thiacalix[4]arenů nebylo dosud zkoumáno. K tomuto účelu bylo připraveno několik derivátů thiacalix[4]arenů v *konické* konformaci, nesoucích funkční skupiny (např. $-CHO$, $-CH_2OH$, $-CH(OH)Ph$ atd.) v *meta*- a v *para*-poloze na horním okraji molekuly. Požadované přemostěné látky s jedinečnou strukturou a zafixovaným rigidním skeletem byly získané reakcí s Eatonovým činidlem. V průběhu tohoto výzkumu byla dále objevena unikátní regioselektivita při *ortho*-lithiační reakci, která dosud nebyla v literatuře popsána. *Ortho*-lithiace umožňuje jednokrokové zavedení různých derivátů do *meta*-polohy thiacalixarenu a tím otevírá široké možnosti využití těchto thiacalixarenů, například jako inherentně chirální receptory.



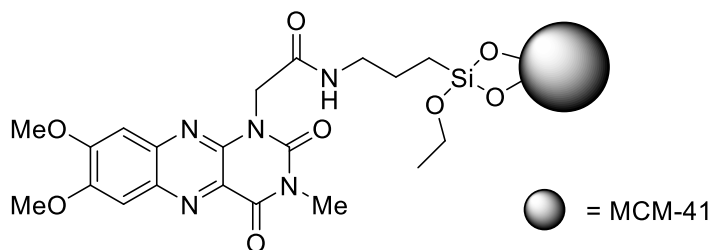
Sekce : Organická chemie M3

Heterogenně katalyzované [2+2] fotocykloadice

Autor: Jessica Špačková
Ročník: M1
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Eva Svobodová, Ph.D.

V naší laboratoři byla vypracována efektivní metoda pro fotoinicované [2+2] cykloadice s využitím derivátů flavinu. Tyto reakce byly prováděny v homogenním prostředí, kdy následně bylo nutné katalyzátor z reakční směsi odstranit sloupcovou chromatografií.

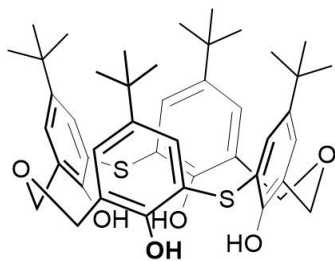
Navázáním fotochemicky aktivních molekul alloxazinu na povrch křemičitých nanočástic MCM-41 byl připraven nový heterogenní katalyzátor, jehož hlavní výhodou je zejména jeho snadná separace z reakční směsi - pouze filtrací. S pomocí tohoto katalyzátoru a viditelného světla byla provedena série reakcí na substrátech rozdílných elektronových vlastností za zisku cykloaduktů ve vysokém výtěžku a přijatelné čistotě.



Sekce : Organická Chemie B1

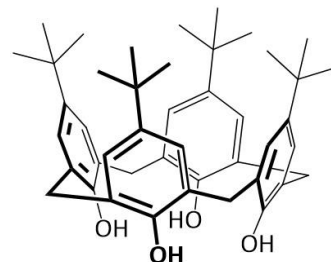
Syntéza calix[4]arenů se smíšenými můstkovými skupinami

Autor: Daniel Kortus
Ročník: B3
Ústav: Organické Chemie
Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.



Calix[4]areny se smíšenými můstkovými skupinami vznikají nahrazením methylenových spojek mezi jednotlivými fenolickými jádry calix[4]arenu spojkami sulfidickými či dimethylenetherickými. Tyto exotické sloučeniny jsou na poli supramolekulární chemie neprozkoumaným územím, je však zřejmé, že změny methylenových můstků mají razantní dopad na vlastnosti celého makrocyclu – od velikosti kavity přes flexibilitu a komplexační vlastnosti až po reaktivitu.

Cílem mé práce je syntéza takovýchto smíšených calix[4]arenů a následné studium jejich struktury a dynamického chování. Svou snahu soustředím na studium chemických a fyzikálních vlastností těchto pozoruhodných látek a na jejich možnou aplikaci v praxi.

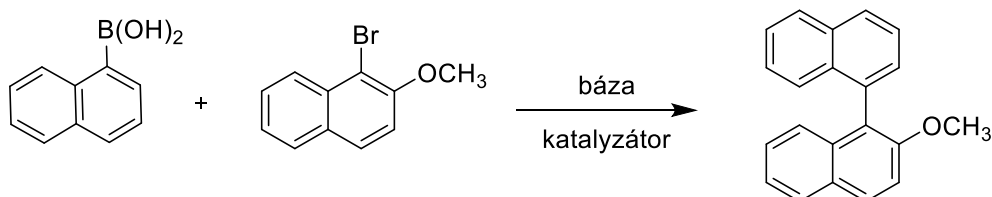


Sekce : Organická chemie B1

Príprava substrátov pre enantioselektívny Suzukiho-Miyaurov cross-coupling

Autor: Michal Bobek
Ročník: B2
Ústav: Organickej chémie
Školiteľ: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

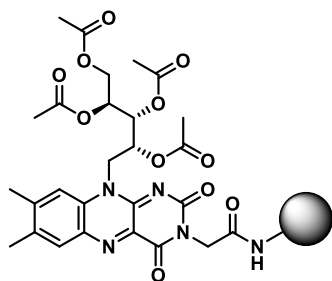
V našom laboratóriu sa snažíme pripraviť enantioselektívne katalyzátory pre Suzukiho-Miyaurov cross-coupling. Vhodnou modelovou reakciou pre testovanie týchto katalyzátorov je príprava axiálne chirálnych binaftylových derivátov. Moja práca spočívala v príprave substrátov pre túto reakciu. Pripravil som naftylboronovú kyselinu a 1-brom-2-methoxynaftalen, ktoré som ďalej nechal reagovať s komerčným katalyzátorom v rôznom bazickom prostredí. V prvom prípade som použil K_2CO_3 , v druhej reakcii KOH a nakoniec t -BuOK. V prvých dvoch prípadoch som dosiahol konverziu 100 %, zatiaľ čo pri použití t -BuOK sa katalyzátor rozložil a dosiahol som len 62% konverzie.



Sekce : Organická chemie B1

Využití materiálu MCM-41 pro přípravu heterogenních fotokatalyzátorů

Autor: Martin Kurfiřt
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školiteľ: Ing. Eva Svobodová, Ph.D.



V posledních letech jsou, z důvodu nízké ceny, jednoduchého použití a šetrnosti k životnímu prostředí významně zkoumány fotokatalytické systémy založené na organických barvivech a viditelném světle. Imobilizace fotoaktivních molekul katalyzátoru na vhodný nosič vede k dalšímu zjednodušení fotokatalytického systému.

Má práce je zaměřena na přípravu heterogenních fotokatalyzátorů na bázi eosinu yellowish a riboflavin tetraacetátu. Jejím cílem je tyto látky imobilizovat na částicích materiálu MCM-

41, který se pro tento účel jeví jako velice vhodný a to hlavně z důvodu jeho stability, transparentnosti a velkého měrného povrchu. Součástí mé práce bylo také testování připravených heterogenních katalyzátorů v modelových reakcích.

Sekce : Organická chemie B1

Příprava merkapturových kyselin odvozených od aromatických aminů a nitroaromátů

Autor: Michaela Pechová
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: doc. Ing. Igor Linhart, CSc.

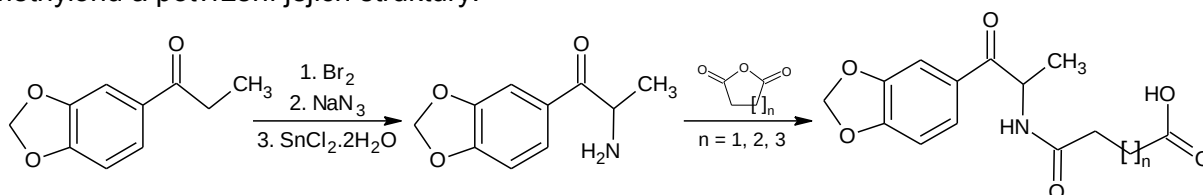
Aromatické aminy a nitroaromáty se v organismu metabolicky aktivují na reaktivní arylnitreniové ionty, které se vážou na nukleofilní centra v DNA a podléhají dalšímu metabolismu až na *N*-acetyl-*S*-aminoarylcysteiny, aminoarylmerkapturové kyseliny. Série methyl-nitroarylmerkapturátů odvozených od methyl- a dimethylanilinů, byla připravena reakcemi methyl- a dimethylfluor-nitrobenzenů s methylesterem *N*-acetyl-*L*-cysteinu v přítomnosti báze. Methylové skupiny působí na aromatické jádro kladným indukčním efektem a značně snižují efektivitu aromatické nukleofilní substituce. Po zvýšení teploty a prodloužení reakční doby se výtěžnost těchto reakcí zvýšila. Výchozí komerčně nedostupný 1-fluor-2-methyl-4-nitrobenzen byl připraven tepelným rozkladem příslušné diazoniové soli. Podmínky rozkladu byly optimalizovány k dosažení vysokého výtěžku. Připravené látky budou převedeny na příslušné aminoarylmerkapturové kyseliny redukcí nitroskupiny vodíkem na palladiu a hydrolýzou esteru.

Sekce : Organická chemie B1

Syntéza normethylonu a jeho konjugátů s dikarboxylovými kyselinami

Autor: Veronika Dvořáčková
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Michal Himl, Ph.D.

Normethylon je základní metabolit methylonu. Methylon patří mezi tzv. „nové syntetické drogy“, deriváty katinonu. Řadí se tedy mezi psychotropní substance, které se využívají jako náhrada za drogy taxativně zakázané. Cílem práce bylo připravit normethylon a jeho tři amidické adukty (konjugáty) s kyselinou jantarovou, glutarovou a adipovou, jako pravděpodobné metabolity methylonu z biotransformace 2. fáze. Připravené látky byly využity v rámci metabolické a farmakokinetické studie na potkanech pro identifikaci metabolitů methylonu a potvrzení jejich struktury.

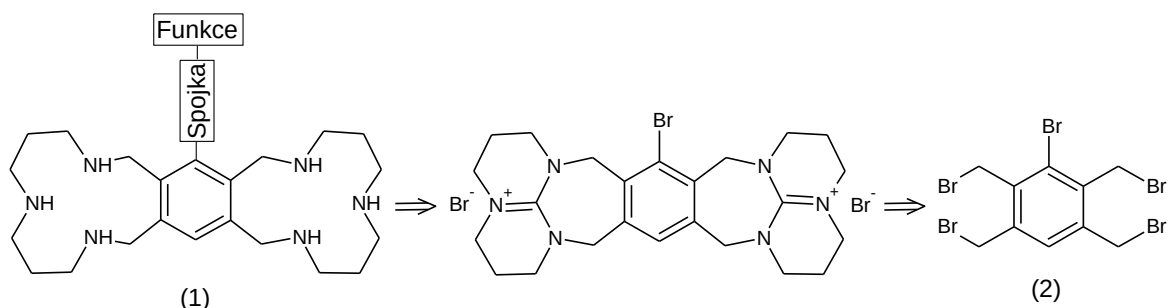


Sekce : Organická chemie B1

Syntéza 3-brom-1,2,4,5-tetrakis(brommethyl)benzenu

Autor: Vít Kotrbatý
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: doc. Dr. Ing. Jana Hodačová

V naší laboratoři se zabýváme syntézou makrocyclických molekul obecné struktury (1), jejichž zinečnaté a měďnaté komplexy mohou sloužit jako modely metaloenzymů, schopné katalyzovat štěpení P-O vazby fosfodiesterů. Cílem mé práce je najít optimální syntetickou cestu pro přípravu prekursoru (2), který je poté možno převést sekvencí reakcí na sloučeninu (1). Dostupné výchozí látky pro syntézu sloučeniny (2) jsou duren a benzen-1,2,4,5-tetrakarboxylová kyselina. Budou prezentovány 3 alternativní postupy pro přípravu prekursoru (2).

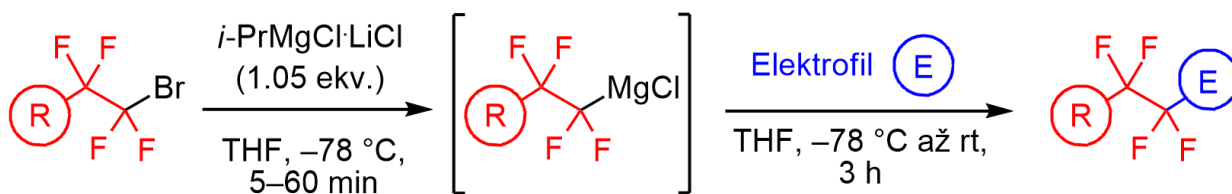


Sekce : Organická chemie B1

Nukleofilní tetrafluorethylace s využitím *in situ* vytvořených organohorečnatých činidel

Autor: Alena Budinská
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie a biochemie AV ČR, Ústav organické chemie
Školitel: Ing. Petr Beier, Ph.D.; prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Práce se zabývá přípravou substituovaných organohorečnatých činidel $\text{R}-\text{CF}_2\text{CF}_2-\text{MgCl}$, která jsou *in situ* generována z výchozích bromidů $\text{R}-\text{CF}_2\text{CF}_2-\text{Br}$ reakcí s $i\text{-PrMgCl}\cdot\text{LiCl}$. Po optimalizaci podmínek byla tato činidla testována v reakcích s širokou škálou elektrofilů, např. aldehydy, ketony, oxidem uhličitým, cyklickými sulfáty a sulfamidáty, N-sulfonyliminy, nitrony, diethyl-fosforochloridátem a nonaflylazidem. Na celkem 27 příkladech je ukázána nejen dobrá stabilita a vysoká reaktivita použitých činidel, ale také výborná selektivita metody, která toleruje mnoho funkčních skupin (např. nitroskupinu, esterovou skupinu či brom). Tento jednokrokový postup tak umožňuje přípravu látek nesoucích málo prozkoumané uskupení $-\text{CF}_2\text{CF}_2-$, které mohou sloužit jako potenciální stavební bloky ve farmaceutickém či agrochemickém průmyslu.

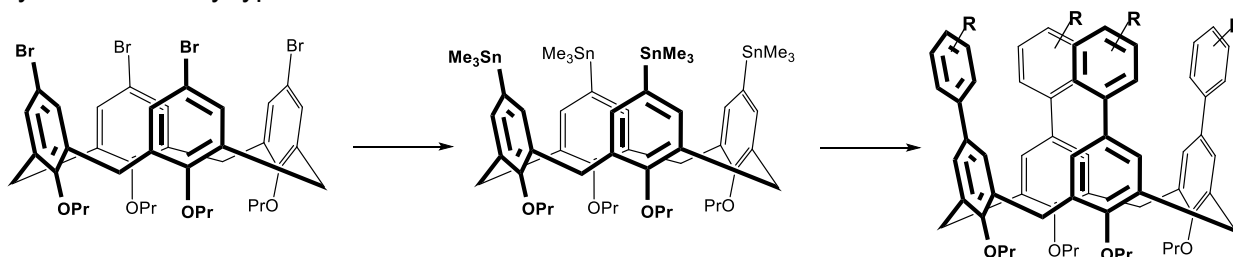


Využití organocínitých sloučenin v calixarenové chemii

Autor: Anastasia Surina
 Ročník: B3
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: Ing. Jiří Mikšátko

Zavedení organocínitých skupin na horní okraj calix[4]arenu výrazně rozšíří možnosti modifikace základního skeletu těchto makrocyclických látek. Tato práce se zabývá stannací horního okraje calix[4]arenu zafixovaném v *konické* a *1,3-střídavé* konformaci a využití těchto derivátů ke Stilleho cross-coupling reakcím. Na obou konformacích byly připraveny bis- a tetrakis(trimethylstannio) deriváty calix[4]arenu, které byly z reakční směsi jednoduše izolovány vysrážením v dobrých výtěžcích.

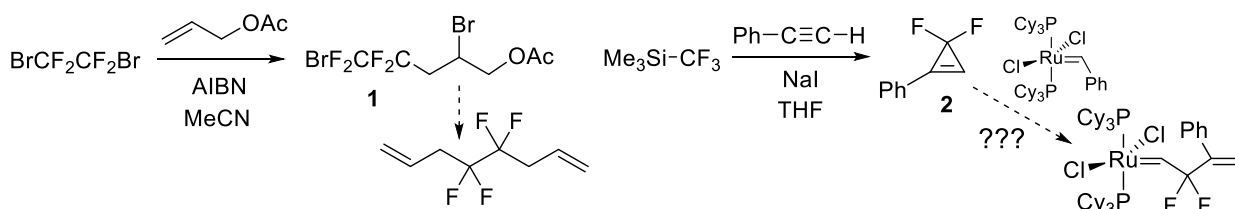
Na těchto látkách byly vyzkoušeny cross-coupling reakce Stilleho typu, které dále povedou k modifikaci kavity a zavedení různých funkčních skupin. Získané sloučeniny budou využity jednak k dalším derivatizacím těchto molekul a dále bude studována jejich schopnost vytvářet struktury typu MOF.



Fluoralkeny pro metateze s uzavřením a otevřením cyklu

Autor: Ester Valentová
 Ročník: B3
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

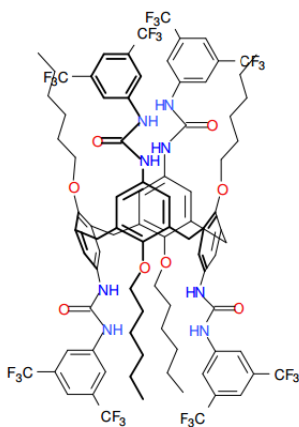
Zatímco metateze alkenů s uzavřením cyklu je účinnou metodou pro syntézu nových cyklických sloučenin, metateze alkenů s otevřením cyklu má za cíl získat nové typy dienů. Oba typy reakcí zatím prakticky nebyly využity v chemii polyfluorovaných sloučenin. Pro studium prvního typu reakcí jsem rozpracovala syntézu polyfluorovaného dienu a adicí 1,2-dibromtetrafluorethanu na allyl-acetát připravila odpovídající adukt **1**. Jako klíčový intermediát pro studium druhého typu reakcí jsem reakcí trimethyl(trifluormethyl)silanu (Ruppertova-Prakashova činidla) s fenyl-acetylenem získala 1-fenyl-3,3-difluorcyklopropen (**2**). Otevřením tohoto napnutého cyklu rutheniovými komplexy by měly vzniknout stabilní intermediární organokovové sloučeniny.



Sekce : Organická chemie B2

Ureidoderiváty 1,3-alternujícího calix[4]arenu – univerzální lapače aniontů

Autor: Vojtěch Hamala
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Markéta Řezanková



Calix[n]areny jsou makrocyclické sloučeniny, které mohou být použity jako molekulární lešení v supramolekulárních strukturách. Calix[4]areny se vyskytují ve 4 různých konformacích, předmětem této práce je 1,3-alternující isomer. Převedením calix[4]arenu na *p*-aminoderiváty a adicí na různě substituované fenylosokyanáty lze připravit *p*-ureidocalixareny, které jsou vhodnými receptory pro anionty.

Cílem této práce je příprava 1,3-alternujících ureido-receptorů z *p*-*tert*-butylcalix[4]arenu. Problémem 1,3-alternátů, bývá často nízká rozpustnost v organických rozpouštědlech. Z tohoto důvodu byly k substituci na atomech kyslíku využity hexylové skupiny. Komplexační vlastnosti připravených receptorů vůči vybraným aniontům budou zkoumány pomocí ^1H NMR titrací.

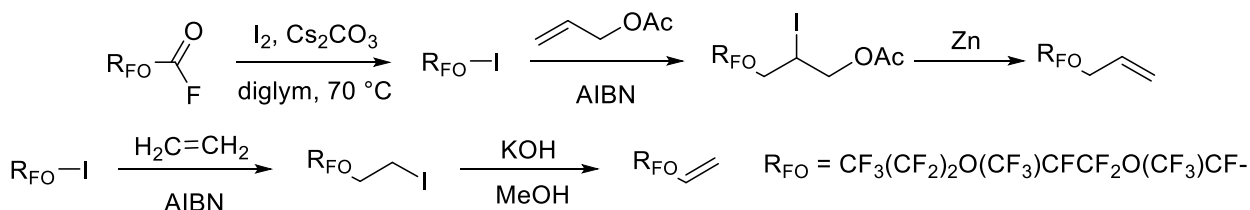
Sekce : Organická chemie B2

Polyfluoropolyoxaalkeny ako substráty pre metatézu alkenov

Autor: Róbert Obertík
Ročník: B3
Ústav: Organickej chémie
Školitel: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Zkřížená metatéza alkénů je výhodnou metodou pro přípravu vysoko fluorovaných diblokových zlúčenin s potenciálními medicímskými aplikáciami. Zlúčeniny modifikované perfluoropoly-etherovými reťazcami sú prekvapivo fluorofilnejšie než analogické polyfluoralkylované látky. Cieľom mojej práce preto bola príprava polyfluoropolyoxaalkénov ako kľúčových stavebných blokov pre metatézy alkénov. V prvom kroku som študoval transformáciu perfluor-2,5-dimethyl-3,6-dioxanonylfluoridu na perfluor-2-jod-5-methyl-3,6-dioxanonan.

Vzniknutý jodpolyfluor-polyether som v druhom kroku podrobil radikálovej adícii na etén a allylacetát. Produkty som s výhodou izoloval nízkoteplotnou fluorovou extrakciou pomocou hydrofluoretheru HFE 7100. V poslednom kroku som sa venoval elimináciám na cieľové substráty.



Deriváty chinazolinu: nová syntéza ardeeminu a jeho analogů

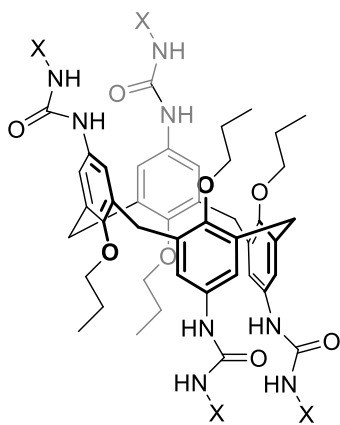
Autor: Václav Chmela
Ročník: B3
Ústav: Organická chemie a biochemie AV ČR
Školitel: Ullrich Jahn, Dr. habil.

Deriváty chinazolinu jsou rostoucí skupinou alkaloidů, které mají různou biologickou aktivitu.^[1] Biosynteticky jsou tvořeny z tryptofanu a anthranilové kyseliny se začleněním dalších jednotek aminokyselin. Důležité je, že některé z nich vykazují rezistenci k antibiotikům či kanceroterapeutikům. Díky tomu je možné podávat léčivo v nižších koncentracích, což vede ke zvýšenému zájmu o nové syntetické postupy v chemii chinazolinu. Náš přístup využívá unikátní silikagelem zprostředkovanou dvojitou kondenzaci, kterou jsme s úspěchem použili ke zkrácení totální syntézy ardeeminu.

[1] Kshirsagar, U. A. *Org. Biomol. Chem.* **2015**, *13*, 9336-9352.

Nové deriváty calixarenů v 1,2-alternující konformaci

Autor: Tereza Horáčková
Ročník: B3
Ústav: Organická chemie
Školitel: Ing. Markéta Řezanková



Calix[4]areny mohou být stabilizovány ve čtyřech základních konformacích: kónické, částečně kónické, 1,2-střídavé (1,2-alternující) a 1,3-střídavé. Právě calixareny v 1,2-alternující konformaci jsou ze všech konformerů nejméně dostupné a dosud nebyly dostatečně prozkoumány. Ze základního calix[4]arenu vznikají protočením dvou sousedních fenolických podjednotek kavitou makrocyclu a zastavením této rotace alkylací hydroxylových skupin dostatečně dlouhým alkylovým řetězcem.

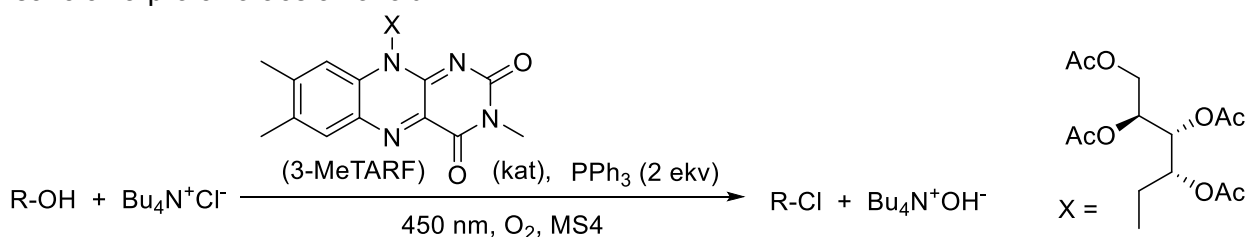
Tato práce je zaměřena na studium chování 1,2-alternátů a jejich možného využití. Derivatizací horního okraje byla připravena řada tetrasubstituovaných derivátů včetně tetranitrocalix[4]arenu, který byl následně zredukován na tetraaminoderivát. Z takto připravených látek byly reakcí s příslušným isokyanátem připraveny nové anionické receptory na bázi močoviny. Díky jedinečnému tvaru kavity 1,2-alternátu očekáváme zajímavé komplexační vlastnosti (např. vznik komplexů 1:2), které budou v budoucnu zkoumány.

Fotokatalytické substituce s využitím tetraacetylriboflavinu a trifenyfosfinu

Autor: Jitka Nykodemová
 Ročník: B2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: doc. Ing. Radek Cibulka, Ph.D.; Ing. Michal März

Hydroxylová skupina je špatně odstupující skupinou, což představuje problém při přímých substitucích v molekulách alkoholů. Jednou z možností aktivace hydroxylové skupiny je využití trifenyfosfinu, jako je tomu v případě Mitsunobuovy či Appelovy reakce. Intermediátem je alkoxyfosfoniová sůl, ze které následně vzniká atakem nukleofilu produkt substituční reakce a trifenyfosfinoxid.

V naší laboratoři byl navržen systém využívající 3-methyl-tetraacetylriboflavin (3-MeTARF) jako fotokatalyzátor. Metoda byla testována na sirných derivátech při Mitsunobuových reakcích a pro chlorace alkoholů.

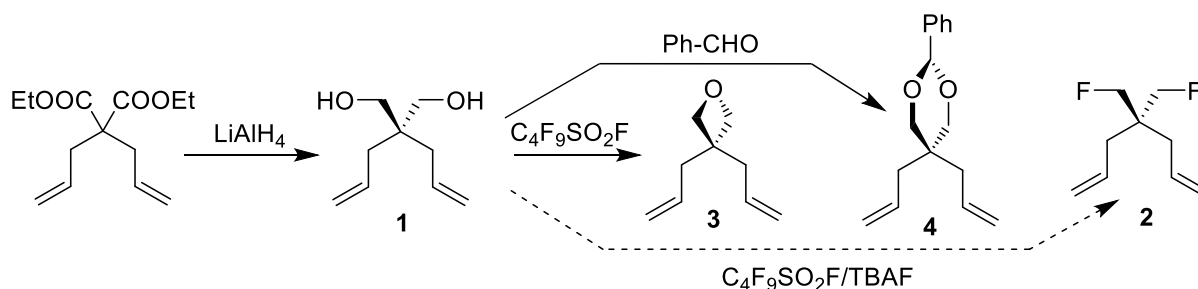


Sekce : Organická chemie B2

Substráty pro RCM na bázi 2,2-diallylpropan-1,3-diolu

Autor: Ondřej Pleskač
 Ročník: B2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Diethyl-diallylmalonát a jeho alkylovaná analoga jsou typickými modelovými dieny pro metatezi alkenů s uzavřením cyklu (RCM, ring-closing metathesis). Současné teoretické studie ukázaly, že koordinace esterových funkcí k rutheniu může významně ovlivnit kinetiku této reakce. Difluordien **2** je nekoordinující dien, jehož průběh RCM by mohl být snadno sledován pomocí ^{19}F NMR spektroskopie. Při pokusu o jeho syntézu jsem nejprve redukoval diethyl-diallylmalonát na diendiol **1**, jehož reakci s nonafluorbutanoylfluoridem jsem překvapivě získal diallyloxetan **3** jako hlavní produkt. Protekce diolu **1** benzaldehydem vedla k diallylovanému 1,3-dioxanu **4**.

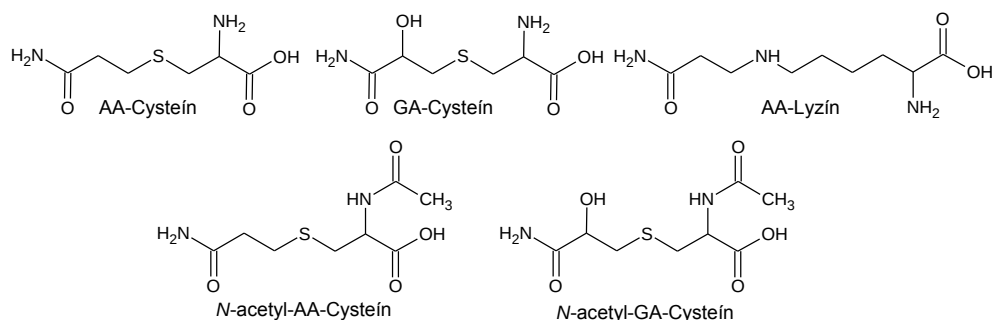


Sekce : Organická chemie B2

Syntéza referenčních standardů pro štúdium proteinových aduktů odvozených od akrylamidu

Autor: Hana Vachová
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: doc. Ing. Igor Linhart, CSc.

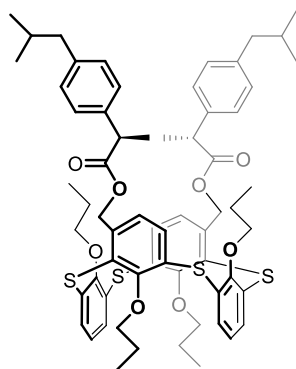
Akrylamid (AA) je mutagénny a karcinogénny priemyslový monomér. Vzniká tiež Maillardovou reakciou pri tepelnej úprave jedla a je súčasťou cigaretového dymu. Samotný AA ako aj produkt jeho metabolickej aktivácie, glycidamid (GA) sa môže viazať na nukleofilné SH alebo NH₂ skupiny aminokyselín v proteínoch. Cieľom mojej práce je syntetizovať adukty AA a GA s aminokyselinami cysteínom a lyzínom, ktoré môžu byť využité ako analytické štandardy v štúdiu aduktov s plazmatickými proteínmi a v biologickom monitorovaní expozície AA. Dosiaľ bolo pripravených 5 aduktov odvozených od AA:



Sekce : Organická chemie B2

Rezoluce inherentně chirálních thiacalix[4]arenů

Autor: Lenka Krepsová
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Ondřej Kunderát, Ph.D.

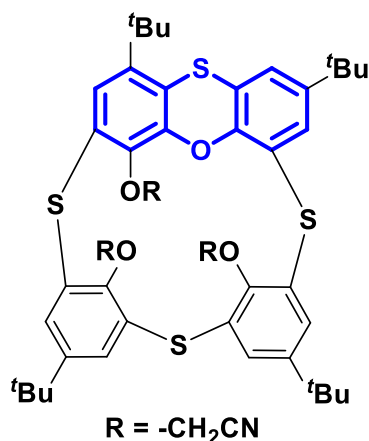


Meta-substituované thiacalix[4]areny jsou zajímavými inherentně chirálními výchozími látkami pro další syntézy. V současné době jsou získávány pouze ve formě racemických směsí, proto je pro jejich další využití důležité objasnit možnosti jejich rezoluce. Jedním z vhodných způsobů by mohla být jejich derivatizace za vzniku směsi diastereomerů s následnou separací pomocí sloupcové chromatografie, kterou se získají jednotlivé čisté diastereomery.

Cílem mé práce je příprava *meta*-substituovaných (thia)calix[4]arenů, jejich převedení na diastereomery esterifikací s použitím komerčně dostupné a chirálně čisté kyseliny. Následně bude provedena jejich izolace a ze získaných čistých diastereomerů odstraněna esterová skupina.

Použití orientujících médií k určení prostorové struktury phenoxanthiniových thiacalix[4]arenových derivátů

Autor: Markéta Tichotová
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Hana Dvořáková, CSc.



Cílem práce bylo využití metody měření residuálních dipolárních interakcí (RDC) k určení prostorové struktury dvou konformerů kyanomethoxy phenoxanthiniových thiacalix[4]arenů. Tato metoda se v posledních letech využívá v případech, kdy selhávají standardní metody na určování struktury, jako např. NOE, 3J interakční konstanty nebo X ray analýza.

Metoda měření RDC využívá anizotropní interakci, jejíž velikost pro danou CH vazbu přímo odpovídá orientaci této CH skupiny v magnetickém poli. RDC jsou pozorovatelné jen tehdy, když je analyt částečně orientovaný vzhledem k vnějšímu magnetickému poli tak, že výsledné štěpení je srovnatelné se skalárním. Částečného zorientování studovaných látek bylo dosaženo v roztoku kapalně krystalického poly- γ -benzyl-L-glutamátu (PBLG).

Kompetitivní asymetrická transfer hydrogenace: metoda pro strukturní ladění aktivního centra katalyzátoru

Autor: Radka Hrdličková
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Ondřej Matuška; doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Syntéza chirálně čistých sloučenin hraje důležitou roli v moderní organické syntéze, především pak v oblasti přípravy biologicky aktivních látek. Předkládaná práce se orientuje do oblasti homogenní katalýzy, konkrétně asymetrické transfer hydrogenace (ATH), která využívá Noyoriho polosendvičové katalyzátory typu $[RuCl(\eta^6\text{-aren})(N\text{-arylsulfonyl-DPEN})]$, které se vyznačují vysokou variabilitou své struktury. Tento fakt umožňuje návrh optimální struktury katalyzátoru s ohledem na hydrogenovaný substrát („catalyst tailoring“). V této práci byla aplikována metoda tzv. kompetitivní (konkurenční) asymetrické hydrogenace s cílem objasnění jak strukturních vlivů na straně katalyzátoru (aktivní centrum) na průběh ATH, tak určení favorizované struktury hydrogenovaného substrátu (reakční centrum) ze směsi prochirálních prekurzorů. Celkově bylo testováno pět různě obměněných struktur katalyzátoru a tři prochirální substráty dihydroisochinolinového typu. Jako zdroj vodíku sloužila azeotropní směs triethylaminu a kyseliny mravenčí (v molárním poměru 2:5). Průběh reakcí byl sledován v reálném čase pomocí *in situ* NMR monitoringu. Samotná kinetická data byla vyhodnocena aplikací Rader-Smithovy metody, která se ukázala jako vhodný nástroj pro jemné ladění aktivního místa pro konkrétní typ katalyzátoru a hydrogenovaného substrátu.

Sekce : Organická technologie a katalýza

Optimalizace hydrogenačních podmínek pro přípravu 2-dekalolu

Autor: Alexandr Berezovskiy
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Eliška Vyskočilová, Ph.D.

Předkládaná práce se zabývá přípravou 2-dekalolu hydrogenací β -naftolu. 2-Dekalol je látka žádaná mimo jiné v parfumářském průmyslu pro svoje vonné vlastnosti, přičemž je důležitým faktorem zastoupení jednotlivých isomerů.

V experimentální části byly hledány optimální podmínky pro hydrogenaci β -naftolu pro dosažení co největší selektivity na požadovaný 2-dekalol. Sledovanými podmínkami byly tlak a teplota v závislosti na použitém katalyzátoru. Nejdůležitější bylo najít vhodné podmínky v kombinaci s katalyzátorem NiSAT 320.

Nejvyšší selektivity (83,4 %) bylo dosaženo při použití katalyzátoru NiSAT 340 při 14 MPa a 170 °C. Hydrogenace probíhala 3 a půl hodiny. S použitím katalyzátoru NiSAT 320 bylo dosaženo největší selektivity 77,7 % při 12 MPa a 180 °C. Hydrogenace probíhala 3 hodiny.

Sekce : Organická technologie a katalýza

Testování aldolových kondenzací

Autor: Martin Rott
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Eva Vrbková; prof. Ing. Libor Červený, DrSc.

Cílem práce bylo nalezení optimálních podmínek aldolové kondenzace *p*-methylbenzaldehydu s propanalem, jejíž produkt, po následné hydrogenaci, slouží k přípravě parfémových kompozic a testování katalyzátorů (alumina modifikovaná KOH nebo K₂CO₃) při aldolové kondenzaci benzaldehydu s alifatickými *n*-aldehdy C₄ – C₈.

V první části práce byl sledován vliv teploty, molárního poměru reaktantů, typu a množství homogenního katalyzátoru. Nejlepších výsledků bylo dosaženo při laboratorní teplotě, použití 36% roztoku KOH jako katalyzátoru, molárním poměru *p*-methylbenzaldehyd : propanal : katalyzátor 1:2:0,2. Za těchto podmínek bylo dosaženo konverze 84,3 % a selektivity na produkt smíšené aldolové kondenzace 90 %.

Ve druhé části práce byl sledován vliv množství draslíku na dvou typech modifikované aluminu na konverzi aldehydu a selektivitu na produkt smíšené aldolové kondenzace. Při použití kratších aldehydů jako reaktantů bylo dosaženo lepších výsledků oproti delším aldehydům. Vzhledem k teplotě lázně (120 °C) přesahující teplotu varu kratších aldehydů docházelo při reakci ke snížení jejich relativní koncentrace ve směsi a tím ke snížení selektivity autokondenzace *n*-aldehydů.

Sekce : Organická technologie a katalýza

Vliv rozpouštědla při selektivní hydrogenaci butylsorbátu

Autor: Bc. Aneta Semrádová
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Eliška Vyskočilová, Ph.D.

Práce se zabývá selektivní hydrogenací butylsorbátu na butyl-*cis*-hex-3-enoát, což je meziprodukt při výrobě jednoho z listových alkoholů *cis*-hex-3-en-1-olu. Při hydrogenaci byl použit rutheniový polosendvičový katalyzátor [Cp*Ru(butylsorbát)]Tf.

Prvním úkolem bylo zvolit vhodný poměr katalyzátoru a výchozí látky a následně celkový objem reakční směsi. Dále byl sledován vliv rozpouštědel (MTBE, DEE, DBE, MeOH) a následně ve vybraném rozpouštědle (MTBE) i vliv tlaku (0,5, 2, 4 a 5 MPa) na rychlost a selektivitu reakce. Vliv tlaku na reakci se ukázal podle očekávání - reakční rychlost s tlakem rostla a selektivita byla na tlaku nezávislá. Pro reakci se ukázalo vhodné použít 5% hmotnostní podíl katalyzátoru k výchozí látce a 6 ml reakční směsi v celkovém objemu.

Jako nejlepší z vyzkoušených podmínek se ukázala teplota 50 °C, MTBE, 5% hmotnostní podíl katalyzátoru a výchozí látky, 6 ml reakční směsi a tlak 5 MPa v heterogenním uspořádání, kdy bylo po 90 minutách dosaženo téměř 80% konverze výchozí látky s 99% selektivitou.

Sekce : Organická technologie a katalýza

Optimalizace přípravy hexylcinnamaldehydu

Autor: Anton Varlamov
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Eva Vrbková; Ing. Eliška Vyskočilová, Ph.D.

Práce se zabývala přípravou hexylcinnamaldehydu aldolovou kondenzací benzaldehydu s oktanalem, nalezením optimálních reakčních podmínek a stanovením nečistot znehodnocujících produkt. Žádanou látkou je hexylcinnamaldehyd, vonná látka, která se používá v květinových kompozicích a k výrobě mýdel a parfémů.

V experimentální části byly testovány poměry výchozích látek, poměr rozpouštědla k výchozím látkám, množství a typ katalyzátoru. Dále byly testovány různé možnosti separace žádané látky. Nejlepšího výsledku – čistoty žádaného produktu 99,5 % se podařilo dosáhnout při izolaci rektifikací/destilací násady připravené za těchto podmínek: hmotnostní poměr reaktantů 2,48/1 ve prospěch benzaldehydu, hmotnostní poměr rozpouštědla (methanol) k benzaldehydu 1,25/1 a hmotnostní poměr roztoku KOH k oktanalu 1/2. Reakční doba byla 2,5 hodiny, laboratorní teplota.

Pomocí hmotnostní spektroskopie byly v produktu zjištěny tyto nečistoty: benzylalkohol, hemiacetal benzaldehydu a methanolu, hemiacetal oktanalu a methanolu, acetal benzaldehydu a methanolu, 1-fenyl-nonan-1-on, 2-hexyldek-2-enal a hexylcinnamyl alkohol.

Sekce : Organická technologie a katalýza

Kinetická studie a návrh technologie pro Reppeho proces

Autor: Bc. Jaroslav Aubrecht
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.; Ing. Ondřej Matuška

Butyndiol (2-butyln-1,4-diol), který slouží především jako hlavní prekursor pro výrobu 1,4-butandiolu (sloužící pro polymerace nebo výrobu tetrahydrofuranu) lze také nalézt jako důležitý intermediát u syntézy některých chemických specialit (plastifikátory, herbicidy nebo pryskyřice). Samotný butyndiol je syntetizován katalytickou reakcí formaldehydu a acetylenu tzv. Reppeho procesem. Tento proces využívá katalyzátor na bázi mědi a kobaltu. V průmyslu je používán pouze jeden komerčně dostupný katalyzátor, avšak v současné době byl vyvinut nový katalyzátor s vyšší aktivitou i lepšími texturními vlastnostmi, který je konkurenceschopný tomu již zavedenému.

Cílem práce byla kinetická studie naměřených dat, kdy za pomoci matematického softwaru a s využitím integrální metody výpočtu, byly počítány kinetické parametry, jako jsou rychlostní konstanta, předexponenciální faktor nebo aktivační energie pro reakce prováděné v přítomnosti nově vyvinutého katalyzátoru. Druhou částí bylo navržení technologie pro převedení procesu z laboratorního měřítka do velkokapacitní výroby. Důležitou součástí bylo vyvinutí a optimalizace procesu čištění produktu z reakční směsi. Nezbytnou otázkou bylo také zamyšlení se nad ekonomikou a efektivností purifikačních kroků.

Sekce : Organická technologie a katalýza

Využití Zr-MCM-41 pro přípravu perillového alkoholu

Autor: Bc. Barbora Fidlerová
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Eliška Vyskočilová, Ph.D.

Tento projekt se zabývá využitím mesoporézního molekulového síta MCM-41 modifikovaného zirkoniem k přípravě perillového alkoholu štěpením β -pinenoxidu. Dalšími produkty reakce byly myrtanal, myrtenol, perillový aldehyd a anthemol. Bylo zjištěno, že přítomnost bazického polárního aprotického rozpouštědla, jako je dimethylsulfoxid, vede ke vzniku perillového alkoholu se selektivitou až 58 %. Jako katalyzátor byla použita mesoporézní silika MCM-41 modifikovaná především zirkoniem, ale i železem. Z pokusů s různými katalyzátory vyplynulo, že zavedení železa na MCM-41 již modifikovaného zirkoniem nebo na čisté MCM-41, stejně jako množství zirkonia v katalyzátoru, nemění selektivitu reakce k perillovému alkoholu. Dále bylo zjištěno, že teplota nemá výrazný vliv na vznik produktu a je vhodné použít 10 hm. % Zr-MCM-41 s 5% obsahem kovu vzhledem k navážce substrátu, neboť při použití většího množství katalyzátoru nedošlo k vzrůstu selektivity k perillovému alkoholu.

Sekce : Organická technologie a katalýza

Porovnání povrchové kyselosti souboru pevných katalyzátorů metodou teplotně programované desorpce pyridinu

Autor: Lenka Libosvárová
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Jiří Krupka Ph.D.

Teplotně programovaná desorpce (TPD) bazických sorbátů je velice rozšířenou a dostupnou fyzikálně-chemickou metodou pro stanovení povrchové kyselosti tuhých katalyzátorů. Pyridin, vzhledem ke své tepelné stabilitě, je nejčastěji používaným bazickým sorbátem. Pyridin se chemicky váže na kyselé centra katalyzátoru a během lineárního zvyšování teploty v proudu inertního plynu dochází k jeho následné desorpci, která je monitorována TC a MS detektorem. Analýzou desorpčních spekter se získají data o síle a množství kyselých center. Byla stanovována kyselost u souboru katalyzátorů na bázi železnými-sloučeninami-modifikované siliky, a to za účelem studia korelace jejich kyselosti s katalytickými vlastnostmi pro Prinsovu cyklizaci isoprenolu s isovaleraldehydem na substituovaný tetrahydropyranol. Soubor zahrnoval jak kalcinované tak nekalcinované formy katalyzátorů vycházející z $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ nebo z $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$ jako výchozích Fe-sloučenin. Cílem práce byla optimalizace metodiky měření tak, aby následně změřená síla a koncentrace kyselých center odpovídala formám katalyzátorů, ve kterých se skutečně vyskytují v předmětné reakci, která probíhá v kapalné fázi při 90°C .

Sekce : Organická technologie a katalýza

Adice kyseliny mravenčí na cyklický alken

Autor: Bc. Hana Brunhoferová
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Jiří Trejbal, Ph.D.

Cyklopentanol je významným reakčním intermediátem v chemických procesech, avšak jako konečný produkt nalézá rovněž využití jako parfumační a farmaceutický solvent. Cyklohexanol je organický solvent, který působí jako intermediát při syntéze kaprolaktamu. Dnes se cyklopentanol vyrábí katalytickou hydrogenací cyklopentanonu. Cyklohexanol se vyrábí oxidací cyklohexanu, přičemž vzniká směs cyklohexanonu a cyklohexanolu. V této práci je zkoumána nová metoda výroby cyklického alkoholu - adice kyseliny mravenčí na cyklický alken a následná hydrolýza esteru. Cílem práce je testovat vybrané kyselé katalyzátory pro zkoumané reakce. Experimenty byly prováděny ve vsádkovém autoklávu za izotermních podmínek a při autogenním tlaku, výsledky byly analyzovány pomocí plynové chromatografie s TCD detektorem. Z výsledků je patrné, že míra polymerace výchozího alkenu je nejmenší při použití zeolitu ZSM – 5. Získané výsledky budou použity v návrhu dalších experimentů pro vývoj technologie cyklického alkoholu touto metodou.

Sekce : Organická technologie a katalýza

Syntéza dienových sloučenin a jejich následná hydrogenace pomocí homogenních rutheniových katalyzátorů

Autor: Adéla Karlíčková
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Maria Kotova; Ing. Eliška Vyskočilová, Ph.D.

Pro průmyslové syntézy chemických specialit (léčiva, vitamíny, vonné látky) bývají výchozí surovinou látky s jednou $-C=C-$ vazbou. Ty lze získat hydrogenací α,β -nenasycených sloučenin, jako je například kyselina sorbová. Pro její hydrogenaci na *Z*-hex-3-enovou kyselinu s vysokou selektivitou (96%) byl před nedávnem připraven katalyzátor $[Cp^*Ru(\text{kyselina sorbová})]CF_3SO_3$. Tato práce se zabývá syntézou C_6 dienických sloučenin a jejich následnou hydrogenací za použití homogenních rutheniových katalyzátorů typu $[Cp^*Ru(\text{dien})]CF_3SO_3$. Tzv. Steglichovou esterifikací byly připraveny následující estery: (2*E*,4*E*)-hexa-2,4-dien-1-yl benzoát, benzyl (2*E*,4*E*)-hexa-2,4-dienoát a (2*E*,4*E*)-hexa-2,4-dien-1-yl (2*E*,4*E*)-hexa-2,4-dienoát. Kysele katalyzovanou esterifikací byl připraven (2*E*,4*E*)-di-*n*-butyl mukonát. Součástí práce byla separace esterů v co nejvyšší čistotě sloupcovou chromatografií. Následné hydrogenace esterů byly prováděny v homogenním uspořádání s diethyletherem jako rozpouštědlem při 50 °C za tlaku 4 MPa po dobu 1 h. Hydrogenace všech zmiňovaných C_6 dienů probíhala selektivně na *Z*-hex-3-enové sloučeniny s vysokou selektivitou (až 97%).

Sekce : Organická technologie a katalýza

Příprava Timberolu

Autor: Markéta Spáčilová
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: prof. Ing. Libor Červený, DrSc.

Cílem této práce bylo nalézt optimální reakční podmínky pro třístupňovou syntézu Timberolu z citralu a pentan-2-onu. Timberol (1-(2,2,6-trimethylcyklohexyl)hexan-3-ol) je vonná látka s intenzivní dřevitou vůní. Prvním krokem přípravy je bazicky katalyzovaná aldolová kondenzace citralu s pentan-2-onem za vzniku pseudoethyliononu. Jako katalyzátory se osvědčily především 36% roztok hydroxidu sodného v molárním poměru citral : NaOH 1 : 0,6 (laboratorní teplota, konverze 98 % a selektivita 94 %) a 33% roztok methanolátu sodného v molárním poměru citral : MeONa 1 : 0,2 (lab. teplota, konverze 98 %, selektivita 96 %). Dalším krokem byla kysele katalyzovaná cyklizace pseudoethyliononu na ethylionon, ve které byly použity jak homogenní, tak heterogenní katalyzátory. Při použití heterogenních katalyzátorů reakce neproběhla. Jako homogenní katalyzátor byla použita kyselina fosforečná, za jejíž katalýzy proběhla cyklizace za jednu hodinu s totální konverzí. Vhodný objemový poměr kyselina fosforečná : pseudoethylionon byl 1 : 1. Posledním krokem syntézy Timberolu byla hydrogenace produktu cyklizace (ethyliononu) na Timberol. Pro hydrogenaci se ukázal jako nejlepší niklový katalyzátor Acticat 1600 nickel katalyst (5 MPa, 150 °C, selektivita 89 %). Získané výsledky jsou podkladem pro poloprávní podmínky přípravy Timberolu.

Sekce : Organická technologie a katalýza

Hydrogenace β -naftolu na β -dekalol

Autor: Votroubková Martina
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Eliška Vyskočilová, Ph.D.

Práce se zabývala optimalizací podmínek hydrogenace β -naftolu na β -dekalol s použitím rutheniových katalyzátorů. Rutheniové katalyzátory se s výhodou používají pro hydrogenaci alifatických aldehydů a ketonů na alkoholy, dále při hydrogenaci aromatických ketonů na alicyklické alkoholy nebo fenolu na cyklohexanol. β -Dekalol je bílá až žlutá kapalina a jeho *trans* isomery jsou využívány v parfumářském průmyslu pro své dřevnaté a kořeněné vonné vlastnosti. V rámci práce byl sledován vliv teploty, tlaku, typu katalyzátoru a jeho vlhkosti. Jako rozpouštědlo byl použit izopropylalkohol, sledované byly teploty 140, 160 a 180 °C a tlaky 12, 14 a 15 MPa. Použité katalyzátory obsahovaly 5 % Ru na aktivním uhlí nebo alumině s vlhkostí od 0 do 60 %. β -Dekalol vzniká ve formě 4 isomerů (4-ctt, 4-ccc, 4-tct, 4-ttc), které jsou v reakční směsi v různých poměrech. Totální konverze a selektivity na směs isomerů vyšší než 90 % bylo dosaženo s vysušeným katalyzátorem Ru/C 605 při 14 MPa a 160 °C po 30 minutách reakce, s katalyzátorem obsahujícím 50 % vlhkosti bylo za stejných podmínek dosaženo srovnatelné selektivity po 90 minutách. Při použití katalyzátoru Ru/Al₂O₃ je možné dosáhnout selektivity 92 % po 240 minutách za stejných podmínek.

Sekce : Organická technologie a katalýza

Příprava linkeru pro syntézu materiálu typu MOF vhodného k heterogenizaci rutheniového katalyzátoru

Autor: Jakub Chvosta
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Jan Pecháček; doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Materiály typu Metal Organic Frameworks přitáhly v posledních letech velkou pozornost, především díky své struktuře. Tyto porézní materiály mohou mít oproti jiným porézním materiálům velmi velký povrch a je možno tyto materiály funkcionalizovat, navíc jde velikost pórů snadno změnit na požadovanou velikost. Díky těmto vlastnostem mohou být použity mimo jiné jako nosiče pro heterogenizaci katalyzátorů. Předkládaná práce se zaměřuje na syntézu kyseliny 2-aminomethyl-6-(4-karboxyfenyl)-nikotinové, která může být využita k syntéze vhodného materiálu typu MOF, jenž může být dále využit jako nosič rutheniového katalyzátoru a tím posloužit k jeho heterogenizaci. Byla navržena a provedena osmikroková syntéza této kyseliny. Všechny meziprodukty a výsledná látka byly charakterizovány pomocí NMR spektrometrií a hmotnostní spektrometrií vysokého rozlišení.

Sekce : Výroba léčiv

Studium aktivity potencionálních urychlovačů transdermální absorpce na izolované prasečí kůži

Autor: Bc. Kristýna Dvořáková
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Mgr. Jarmila Zbytovská, Dr.rer.nat.

Lidská kůže tvoří bariéru mezi vnitřním a vnějším prostředím organismu, a chrání jej tak před nežádoucími vlivy z okolí. Unikátní bariérové vlastnosti kůže jsou lokalizovány v nejsvrchnější vrstvě pokožky zvané stratum corneum. Jelikož řada léčiv nemůže překonat tuto bariéru, je snahou nalézat nové urychlovače transdermální absorpce, které umožňují snazší průchod účinných látek kůží do systémové cirkulace. Tyto sloučeniny návratně oslabují kožní bariéru, čímž usnadňují vstup léčiva přes kůži do přilehlých tkání a krevního oběhu. Cílem této práce bylo in vitro porovnání aktivity tří derivátů morfolinu jako potencionálních urychlovačů transdermální absorpce a vyhodnocení vztahu mezi jejich strukturou a aktivitou. Jako modelové léčivo byl použit theofylin, což je poměrně malá molekula s vyváženou lipofilitou, a indomethacin, to je naopak molekula velká a lipofilní. Experimenty probíhaly na Franzových difúzních celách s akceptorovou fází simulující vnitřní prostředí organismu. Jako membrána byla použita prasečí kůže, která je svými vlastnostmi podobná kůži lidské. Výsledkem práce bylo porovnání účinnosti akceleratorů v závislosti na jejich struktuře. Nejúčinnější byl derivát s dodecylovým řetězcem. Zajímavé je, že zavedení dvojné vazby do řetězce nezvyšuje urychlovací účinek látky.

Sekce : Výroba léčiv

Vliv fyzikálních vlastností částic tabletoviny kombinovaného léčiva na farmakologické vlastnosti tablet

Autor: Hana Kletečková
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: doc. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.

Práce se zabývá analýzou vlivu fyzikálních vlastností částic tabletoviny na průběh a míru uvolňování léčivé látky z tablet kombinovaného léčivého přípravku. Důvodem provedení této studie je pozorovaná skutečnost, že tablety lisované z binární směsi monokomponent – kompakátu léčiva „A“ a granulátu léčiva „V“, vykazují extrémní citlivost farmakokinetických charakteristik na způsob a parametry výroby uvedených monokomponent. Bylo zkoumáno 5 šarží tabletovin, které obsahovaly obě monokomponenty připravené v různých provedeních výrobního procesu. U jednotlivých šarží byla změřena heliová hustota, jejíž výsledky indikovaly přítomnost uzavřené pórovitosti v šaržích s pomalejším rozpadem. Na základě měřených viskoelastických a sypaných vlastností komponent i tabletovin byly nalezeny rozdíly v průběhu komprese tabletovin, které ovlivňují porézní charakteristiky tablety a následně i její farmakologické vlastnosti. Klíčovou roli hrají odlišné povrchové charakteristiky jednotlivých monokomponent, které ovlivňují poměr mezi plastickými a fragmentačními změnami při lisování a ovlivňují tak mechanismus vzniku pórů, a tedy i rychlost pronikání kapaliny do tablety.

Sekce : Výroba léčiv

Monitorování hladin aldehydů při diabetes mellitus

Autor: Petra Krejčová
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Jana Vondroušová; Ing. Kamila Syslová, Ph.D.

Diabetes mellitus je chronické onemocnění se zvyšující se incidencí, která na celém světě od roku 1980 vzrostla o cca 80 % (v ČR dokonce o 150 %) na 900 tis. nemocných. Nejčastějším typem onemocnění je diabetes II. typu (cca 91 % nemocných), který je charakterizován postupně se zvyšující insulínovou rezistencí či malou produkcí insulínu a je velmi ovlivněn predispozicemi a životním stylem. Druhým nejčastějším výskytem diabetu je I. typ (v ČR zhruba 7 % nemocných), jehož příčinou je autoimunitní reakce organismu proti buňkám produkujícím insulín. Mezi ostatní formy diabetu (cca 2 % pacientů) se řadí např. gestační diabetes. Ten je obvykle zjištěn ve druhém trimestru těhotenství a jeho neléčení má za následek nejen komplikace u porodu, ale i zhoršenou adaptaci novorozence. Zároveň je tento typ diabetu předzvěstí výskytu diabetu II. typu. Cílem práce je nalezení molekul, která jsou odpovědné za poruchy metabolismu při daném onemocnění. Monitorování těchto látek by umožnilo provádět diagnostiku již v raných stádiích onemocnění a včasné zavedení léčby s minimalizováním rozvoje choroby. Jako vhodní kandidáti hrající důležitou roli v patofyziologii onemocnění byly v dané práci LC-MS metodami monitorovány reaktivní aldehydy (zejména methylglyoxal).

Sekce : Výroba léčiv

Využití MIPů jako nástroje pro separaci neurotransmiterů z komplexních biologických matric

Autor: Bc. Filip Pavlíček
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Jana Vondroušová; Ing. Kamila Syslová, Ph.D.

Součástí moderní medicínské diagnostiky je sledování specifických molekul, neboli biomarkerů, které se vyskytují v tělních tekutinách a tkáních (např. krevní plasma, moč) ve zvýšených či snížených koncentracích jako důsledek odehrávajících se patologických procesů (např. zvýšená hladina dopaminu při schizofrenii, snížená hladina dopaminu při Parkinsonově chorobě). Nedílnou součástí analytického zpracování je separace těchto sledovaných molekul z biologické matrice a správná interpretace získaných dat dle její specifity (např. údaje získané z krevní plazmy odráží děje v celém organismu - nespecifická matrice, zatímco informace z analýzy mozkové tkáně odráží lokálně odehrávající se procesy - specifická matrice). K separaci sledovaných látek pro následnou HPLC-MS analýzu lze využít molekulárně otištěných polymerů (MIP = Molecularly Imprinted Polymer). Práce se zabývá optimalizací syntézy MIPů pro separaci dopaminu z komplexních matric, zpracováním MIPů do formy efektivně využitelné pro extrakci z biologických matric a následně i optimalizací samotné extrakce na pevné fázi.

Sekce : Výroba léčiv

Vliv použité technologie výroby tabletoviny na mechanické vlastnosti vyráběných tablet

Autor: Barbora Pencová
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: doc. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.

Technologie výroby tabletoviny je kromě jejího složení nejvýznamnějším faktorem ovlivňujícím vlastnosti tablet. Tato práce se zabývá studiem vlivů různých jednotkových operací a parametrů výroby na mechanické vlastnosti připravovaných tablet, zejména na jejich pevnost. Pro práci byl jako modelová látka, kvůli svým obecně známým špatným lisovacím vlastnostem, zvolen paracetamol. Z něj byla na základě literárních údajů navržena formulace, která byla bez větších obměn zpracována technikami přímého lisování, vlhké granulace, kompaktace. Měněno bylo pouze množství přidané vody a případně kluzných látek. Byly také studovány kvantitativní vlivy konkrétních parametrů jak u procesu lisování, tak i procesu přípravy tabletoviny. U jednotlivých připravených šarží tablet byla změřena jejich výška a pevnost na přístroji pro měření pevnosti a rozměrů tablet a na základě této pevnosti byly jednotlivé šarže mezi sebou porovnány.

Bylo ověřeno, že lisovací tlak, vlhkost tabletoviny a rychlostní režim tabletování zásadně ovlivňují výsledné vlastnosti tablet. Nejlepších výsledků pevnosti bylo dosaženo při použití vyššího lisovacího tlaku, ideálního obsahu vlhkosti (4–6 %) a při přípravě tablet pomalým lisováním. Velkou roli hraje během tabletování také změna velikosti částic, kdy byly pevnější tablety získány z granulátu tvořeného největšími částicemi.

Sekce : Výroba léčiv

Příprava a charakterizace superparamagnetických částic pro izolaci DNA

Autor: Marek Štika
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Aram Zolal; Ing. Kamila Syslová, Ph.D.

Analýza DNA představuje v současné době jednu z klíčových součástí medicínální diagnostiky. Před samotnou analýzou je nejprve nutno DNA izolovat z biologického materiálu, k čemuž lze využít řadu postupů, například extrakci organickými rozpouštědly nebo separaci s využitím pevné fáze. Předkládaná práce je zaměřena na přípravu a charakterizaci superparamagnetických částic vhodných pro izolaci fragmentů DNA o určitých délkách. Izolační schopnost těchto částic je založena na principu reverzibilní sorpce DNA na jejich povrch. Nejprve byla koprecipitací syntetizována jádra částic tvořená magnetitem a stabilizovaná kyselinou olejovou. Další krok spočíval v obalení jader polymerní vrstvou, jež byla následně oxidována za účelem zavedení karboxylových funkčních skupin umožňujících reverzibilní sorpci DNA. Schopnost takto připravených částic izolovat fragmenty DNA byla následně ověřena s využitím gelové elektroforézy. Připravené částice byly též charakterizovány pomocí infračervené spektroskopie, rentgenové difrakční analýzy a rastrovacího elektronového mikroskopu.

Sekce : Výroba léčiv

Vývoj izolačních technik stratum corneum a jejích lipidů pro tvorbu modelu poškozené kožní bariéry

Autor: Bc. Lucie Suchá
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Mgr. Jarmila Zbytovská, Dr.rer.nat.

Stratum corneum (SC) je zevní vrstva pokožky, která je tvořena korneocyty a mezibuněčnou lipidovou hmotou. Toto uspořádání bývá připodobňováno ke struktuře „cihel a malty“. SC je vrstva zodpovědná za unikátní bariérové vlastnosti kůže; narušení složení lipidové hmoty je spojeno s řadou kožních onemocnění, jako je lupénka či atopická dermatitida. Pro studium patofyziologie těchto nemocí in vitro je nezbytné mít vyvinuté metodiky izolace a charakterizace jednotlivých částí SC. Cílem této práce bylo zavedení metodiky izolace SC z prasečí kůže a dále izolace lipidů z SC. Tyto lipidy byly dále charakterizovány pomocí tenkovrstvé chromatografie (TLC), infračervené (IČ) spektroskopie a rentgenové difrakce. V první části práce byly nalezeny optimální podmínky izolace lipidů SC. Tato metoda byla ověřena pomocí TLC, která nám potvrdila přítomnost požadovaných lipidů (ceramidů, mastných kyselin a cholesterolu). IČ spektroskopie potvrdila, že lipidy jsou v hexagonálním uspořádání, které mizí při 45°C. Rentgenová difrakce potvrdila lamelární uspořádání lipidů. Následně jsme testovali způsob narušení izolovaného SC a s tím související změny v IČ spektru. Závěrem lze konstatovat, že byla zavedena vhodná metodika izolace SC i jejích lipidů. Získané zkušenosti tvoří dobrý podklad pro vývoj modelu poškozené kožní bariéry.

Sekce : Výroba léčiv

Syntéza a charakterizace core-shell nanočástic dopovaných fluorescenčním barvivem

Autor: Alžběta Suchanová
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Dr. Kornelia Gawlitza; Ing. Jan Patera, Ph.D.

Cílem této práce bylo optimalizovat přípravu částic tvořených polystyrenovým jádrem a obalem ze siliky. Jádro tvořené polystyrenem může být syntetizováno v různých velikostech s vysokou monodisperzitou, zatímco obal tvořený silikou funguje jako stabilní ochranná vrstva, která může být jednoduše modifikována pomocí silanové chemie. Tento fakt umožňuje navázání vhodných skupin receptorů a poté použití v analytických metodách. Takto vytvořené částice mohou být využity pro detekci antropologických vzorků v odpadních vodách, především se jedná o diklofenak, kofein nebo karbazepamin. Aby bylo možné rozlišit jednotlivé částice v multiplexových testech, dopují se jádra různými fluorescenčními barvivy. V průběhu práce bylo zapotřebí optimalizovat množství látky, která umožňovala zesíťování molekuly, velikost vytvořeného jádra, hrubost jader, použité barvivo a podmínky reakce. K analýze vytvořených nanočástic v průběhu syntézy byla použita průtoková cytometrie, spektrofotometrie a TEM.

Sekce : Výroba léčiv

Lipofilní platičité komplexy jako potenciální chemoterapeutika

Autor: Lenka Vaneková
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Jan Svoboda; Ing. Kamila Syslová, Ph.D.

Nádorová onemocnění patří v dnešní době mezi nejzávažnější onemocnění na světě. Vzhledem k tomu, že rakovina je velmi komplexní a individuální nemoc nelze zavést univerzální léčbu. Proto je potřeba léčbu účelně kombinovat a optimalizovat. V současné době se k léčbě nejvíce využívá operativní zákrok v kombinaci s chemoterapií. V chemoterapii představují majoritní zastoupení platinové komplexy. Nejstaršími a dosud stále používanými platinovými cytostatiky s vysokou účinností jsou cisplatina a oxaliplatina, které ale vykazují řadu závažných nežádoucích účinků (např. neurotoxicita, nefrotoxicita a postupná buněčná rezistence). Ačkoliv byla již připravena řada látek na bázi cisplatiny a oxaliplatiny, pouze dvě z nich byly schváleny do klinické praxe (karboplatina, nedaplatina). Cílem naší práce bylo připravit čtvrtou generaci platinových cytostatik s Pt v oxidačním stavu IV, které vykazují vyšší cytostatické účinky než doposud zavedená platinová cytostatika a minimem nežádoucích účinků. Pro přípravu nových komplexů byly použity ligandy o různém objemu a lipofilitě pro navázání jak do axiálních, tak do ekvatoriálních poloh. Nově připravené komplexy byly následně analyticky charakterizovány pomocí metod HPLC-UV, LC-MS, FTIR a XRD. Biologická aktivita byla testována na vybraných nádorových i nenádorových buněčných liniích pomocí MTS testů cytotoxicity.

Sekce : Výroba léčiv

Příprava a charakterizace lipidových nanočástic obsahujících indomethacin pro transdermální aplikaci

Autor: Aneta Vovesná
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Mgr. Jarmila Zbytovská, Dr.rer.nat.

Aplikací léčiva transdermální cestou je možné dosáhnout nižšího výskytu vedlejších efektů, stabilní hladiny léčiva v plazmě či cíleného podání aktivní látky. Bohužel, nízká propustnost kůže a nevhodné fyzikálně-chemické parametry mnohých léků jsou značně limitující pro transdermální absorpci. Tyto problémy lze vyřešit zabudováním aktivní látky do lipidových nanočástic. Cílem této práce je formulace nesteroidního antiflogistika indometacinu do lipidových nanokapsul a sledování vlivu této formulace na transdermální absorpci. Práce je nejdříve zaměřena na optimalizaci složení nanoemulzní formulace s cílem dosažení maximální koncentrace indometacinu v částicích. Následně pak na inkorporaci indomethacinových nanočástic do lékové formy typu gelu a krému. Výsledné formulace byly podrobeny permeaci přes prasečí kůži a polykarbonátové filtry na Franzových difuzních celách za účelem stanovení prostupnosti danou bariérou. Ke stanovení koncentrace prošlého léčiva byla použita vysokoúčinná kapalinová chromatografie. Výsledky experimentu ukázaly, že nanoformulace léčiva vykazuje účinnější prostupnost kožní bariérou než jeho volná forma.

Sekce : Výroba léčiv

Príprava a charakterizácia lipidických nanonosičov s obsahom ceramidov

Autor: Bc. Henrieta Žbirková
Ročník: M2
Ústav: Organické technológie
Školiteľ: Mgr. Jarmila Zbytovská, Dr.rer.nat.

Podstatou niekoľkých hojne zastúpených dermatologických ochorení (napr. lupénka či atopická dermatitída) sú súvisiace so zníženou hladinou ceramidov v najvrchnejšej vrstve kože stratum corneum (SC). Pre lokálnu liečbu sa aplikujú kortikoidy, ktoré majú radu rôznych nežiadúcich účinkov. Topická aplikácia ceramidov by mohla byť vhodnou terapiou, je však obmedzená jej nízkou priestupnosťou SC. Jednou z možností, jak cieľiť ceramidy do SC je využití lipidových nanonosičov. Cieľom tejto práce bolo vyvinúť lipidové nanonosiče (nanočastice a lipozomy) s obsahom ceramidov a optimalizovať dané formulácie, ich inkorporačné kapacity a stability. Pre prípravu lipidových nanonosičov bola využitá metóda fázovej inverzie za zvýšenej teploty a vysokotlaková homogenizácia. Analyzovala som zmeny veľkosti a polydisperzity častíc v týchto systémoch v závislosti na metóde, a na čase a spôsobe uchovávaní. Do lipidových nanočastíc sa podarilo inkorporovať 1,6 % ceramidu. Tieto častice boli stabilné 30 dní. Do lipozomov sa podarilo inkorporovať 0,48% ceramidu. Ako výhodné sa v oboch systémoch javí využitie močoviny vo vodnej fáze a ekvimolárnej zmesi ceramidu, mastné kyseliny a cholesterolu oproti samotnému ceramidu.

Sekce : Výroba léčiv

Vývoj diagnostického testu na bázi LFIA pro rychlou detekci biomarkeru karcinomu ovarii

Autor: Bc. Šárka Císařová
Ročník: M2
Ústav: Organické technológie
Školiteľ: Ing. Aram Zolal, Ing. Kamila Syslová, Ph.D.

V současné době je věnována velká pozornost výzkumu neinvazivních diagnostických metod pro rychlé odhalení rakovinného bujení v organismu. Tyto metody by měly umožňovat detekci rakovinových markerů v biologických matricích (moč, pot, aj.) již v raných fázích progresu, což u řady typů rakoviny zvyšuje šanci na včasnou a úspěšnou léčbu. Příkladem obtížně diagnostikovatelného onemocnění je rakovina ovarii, jež je právě kvůli asymptomatickému průběhu často diagnostikována až v pokročilém stádiu, což zpravidla znamená nízkou úspěšnost léčby. Za velmi slibnou diagnostickou metodu je považována metoda založená na bázi lateral flow immunoassay (LFIA). Základním principem metody je kombinace chromatografie s imunochemickými reakcemi. Během testování dojde k navázání značených protilátek na sledovaný antigen a následnému zachycení komplexu protilátka-antigen na testovací linii. Výsledkem je zbarvení testovací linie, čímž je dokázána přítomnost sledovaného antigenu jakožto biomarkeru rakoviny ovarii vznikajícího v organismu současně s nádorem. Hlavním úkolem této práce je vyrobení diagnostického testu na bázi LFIA, který by dokázal odhalit přítomnost biomarkeru rakoviny ovarii v biologických matricích.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Alternativní cesta přípravy prekursoru Fingolimodu za využití antimarkovnikovské reakce

Autor: Petra Ruskayová
Ročník: B3
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Martin Kindl; doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Fingolimod (= 2-amino-2-[2-(4-oktylfenyl)ethyl]propan-1,2-diol) je léčivá látka, která patří do skupiny imunosupresiv. Tato aktivní farmaceutická substance se používá k symptomatické terapii autoimunitního onemocnění, kterým je roztroušená skleróza. Výše zmiňovaná léčivá látka se v dnešní době nejčastěji připravuje chemickou modifikací z myriocinu, což je aminokyselina izolovaná z hub *Mycelia sterilia*. Předkládaná práce se zabývá alternativní cestou syntézy, kdy klíčový krok syntézy je řešen antimarkovnikovskou adicí vody na CC trojnou vazbu (hydratace *p*-ethynyloktylbenzenu za vzniku 2-(4-oktylfenyl)acetaldehydu) s využitím připraveného vysoce selektivního katalyzátoru – $(\text{Ru}(\text{C}_5\text{H}_5)(\text{CH}_3\text{CN})[\text{C}_{21}\text{H}_{22}\text{NP}]_2^+\text{PF}_6^-)$. Prvotně byly testovány i další katalytické systémy, stejně jako byl posuzován vliv použitého rozpouštědla na aktivitu katalyzátoru a další reakční parametry jako je teplota, poměr vody a substrátu, poměr katalyzátoru a substrátu aj., pro dosažení maximálního výtěžku za reálných podmínek.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Testování fosfinových ligandů pro anti-Markovnikovskou hydrataci alkynů

Autor: Jiří Adamec
Ročník: B3
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Martin Kindl; doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Trojná vazba je z hlediska organických syntéz velice zajímavým objektem, který v reakcích poskytuje značné množství produktů užitečných pro farmaceutický průmysl. Jedním z nich jsou i aldehydy vzniklé anti-Markovnikovskou hydratací terminálních alkynů. Jelikož je však při této reakci favorizován stabilnější a energeticky výhodnější keton, je třeba reakci „pomoci“, aby vznikl námi žádaný produkt. V této době se k tomuto účelu používají nejčastěji katalyzátory na bázi ruthenia s fosfinovými nebo bipyridinovými ligandy.

V této práci byl zkoumán vliv fosfinových ligandů, obsahujících dusík s různou bazicitou, na aktivitu a selektivitu katalyzátoru v modelové hydrataci hept-1-ynu. Testované fosfinové ligandy obsahují různé heterocykly s jedním či více atomy dusíku (pyridin, pyrazol atd.). Právě dusík má velmi významný vliv na rychlost hydratace.

Testy ukázaly, že struktury obsahující methylem substituovaný dusík v pětičlenném kruhu, vykazují velmi slibné výsledky při anti-Markovnikovských hydratacích alkynů.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Porovnání vlastností acykloviru různých šarží a jejich vliv na přípravu tablet

Autor: Kateřina Bezpalcová
Ročník: B3
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Jan Patera, Ph.D.

Cílem této práce bylo nalézt takový parametr účinné látky acyklovir, který ovlivňuje lisovatelnost jejího granulátu. Bylo studováno šest vzorků účinných látek z odlišných šarží. Účinné látky byly podrobeny analýzám popisujících jejich fyzikálně-chemické vlastnosti. Mezi tyto analýzy patřila skenovací elektronová mikroskopie, laserová difrakce popisující distribuci velikosti částic, inverzní plynová chromatografie popisující povrchovou energii. Z účinných látek a pomocných látek byly připraveny granuláty postupem, který je využíván při komerční výrobě. Tyto granuláty byly použity pro laboratorní výrobu tablet, které byly podrobeny lékopisným zkouškám, jako je pevnost tablet v tahu, oděr, rozpad a disoluce tablet. Bylo zjištěno, že povrchová energie ovlivňuje plasticitu, ejekční napětí a rozpad tablet. Tato predikce může být rozhodujícím faktorem při výběru vhodné šarže účinné látky pro výrobu kvalitních tablet.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Vliv složení potahovacích směsí a pracovní teploty nanášení na permeační a mechanické vlastnosti filmového potahu

Autor: Petr Hubáček
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: doc. Ing. Pavel Čapek, CSc.

Tato práce se zabývá přípravou potahovaných tablet při různých teplotách sušícího vzduchu pro dvě potahovací směsi v laboratorních podmínkách. Integrita potahu tablet byla hodnocena podle jejich propustnosti pro dusík, což je metoda nedestruktivní pro tabletu (a potah) a dovoluje ověřování propustnosti po každé jednotkové operaci. Pro snadné a jednoduché porovnání propustnosti potažených a nepotažených tablet se užívala doba permeace definovaná jako pokles tlakové výchylky dusíku na desetinu původní hodnoty. Základní podmínka proveditelnosti hodnocení byla splněna: dusík tek l nepoškozenými potaženými tabletami mnohem pomaleji než nepotaženými či potaženým s poškozením.

Výšky vrstev potahu se lišili v závislosti na teplotě sušícího vzduchu i na použité potahovací směsi. Vliv teploty při potahování byl nejednoznačný a rozdílný pro obě potahovací směsi, což by mohlo souviset s jejich rozdílnými filmotvornými teplotami. Pro pozorovatelné poškození bylo nutno vyvinout sílu vyšší než 1,3 N ve směru kolmém k podstavě tablety, naopak dosažení síly 11,5 N mělo většinou za následek protržení vrstvy potahu. Čím rozsáhlejší bylo poškození, tím rychleji tek l dusík tabletami. K dosažení stejných procentuálních poklesů doby permeace bylo nutno použít v případě první směsi větší kolmé síly během poškozování tablet.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Porovnání fyzikálně-chemických vlastností modelové API různých šarží se zaměřením na povrchovou energii

Autor: Kateřina Anna Klegová
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Jan Patera, Ph.D.

Pochopení fyzikálně-chemických vlastností partikulární látky (nejen) farmaceutického charakteru je klíčové pro správný návrh respektive optimalizaci výrobního procesu konečné lékové formy. Pokud je k dispozici materiál od různých dodavatelů, je na místě vzorky mezi sebou porovnat a vybrat nejvhodnější, a to nejen z hlediska ekonomického, nýbrž i technologického. Jednotlivé šarže od téhož dodavatele by měly vykazovat stejné vlastnosti kvůli hmotnostní a/i obsahové stejnoměrnosti konečné lékové formy, ale také pro optimální plánování jednotkových operací, jakou je např. granulace. Tato práce porovnává několik šarží od dvou různých výrobců modelové farmaceutické substance v distribuci velikosti částic, smáčivosti respektive nasákavosti materiálu a zejména povrchové energii. Výstupem je kromě porovnání zmíněných vzorků, kdy hodnotícím parametrem jsou sypné vlastnosti, také podezření na nehomogenitu povrchu, resp. povrchové energie některých vzorků a ověření funkčnosti inverzní plynové chromatografie jako metody pro orientační stanovení specifického povrchu vzorku, jež budou předmětem dalšího výzkumu.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Vývoj katalyzátoru pro rozklad zbytkového peroxidu vodíku

Autor: Elizaveta Mutylo
Ročník: B2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Pavel Pícha; doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Ke sterilizaci izolátorů a udržování aseptických podmínek v provozních jednotkách výroby léčiv se používá technika VPHP („Vapor Phase Hydrogen Peroxide“), která je založená na antimikrobiálních vlastnostech H_2O_2 . Při běžném dekontaminačním cyklu se pracuje s atmosférou obsahující 300 – 500 ppm H_2O_2 , avšak po skončení procesu je potřeba tuto hodnotu snížit pod 0,1 ppm, která je legislativně schválena pro vstup do životního prostředí. Řešením tohoto problému je katalytický rozklad za vzniku kyslíku a vody. Trh s izolátorovou technikou nabízí katalyzátory s obsahem ušlechtilých kovů (Pt, Pd, Ag) nanesených na nosičích většinou aluminového nebo alumosilikátového typu. Ve snaze vyvinout ekonomičtější alternativu, byly zvoleny, pro svou vysokou aktivitu k rozkladu H_2O_2 a texturní vlastnosti vyhovující vysokým nárokům na hydrodynamické podmínky protékajícího vzduchu, katalyzátory s manganem na aluminosilikátových nosičích. Impregnací nosiče pomocí roztoku KMnO_4 a následnou kalcinací byly připraveny katalyzátory o různých koncentracích a objeveny limity tohoto postupu. Připravené katalyzátory byly testovány v laboratorním peroxyboxu a charakterizovány pomocí rentgenové práškové difrakce (XRD) a rentgenové fluorescence (XRF). Experimentálně bylo stanoveno, že dané katalyzátory mají potenciál nahradit katalyzátory na bázi ušlechtilých kovů.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Generátor par peroxidu vodíku pro dekontaminaci velkých prostor

Autor: Jakub Pekárek
Ročník: B2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Pavel Pícha; doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Pro efektivní VPHP (Vapour Phase Hydrogen Peroxide) dekontaminační cyklus je nutné generovat páry peroxidu vodíku v co nejkratším čase, bez zbytečných ztrát energie způsobených rozkladem peroxidu vodíku. Současné komerčně využívané metody jsou energeticky náročné a charakterizovatelné nízkou účinností, navíc jsou vytvořeny pro dekontaminaci malých uzavřených prostor. V současnosti se kapalný H_2O_2 odpařuje rozstříkáváním horkou tryskou do proudu horkého vzduchu nebo nástřikem na rozžhavenou kovovou plotnu. Tryska použitá pro zajištění potřebné nebulizace musí být velmi jemná, a tudíž vyžaduje použití H_2O_2 bez stabilizátorů, aby se neucpávala. Při odparu na kovové plotně zase dochází ve větší míře k tepelnému rozkladu H_2O_2 . Principem nově vyvíjeného přístroje je proudění suchého vzduchu o běžné teplotě a odpařování kapalného H_2O_2 pomocí mikrovln. Tato koncepce je vytvořena za účelem dekontaminace velkých veřejných prostor, jako jsou letiště, nádraží nebo linky metra. Vývoj je prováděn ve spolupráci se SÚJCHBO a to z důvodů současné politické situace v Evropě, kdy hrozí případné teroristické útoky na veřejná místa. V současné době se pracuje na větší verzi experimentálně otestovaného prototypu nového typu VPHP generátoru, který by měl být následně komerčně využíván.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Senzor na detekciu nízkých koncentrací pár peroxidu vodíku

Autor: Tomáš Skačányi
Ročník: B3
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Pavel Pícha; doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Detekcia nízkych koncentrácií plynnej fázy peroxidu vodíku v rádoch jednotiek ppm sa dá použiť na niekoľko účelov : Detekcia peroxovýbušnin, ktoré pri samovoľnom rozklade uvoľňujú H_2O_2 ; V lekárstve na diagnostiku astmy, cystickej fibrózy, zápalu dýchacích ciest, pretože H_2O_2 je významný marker týchto ochorení (doposiaľ určované z kondenzátu vydychovaného vzduchu); Alebo po skončení VPHP dekontaminačného procesu, kedy je potrebné znížiť pracovnú hodnotu koncentrácie peroxidu vodíku pod 1 ppm. Takto nízka hodnota je vyžadovaná regulačnými autoritami (OSHA, EMA). Komerčne dostupné senzory buď nedokážu tak nízke koncentrácie peroxidu detekovať alebo je ich cena vysoká. Preto cieľom tejto práce bolo zostrojiť a otestovať senzor schopný detekovať nízke koncentrácie H_2O_2 , ktorý je na rozdiel od komerčne dostupných fungujúcich na elektrochemickom princípe, schopný zaznamenať rozkladné teplo pomocou elektrotechnických súčiastok, na vhodnom katalytickom povrchu. Pozornosť bola venovaná popisu starnutia a degradácie katalytického povrchu a vplyvu javov ovplyvňujúcich jeho výsledný signál ako relatívna vzdušná vlhkosť, teplota.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Vývoj metody pro separaci dopaminu z cerebrospinálního moku prostřednictvím molekulárně otištěných polymerů

Autor: Ivana Dvořáková
Ročník: B2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Jana Vondroušová; Ing. Kamila Syslová, Ph.D.

Molekulárně otištěné polymery (MIPy = Molecularly Imprinted Polymers) představují rychlou, levnou a selektivní metodu v oblasti rozpoznávání chemických a biologických molekul (bílkoviny, léčiva, polutanty v životním prostředí) a mají v dnešní době hojně využití, například v kapalinové chromatografii, katalýze, biotransformaci, či jako sensory nebo diagnostické prostředky pro rozpoznání požití drog. Jedná se v podstatě o syntetické receptory, které jsou schopny selektivně separovat monitorovanou látku ze vzorku. Při syntéze MIPu dochází k polymerizaci vhodného funkčního monomeru s templátem (sledovanou molekulou) za účasti síťovacího činidla. Po eluci templátu (vhodným elučním činidlem) ze síťované struktury polymeru dochází ke vzniku kavit vhodných pro opětovné zachycení sledované molekuly.

Experimentální část práce se zabývá využitím MIPu jako stacionární fáze kolony pro extrakci na pevné fázi (SPE = Solid Phase Extraction) určené k separaci dopaminu z cerebrospinálního moku. Optimalizovány a validovány byly nejen reakční podmínky samotné syntézy MIPu, ale i eluce templátu z MIPu a postup extrakce na pevné fázi. Ke sledování účinnosti eluce templátu a separace dopaminu ze vzorků byla vyvinuta HPLC-MS metoda.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Vplyv lubrigácie na vznik porozity lisovaných binárných zmesí Meglumínu a Avicelu PH102

Autor: Petra Paličková
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: doc. Ing. Pavel Čapek, CSc.

Práca sa zaoberá problematikou vzniku porozity v dôsledku odlišných plasticko-elastických vlastností Megluminu a Avicelu PH102. Vplyvom týchto vlastností môžu pri lisovaní tabliet vznikať trhliny v ich povrchovej štruktúre, ktoré prispievajú k celkovej porozite.

Porozita bola dedukovaná zo skeletálnej hustoty, ktorá bola meraná pomocou héliového pyknometra, a zdanlivej hustoty určenej z geometrických rozmerov tabliet. Vznikajúci systém pórov bol tiež hodnotený pozorovaním priepustnosti tabliet pre dusík.

V práci bol otestovaný vplyv vnútornej a vonkajšej lubrigácie a to stearátom horečnatým a stearyl fumarátom na porozitu binárných zmesí o rôznom zložení.

Tablety sú najviac náchylné k tvorbe trhlín pri objemovom podiele Meglumínu 75 % a pri vonkajšej lubrigácii. Pri významnej vnútornej lubrigácii (3 hm. %) nebol pozorovaný neobvyklý nárast porozity. Vnútna lubrigácia pravdepodobne potláča rozdielnosť plasticko-elastických vlastností lisovanej zmesi.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Příprava pevných disperzí léčivých látek a polymerů a jejich vlastnosti

Autor: Bc. Michaela Slámová
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Jan Patera Ph.D.

Cílem práce je příprava pevných disperzí, které jsou jednou z možností jak zvýšit rozpustnost léčiva. Pevné disperze byly připraveny metodou tavení, byly studovány jejich vlastností a byly porovnávány s fyzikálními směsmi. Jako modelová účinná látka byl zvolen paracetamol. Polymery Kollidon® VA 64, Kollidon® 12 PF a Soluplus byly použity jako matrice. U vybraných pevných disperzí byla studována povrchová energie a specifické interakce vzorku s polárními sondami pomocí inverzní plynové chromatografie. Povrchová energie se lišila u tavenin a fyzikálních směsí, ale také u jednotlivých polymerů. Vyšší specifické interakce byly naměřeny s kyselou sondou. Dále byly připraveny tablety, u nichž byla sledována pevnost a rychlost uvolňování účinné látky metodou disoluce. Byly zjištěny významné rozdíly v chování tablet lisovaných ze směsi se Soluplusem ve srovnání s Kollidonem® VA 64, resp. 12 PF, ale také mezi oběma typy Kollidonů. To může mít za následek odlišné použití v průmyslové výrobě.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Studie vlastností tablet acykloviru

Autor: Bára Svobodová
Ročník: B3
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Jan Patera, Ph.D.

Práce byla zaměřena na studium vlastností tablet acykloviru, které byly laboratorně připravovány ze dvou různých šarží účinné látky. Při lisování byl zvolen proměnný parametr výsledných tablet – lisovací síla nebo rychlost, přičemž druhý parametr byl udržován konstantní. Hodnoceny byly také viskoelastické vlastnosti připravených tablet. Tablety odlišných kategorií a šarží pak byly porovnávány a testovány lékopisnými zkouškami oděru, rozpadu, rychlosti uvolňování léčivé látky a pevnosti. Z výsledků experimentů vyplynulo, že lisovatelnost tablet obou testovaných šarží je velmi dobrá, i přes poměrně široké rozmezí použitých parametrů při výrobě tablet. Experimentálně bylo dokázáno, že změnou lisovacích parametrů lze pozměnit vlastnosti tablet, ovšem rozdíly ve výsledných vlastnostech nejsou zásadní pro účinek či snadnost výroby tablet.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Příprava (nano)kompozitů polyamid 6/halloysit

Autor: Šárka Holoubková
Ročník: M2
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Jaroslav Minář

Polyamid 6 je materiál, který nachází široké průmyslové využití. Jeho nevýhodou je však omezená mechanická pevnost a především rozměrová stabilita. Tyto vlastnosti lze zlepšit přidáním různých plniv. Perspektivním plnivem je halloysit, vrstevnatý minerál ze skupiny aluminosilikátů. Jeho využití v polyamidových nanokompozitech je stále v počátcích. Cílem této práce je příprava (nano)kompozitů polyamidu 6 s halloysitem a jejich charakterizace.

Nanokompozity byly připraveny *in situ* hydrolytickou polymerací a míšením v tavenině. Obsah halloysitu byl v rozmezí 0-10 hm %. U výsledných materiálů byla studována termická stabilita a krystalizační chování polyamidové matrice. U vzorků připravených míšením v tavenině byly vyhodnoceny základní mechanické vlastnosti.

Pro zlepšení dispergovatelnosti halloysitu v tavenině ϵ -kaprolaktamu či polyamidu 6 byl halloysit dále modifikován močovinou. Produkt reakce byl charakterizován termogravimetrickou analýzou a rentgenovou difrakcí.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Příprava polyesterů terpolymerizací epoxidů s anhydridy

Autor: Barbora Charvátová
Ročník: M1
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Zdeněk Hošťálek, Ph.D.

Polyestery jsou jedním z materiálů široce využívaných v řadě medicínských aplikací, kde je často důležité připravit polymery s přesně definovanými vlastnostmi. Jednou z metod přípravy polyesterů, kterou lze snadno modifikovat termické a mechanické vlastnosti záměnou vstupního složení polymerizační násady, je kopolymerizace epoxidů s anhydridy.

Tato práce byla zaměřena na přípravu statistických a blokových kopolymerů (terpolymerizací epoxidů s anhydridy) iniciovanou organickou bází bis(trifenyfosfin)iminium chloridem (PPNCl). Reakcemi vhodně zvolených komonomerů v různých vzájemných poměrech byly připraveny polymery s různými termickými vlastnostmi. Sekvenční polymerizací se podařilo připravit i polymery blokové.

Molární hmotnost vzniklých polymerů byla stanovena pomocí rozměrově vylučovací chromatografie, procentuální zastoupení jednotlivých komonomerů ve výsledných terpolymerech bylo zjištěno ^1H -NMR spektroskopii a termické vlastnosti jednotlivých polyesterů byly stanoveny pomocí diferenční skenovací kalorimetrie.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Materiálová recyklace pneumatik

Autor: Hana Kohoutová
Ročník: M2
Ústav: Polymerů
Školitel: doc. Ing. Antonín Kuta, CSc.

Tato práce se věnuje materiálové recyklaci použitých pneumatik. Z nich získaná pryž ve formě drtě o velikosti částic 2 – 4 mm byla dále zpracována ve speciálním mlýnu firmy Lavaris. Tak byly získány částice do průměru 0,8 mm s velkým aktivním povrchem. Obě drtě samotné či smíchané v různých poměrech byly bez dalších přísad vylisovány do tvaru destiček o tloušťce kolem 5 mm, z nich vyseknuta zkušební tělíska a provedena tahová zkouška.

Práce sleduje vliv složení (poměru hrubé a jemné drtě) a podmínek lisování (teplota, doba) na pevnost a tažnost vzniklého materiálu. Na základě výsledků s přihlédnutím na ekonomickou stránku procesu je optimalizován poměr hrubé a jemné drtě a podmínky lisování. Pro vytvořený materiál se nabízí použití na různé podložky apod., např. ve stavebnictví.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Studium systému polymerní matrice - léčivo s využitím DSC analýzy a infračervené spektroskopie

Autor: Lucie Kopačková
Ročník: B3
Ústav: Polymerů
Školitel: Mgr. Soňa Hermanová, Ph.D.; doc. Ing. Michal Fulem, Ph.D. (ÚFCH)

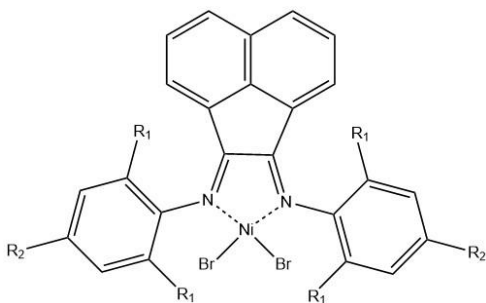
Polymerní částice umožňují rozmanitou úpravu fyzikálně-chemických vlastností nosičového systému pomocí modifikace struktury, délky řetězců a charakteru koncových skupin. Významnou skupinu představují polyestery, které jsou biokompatibilní, zabraňují předčasné degradaci léčiva a především umožňují kontrolovatelné uvolňování zabudované léčivé látky. Vhodným léčivem pro řízené uvolňování je ibuprofen, látka s nízkou rozpustností ve vodě (49 µg/mL, 25°C) a krátkým poločasem vyloučení z plazmy.

Dva vzorky poly(ϵ -kaprolaktonu) o molárních hmotnostech 5000 ($M_w=1,7$) a 29900 g·mol⁻¹ ($M_w=1,6$) byly metodou emulze dichlormethan/voda převedeny do formy částic o velikosti 200 - 300 nm a disperzitě 0,17 - 0,33. Do částic byl zabudován stejnou metodou ibuprofen a UV spektroskopií byl stanoven jeho obsah v částicích 39%. Polymerní matrice, částice, léčivo i nosičový systém byly analyzovány termickou analýzou a infračervenou spektroskopií.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Příprava poly(alkenových) standardů s úzkou distribucí molární hmotnosti a definovaným větvením

Autor: Oldřich Kotyza
Ročník: B3
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Jan Merna, Ph.D.



Cílem práce je příprava polyalkenů o definované molární hmotnosti a různém obsahu krátkých větví polymerací hex-1-enu a propenu pomocí diiminových komplexů niklu. Polymeraci 1-alkenů katalyzovanou těmito komplexy doprovází tzv. chainwalking (CW) izomerizace, která vedle klasických 1,2-zapojení umožňuje i 1, ω inserci, která vede k napřímení řetězce. Výsledné větvení, resp. rozsah CW lze ovlivnit volbou monomeru, reakční teploty či modifikací ligandového pole použitého katalyzátoru. Byly připraveny poly(hex-1-

eny) s molární hmotností 90-270 kg/mol a $\bar{D}$ =1.00-1.20 a počtem větví 94-166. Výsledné polymery byly charakterizovány pomocí SEC a $^1\text{H-NMR}$. Připravené vzorky modelových poly(alkenů) s úzkou distribucí budou využity jako standardy pro kalibraci SEC využívajícího IR detektor pro monitorování větvení poly(alkenů), např. LDPE.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Příprava polymerních částic na bázi poly(ϵ -kaprolaktonu) pro enkapsulaci vankomycinu

Autor: Tomáš Kroupa
Ročník: M1
Ústav: Polymerů
Školitel: Mgr. Soňa Hermanová, Ph.D.

Atraktivní lékovou formou pro glykopeptidická antibiotika se jeví nosiče na bázi biokompatibilních a resorbovatelných polymerů, které by umožňovaly kontrolované uvolňování léčivé látky do krevní cirkulace. V této práci byly připraveny vzorky poly(ϵ -kaprolaktonu) o molárních hmotnostech M_n = 6900 g $\cdot$ mol $^{-1}$ ($\bar{D}$ =1,3) a M_n = 18 000 g $\cdot$ mol $^{-1}$ ($\bar{D}$ =1,4). Polymery byly připraveny polymerací za otevření kruhu ϵ -kaprolaktonu, iniciovanou 1,3,5-triazabicyklo[4.4.0]dec-5-enem nebo roztokem HCl v diethyletheru. Metodou dvojí emulze voda/olej/voda byl do částic enkapsulován vankomycin. Obsah navázaného léčiva byl stanoven na základě kalibrační přímky, která byla získána UV-spektrofotometrickou analýzou řady roztoků vankomycinu o známé koncentraci.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Roztokové vlastnosti kyseliny hyaluronové

Autor: Anna Kutová
Ročník: M1
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Václava Benešová

Kyselina hyaluronová (HA) je přírodní lineární polysacharid, který se nachází v pojivové, epiteliální či nervové tkáni většiny živočichů. Díky novým technologiím její příprava je v současné době žádanou komponentou ve farmacii, medicíně a kosmetice. Tato látka je značně hydrofilní a je schopna na sebe vázat až tisíci násobek molekul vody. Roztoky HA ve vodě vykazují polyelektrolytický efekt.

V experimentální části byla zaměřena pozornost na studium vlastností roztoků HA ve vodě, způsobu eliminace polyelektrolytického efektu a stanovení molární hmotnosti viskozimetrickou metodou. Zajímavé poznatky byly zjištěny při samouspořádávání vrstev montmorillonitu zbobtnalého vodou v přítomnosti HA a vlivu elektrolytů na tento proces. U získaných folií byly vyhodnoceny mechanické a termické vlastnosti a korelovány se způsobem přípravy.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Vliv tepelných stabilizátorů na migraci změkčovadel ze směsí PVC

Autor: Edita Moravcová
Ročník: M1
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Radka Kalousková, CSc.; prof. Ing. Vratislav Ducháček, DrSc.

Široké využití polyvinylchloridu při výrobě zdravotnických pomůcek klade vysoké nároky na jeho zdravotní nezávadnost. V současné době je jeho použití v této oblasti zpochybňováno právě kvůli nejčastěji používanému změkčovadlu di(2-ethylhexyl)ftalátu. To se může uvolňovat z matrice PVC do lidského organismu a měnit se na zdraví nepříznivé metabolity. Právě proto je snaha nalézt jiné změkčovadlo poskytující stejné vlastnosti měkčeného PVC, které se zároveň bude méně vyluhovat. PVC fólie s šesti různými změkčovadly a dvěma stabilizačními systémy byly 96 hodin vyluhovány v simulantu hydrofilního a hydrofobního prostředí. U vzorků byla sledována změna hmotnosti, změna tepelné stability a teploty skelného přechodu během vyluhování.

Příprava alternujícího polyesteramidu

Autor: Alžběta Müllerová

Ročník: B2

Ústav: Polymerů

Školitel: Inq. Lenka Malinová, Ph.D.

Polyesteramidy obsahující ϵ -kaprolaktamové a ϵ -kaprolaktonové strukturální jednotky jsou zajímavé materiály, ve kterých se kombinují dobré mechanické vlastnosti a citlivost k biodegradaci. Kopolymerací ϵ -kaprolaktamu a ϵ -kaprolaktonu se běžně připravují polyesteramidy se statistickou strukturou.

Práce je zaměřena na přípravu alternujícího polyesteramidu. Tento materiál bude vykazovat zajímavé vlastnosti vzhledem k pravidelnému opakování strukturních jednotek podél řetězce v porovnání se statistickým kopolymerem při stejném zastoupení jednotek.

Výchozí látkou pro přípravu alternujícího kopolymeru je ϵ -kaprolaktam, který se převede sledem reakcí na hydrochlorid methylesteru ϵ -aminokapronové kyseliny. Kritickým místem syntézy je jeho reakce s ϵ -kaprolaktonem a následná polykondenzace reakčního produktu.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Příprava hypervětveného polyethylenu roubovaného poly(2-hydroxyethylmethakrylátem)

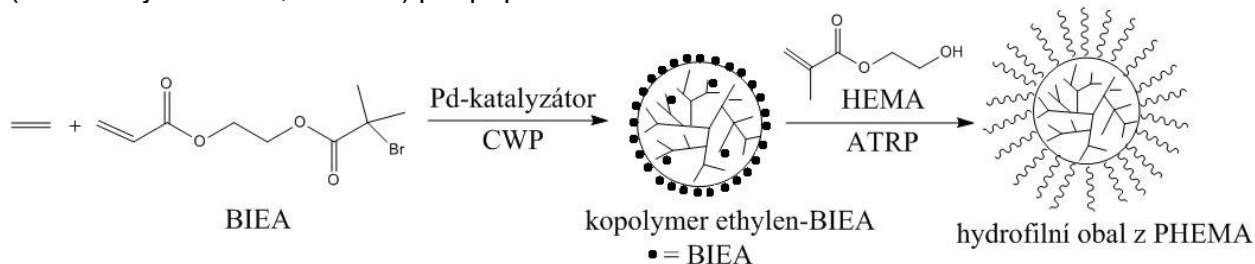
Autor: Kateřina Nunvářová

Ročník: M2

Ústav: Polymerů

Školitel: Inq. Jan Merna, Ph.D.

Kombinací metody „chain-walking“ polymerace (CWP) následované radikálovou polymerací s přenosem atomu (ATRP), lze připravit dendritické nanočástice, které se v poslední době prezentují jako slibná forma transportu vysoce nepolárních léčiv, například cytostatik. Naše práce se zaměřuje na přípravu nanočástic s hydrofobním jádrem, tvořeným hypervětvěným polyethylenem (PE), v kombinaci s poly(2-hydroxyethylmethakrylátem) (PHEMA) jako hydrofilním pláštěm. Přestože je PHEMA díky své biokompatibilitě, netoxicitě a hydrofilní v medicíně uplatňován již desítky let, kombinace hypervětvěného PE s pláštěm tvořeným PHEMA zatím nebyla publikována. Byly optimalizovány podmínky pro ATRP HEMA a následně využit hypervětvěný kopolymer ethylenu s bromovaným akrylátem (BIEA) jako makroiniciátor (obsah Br jednotek 1,2 mol. %) pro přípravu PHEMA roubů.



Sekce : Chemie a technologie polymerů

Příprava amfifilních kopolymerních nosičů pro nukleové kyseliny

Autor: Lucie Reinišová

Ročník: M2

Ústav: Polymerů

Školitel: Mgr. Soňa Hermanová, Ph.D.; Ing. Michael Pinkas (Centrum aplikované bioimplantologie FNKV)

Současným trendem v oblasti kanceroterapie je směřování k personalizované léčbě jednotlivých pacientů. Jednou z možností této „terapie na míru“ je využití pacientovy vlastní izolované RNA. Pro účinný transport do buňky je RNA enkapsulována do polymerních nosičů například na bázi amfifilních kopolymerů s polyesterovými a polykarbonátovými bloky. Tyto kopolymery jsou díky své schopnosti samouspořádávání se ve vodném prostředí studovanými nosiči řady biologicky aktivních látek.

V této práci byla připravena řada vzorků kopolymeru poly(trimethylenkarbonát)-*b*-poly(ethylenoxid) s molární hmotností M_n 4000-7000 g·mol⁻¹ a disperzitou Đ 1,08-1,23. Kopolymery byly převedeny do formy částic metodou emulze o/v, kde olejovou fází představovaly tetrahydrofuran či dichlormethan; vodnou fází deionizovaná voda a roztok ethanolu a vody v objemovou poměru 1:1. Byla také studována schopnost samouspořádávání se vzorků přímo ve vodné fázi. Leukocytární DNA, která byla zvolena jako výchozí látka pro enkapsulaci z důvodu nižších nároků na experimentální podmínky, byla izolována z buněčné suspenze za použití QIAamp DNA Mini Kit (Qiagen).

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Využití epoxidových pryskyřic v medicíně

Autor: Roman Šnajdar

Ročník: B4

Ústav: Polymerů

Školitel: Ing. Radka Kalousková, CSc.

Epoxidové pryskyřice se řadí mezi reaktoplastické materiály, tj. materiály, které své užité vlastnosti získají až po vytvrzení. Využití nachází v mnoha odvětvích od stavebního a chemického průmyslu až po zdravotnictví. Co se týče lékařství, díky izolačním vlastnostem a hydrofobnímu charakteru se epoxidové pryskyřice používají jako zalévací látky při výrobě kardiostimulátorů. V posledních letech jsou však hydrofilní epoxidové pryskyřice studovány i aplikovány ve funkci síťovadel biologických materiálů.

V první fázi práce byla zvládnuta a optimalizována příprava vytvrzených epoxidových fólií. V další fázi je předmětem studia modifikace složení reakční směsi a provedení testů životaschopnosti buněk.

Cílem práce je nalezení reakčního složení, které zlepší vlastnosti základních fólií, ať už se jedná o tažnost, modul pružnosti, hydrofilitu.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Vývoj proléčiva na bázi poly(ε-kaprolakton-co-γ-butyrolakton)u

Autor: Tomáš Urbánek

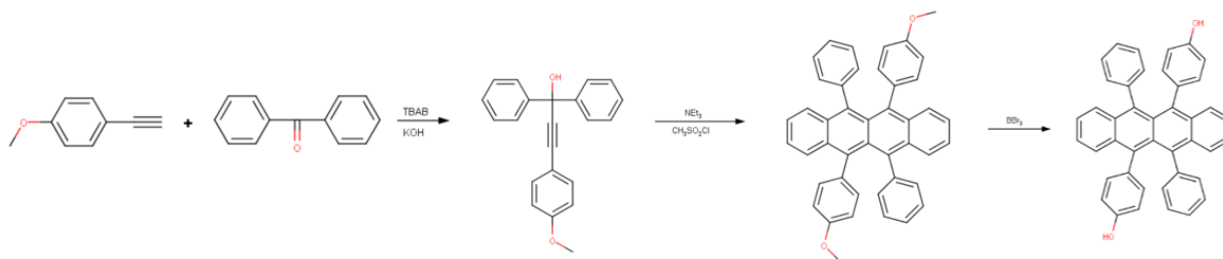
Ročník: M2

Ústav: Polymerů

Školitel: Mgr. Martin Hrubý, Ph.D.; Mgr. Soňa Hermanová, Ph.D.

Alifatické polyesteru a jejich kopolymery představují širokou skupinu polymerů v současnosti studovaných v kontextu biomateriálů a systémů pro cílenou dopravu léčiv. Příspěvek shrnuje studii, jejíž cílem je příprava a charakterizace biokompatibilních a resorbovatelných polymerních nanočástic založených na poly(ε-kaprolakton-co-γ-butyrolakton)u a jejich fyzikálně-chemická charakterizace pomocí rozptylových metod. Samotná polymerní matrice podléhá enzymaticky katalyzovaným degradačním procesům, při nichž se uvolňuje terapeuticky aktivní γ-hydroxybutyrát, agonista kyseliny γ-aminomáselné (GABA). Lze proto předpokládat, že degradace nanočástic, figurujících jako proléčivo, povede k potlačení zánětlivých projevů v místě aplikace.

Práce se též zabývá syntézou fluorescenčního iniciátoru, dihydroxyderivátu rubrenu, pro výše zmíněnou kopolymeraci laktonů za otevření kruhu, který v částicích umožní sledovat jejich degradaci *in vitro* a *in vivo*. Schéma syntézy je znázorněno na přiloženém obrázku.



Sekce : Materiálové inženýrství I – Materiály pro elektroniku a nanomateriály

Vliv opticky nelineárních prostředí na plazmonový coupling

Autor: Dina Alkhimova

Ročník: B3

Ústav: Inženýrství pevných látek

Školitel: Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.

Plazmonová resonance je jev, který souvisí s excitací kvazičástic (plazmonů) při interakci světla s malými kovovými nanostrukturami. Tento jev může probíhat i na samostatné (jedné) nanočástici, ovšem mnohem účinnější je v případě několika nanočástic umístěných v těsné blízkosti. V posledním případě dochází k plazmon-couplingu, který vede k podstatnému zesílení plazmonové resonance. Toto je předmětem intenzivního studia během posledních let.

Veškeré současné vědecké práce se zabývají studiem plazmon-couplingu za podmínky "neutrálního" optického prostředí. Nejčastěji se uvažuje vzduch a/nebo přítomnost analytu. Tato práce je zaměřena na studium plazmon-couplingu v nelineárním optickém prostředí. Ukazuje se, že zmíněný jev je důrazně ovlivněn optickou nelinearitou, což otevírá cestu pro celou řadu nových plazmonových aplikací a podstatně pokrok v již známých oblastech plazmoniky.

Sekce : Materiálové inženýrství I – Materiály pro elektroniku a nanomateriály

Nanostrukturování PES polymeru KrF laserem

Autor: Dominik Fajstavr
Ročník: M2
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: doc. Ing. Petr Slepíčka, Ph.D.

Cílem práce je charakterizovat a připravit nanostruktury expozicí polymerního materiálu PES (polyethersulfon) a studovat jeho povrchovou morfologii. Substrát byl modifikován pomocí KrF excimerového laseru o vlnové délce 248 nm. Podmínky pro vytvoření pravidelné struktury na povrchu materiálu byly dány energií modifikujícího laserového svazku a počtem pulsů. Dále byl zkoumán vliv použitého polarizátoru na působení procházejícího laserového svazku. Materiál PES byl zvolen jako substrát k modifikaci pro své vhodné vlastnosti, kterými jsou: chemická, teplotní a mechanická odolnost a vysoký absorpční koeficient v oblasti vlnové délky použitého excimerového laseru. Povrchová morfologie byla zkoumána metodou AFM mikroskopie atomárních sil, dále byla zkoumána povrchová drsnost a smáčivost vzorků. Vývoj těchto nových metod povrchové modifikace může nalézt své uplatnění v oboru elektroniky, senzorů či tkáňového inženýrství.

Sekce : Materiálové inženýrství I – Materiály pro elektroniku a nanomateriály

Příprava grafenu metodou CVD

Autor: Hejna Ondřej
Ročník: M2
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: doc. Ing. Petr Macháček, CSc.

Práce se zabývá přípravou alotropické modifikace uhlíku – grafenu – metodou depozice z plynné fáze (CVD) na dielektrický substrát s využitím katalyticky aktivního kovu. Od roku 2004, kdy byl grafen poprvé izolován na SiO₂ substrátu, se dostal do popředí výzkumných týmů díky svému potenciálnímu využití v elektronice, optice či materiálovém inženýrství. Tepelné, elektrické a mechanické vypočtené vlastnosti tohoto polovodivého materiálu bez zakázaného pásu několikanásobně převyšují dosud známé materiály. CVD je pro přípravu grafenu studována především na Cu substrátu díky malé rozpustnosti uhlíku v mědi a kvalitně připraveným vrstvám, avšak nevýhodou je nutnost oddělení vodivého substrátu od grafenu pro jeho další studium. V mé práci se zabývám tzv. „bezpřenosovou“ CVD metodou, která toto negativum odstraňuje a umožní růst grafenových vrstev přímo na dielektriku. Tato technika je založena na rozpustnosti uhlíku v katalyticky aktivních kovech a následně jeho segregaci pod svrchní vrstvou kovu. Po odleptání katalytické vrstvy je možné připravenou grafenovou vrstvu na substrátu dále experimentálně charakterizovat pomocí mikroskopie a spektroskopie. Primární užívanou metodou v této práci pro měření struktury, tloušťky a poruchovosti grafenu je Ramanova spektroskopie.

Sekce : Materiálové inženýrství I – Materiály pro elektroniku a nanomateriály

Periodické povrchové struktury pro fotoniku

Autor: Prokop Horník
Ročník: M1
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.

V této práci jsou zkoumány periodické povrchové nanostruktury, které mají pozitivní plasmonovou aktivitu v UV oblasti. Jejich použití je ve fotonice a ve zkoumání biologických složek. Metoda SERS (Surface Enhanced Raman Spectroscopy) je schopná detekovat velmi malé množství látky, díky zesílené odezvě Ramanovy spektroskopie na analyt. Periodické nanostruktury se připravují laserem s dostatečnou energií. Vybuzení plasmonu je zajištěno strukturou přechodu mezi polymerní vrstvou a deponovaným kovem, následně toto vybuzení je způsobeno zářením o určité vlnové délce a současně zvyšuje odezvu metody SERS. Pro vybuzení plasmonu ve vhodné části spektra je používána kombinace dvou kovů, první je deponováno Ag a následně Pt. Snahou je dosažení aktivity v nízkých vlnových délkách v úrovni UV záření a plasmonový pík položený v hodnotách okolo 220 nm. Toto je důležité především pro biologické objekty, které absorbují v UV oblasti elektromagnetického záření. Posunutí této aktivity je způsobeno Pt, která má plasmonový pík v nižších vlnových délkách než Au či Ag, plasmonový pík Au leží zhruba ve středu viditelného spektra.

Sekce : Materiálové inženýrství I – Materiály pro elektroniku a nanomateriály

Au nanovrstvy v senzorické analýze

Autor: Vojtěch Kopáček
Ročník: M2
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Ondřej Kvítek, Ph.D.

Předložená práce je zaměřena na přípravu zlatých nanovrstev na skleněném substrátu využitelných v senzorické analýze. Depozice zlata byla prováděna metodou naprašování a morfologie povrchu byla modifikována žíháním při 300 °C. Byla sledována optická odezva vlivu organických rozpouštědel (toluen, ethanol, aceton a voda) na index lomu vzorků. Dále byla zkoumána selektivita pro jednotlivá rozpouštědla a schopnost regenerace senzoru. Výzkum potvrdil schopnost detekce par zmíněných rozpouštědel i schopnost regenerace senzoru. Nejlepších výsledků bylo dosaženo u vzorků s nejtenčí vrstvou zlata (doba depozice 10–20 s), jež měly upravenou morfologii povrchu žíháním. Tloušťka vrstvy zlata byla určen gravimetricky. Vzorky byly také zkoumány UV-VIS spektrometrií a byly pořízeny jejich snímky mikroskopem atomárních sil (AFM).

Sekce : Materiálové inženýrství I – Materiály pro elektroniku a nanomateriály

Príprava polyesterových (nano)častíc

Autor: Marek Kucko
Ročník: M2
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Mgr. Soňa Hermanová, Ph.D.

Cieľom tejto práce je príprava rôznych amfifilných blokových kopolymérov typu A-B s rôznym charakterom koncových skupín a ďalej príprava škály častíc so štruktúrou jadro-plášť až po micely. Polymerizáciou ϵ -kaprolaktónu iniciovanú 1,3,5-triazabicyklo[4.4.0]dec-5-enom a poly(etylénoxidom), PEO, s M_n 2000 g·mol⁻¹ a $\bar{D}$ 1,07 boli pripravené blokové kopolyméry PCL-*b*-PEO o M_n 8700 g·mol⁻¹ ($\bar{D}$ 1,1) a M_n 13500 g·mol⁻¹ ($\bar{D}$ 1,3). Kopolyméry boli charakterizované ¹H NMR spektroskopiou a rozmerovou vylučovacou chromatografiou (SEC). Častice boli pripravené metódou jednoduchej emulzie a odparením organického rozpúšťadla, kde olejovú fázu predstavoval dichlórmetán a tetrahydrofurán. Veľkosť častíc, distribúcia veľkosti častíc a zeta potenciál boli merané na prístroji Zetasizer Nano ZS.

Sekce : Materiálové inženýrství I – Materiály pro elektroniku a nanomateriály

Fluorgrafen a jeho chemické modifikace pomocí Grignardových činidel

Autor: Alena Libánková
Ročník: M1
Ústav: Anorganická chemie
Školitel: doc. Ing. Zdeněk Sofer, Ph.D.

Fluorografen patří mezi několik málo derivátů grafenu, které je možno syntetizovat v stechiometrickém poměru C₁X₁, v tomto případě C₁F₁. Na rozdíl od čistého grafenu je možné změnou obsahu fluoru měnit energii zakázaného pásu a další jeho vlastnosti. Syntéza fluorografenu s různým obsahem fluoru byla prováděna reakcí termicky redukováného grafenu s fluorem za zvýšeného tlaku a teploty. Postup fluorace byl následně použit pro syntézu výchozího „perfluorovaného“ grafenu o stechiometrii C₁F_{1.1} pro studium jeho reaktivity s Grignardovými činidly. Byl detailně studován vliv struktury Grignardova činidla na stupeň modifikace výsledného fluorografenu. Modifikace s Grignardovými činidly, která obsahovala trojnou vazbu, byla dále použita pro reakci zvanou „Click chemistry“. Ta je založena na reakci trojné vazby mezi uhlíky s organickým azidem za vzniku triazolového kruhu. Pro analýzu syntetizovaných materiálů byla použita elementární spalovací analýza, FT-IR a Ramanova spektroskopie, fotoelektronová spektroskopie. Morfologie byla studována pomocí SEM, STEM a AFM mikroskopie.

Sekce : Materiálové inženýrství I – Materiály pro elektroniku a nanomateriály

Příprava a charakterizace tenkých vrstev uhlíku

Autor: Bc. Jan Pajtai
Ročník: M2
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: doc. Ing. Petr Macháč, CSc.

Grafen - jeden z nedávno objevených alotropů uhlíku. Svět vědy uchvacuje svými unikátními elektrickými, optickými i mechanickými vlastnostmi. Cílem této práce je připravit tenké vrstvy grafenu na SiO₂/Si substrátu za pomoci napařených vrstev mědi, kobaltu a niklu. Dále porovnat vzorky s kobaltem a niklem, nalézt vhodné podmínky vakuového žíhání (čas a teplota) a leptání kovových vrstev (čas a použité leptadlo). Připravené vrstvy byly podrobeny analýze na Ramanově spektroskopu, díky níž bude interpretována tloušťka, forma a poruchovost připravených vrstev.

Sekce : Materiálové inženýrství I – Materiály pro elektroniku a nanomateriály

Dopované vrstvy PLLA

Autor: Adam Pinkner
Ročník: M2
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: doc. Ing. Petr Slepíčka, Ph.D.

Tento projekt se zabývá přípravou, modifikací a analýzou vrstev kyseliny polymléčné (až do tloušťky 50 mikrometrů), která díky svým vlastnostem patří mezi velmi perspektivní polymery. Vrstvy byly připravovány odpařením z roztoku chloroformu a modifikovány buď přidáním polyethylen glykolu, do něhož byly předtím naprášeny nanočástice zlata, nebo smícháním s grafenovým práškem.

Postupnou optimalizací tohoto jednoduchého procesu bylo dosaženo mechanicky stabilních vrstev, jejichž vlastnosti byly dále předmětem zkoumání například pomocí mikroskopie atomárních sil (AFM) pro studium morfologie). Po optimalizaci mechanických vlastností vrstev budou testovány v oblasti konstrukce senzorů.

Sekce : Materiálové inženýrství I – Materiály pro elektroniku a nanomateriály

Příprava a vlastnosti koloidních roztoků Pt

Autor: Matěj Příbyl
Ročník: M2
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: doc. Ing. Petr Slepíčka, Ph.D.

Práce se zabývá přípravou a vlastnostmi koloidních platinových nanočástic připravených přímým katodovým naprašováním do polyethylenglykolu a následným zředěním vodou. Zkoumány jsou vlastnosti jako např. absorpční vlastnosti těchto roztoků v oblasti UV-VIS, tvar, velikost a uskupení nanočástic pomocí (TEM, HRTEM), pH. Dalším předmětem této práce je roubování těchto nanočástic na tenkou folii PLLA v připravených koloidních roztocích platinových nanočástic za pokojové a zvýšené teploty.

Sekce : Materiálové inženýrství I – Materiály pro elektroniku a nanomateriály

Modified graphene-based gas sensors

Autor: Andrii Trelin
Ročník: B2
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.

In current research potential of CVD-grown graphene for gas-sensing applications was investigated. Relatively poor results was obtained in comparison with mechanically exfoliated graphene in accordance with previously done researches. On the other hand, it was found that surface modification of graphene sheet with p-phenylamine groups using appropriate aryl diazonium salt dramatically increases sensing response of device to electron-donating gases, such as ammonia and amines, as well as shortens detection and relaxation time. Taking into account good repeatability of modification process, usage of well-studied CVD-grown graphene with good sensing properties, devices developed in current research may be used in large-scale production for a big variety of different basic-gases sensing applications, including industrial ones.

Replikace Au na kompozitní nanostrukturu PLLA-C

Autor: Bc. Andrea Cepková
Ročník: M2
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: doc. Ing. Petr Slepíčka, Ph.D.

Práce se zabývá studiem morfologie kompozitu PLLA-C, na kterém je ukotvena zlatá vrstva. Depozice uhlíkové a zlaté vrstvy byla tvořena na PLLA (popř. sklíčku) za různých podmínek, konkrétně šlo o nanášení různé tloušťky uhlíkové a zlaté vrstvy. Tloušťka uhlíkové vrstvy na PLLA závisí na vzdálenosti uhlíkového vlákna od anody a tloušťka zlaté vrstvy ovlivňuje dobu expozice. Tepelným namáháním se zlato nanesené na sklíčko ukotvilo na kompozitu PLLA-C. Dále byl sledován vliv parametrů depozice uhlíkové resp. zlaté vrstvy na smáčivost vzorku. Smáčivost povrchu byla studována goniometricky pomocí měření kontaktního úhlu. Morfologie povrchu byla studována metodou AFM na vzorku PLLA s nanesenou zlatou vrstvou a na kompozitu PLLA-C, na kterém jsou ukotvené Au nanostruktury. Tato studie má aplikační potenciál v oblasti nanosenzorů, zesílené Ramanovské spektroskopie (zejména se zlatem) či antimikrobiální účinky (se stříbrem).

Vliv viskozity methylcelulózy a teploty prostředí na rychlost uvolňování barviv z methylcelulóзовých filmů

Autor: Bc. Tereza Jačková
Ročník: M2
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Kateřina Kolářová, Ph.D.

Cílem práce byla příprava methylcelulóзовých roztoků s navázanými barvivy. Z připravených roztoků jsme dále vysušením získali methylcelulóзовé filmy, u nichž jsme zjišťovali, jak je barvivo ve filmu vázáno, vliv viskozity methylcelulózy a teploty prostředí na rychlost uvolňování použitých barviv z methylcelulóзовých filmů. Snažili jsme se simulovat podmínky uvolňování léčiv z obvazových materiálů do lidského těla. Ke studiu jsme použili dva typy methylcelulózy o různé viskozitě (400 cP a 4000 cP) a dva typy žlutých barviv (riboflavin a textilní barvivo direct yellow). Uvolňování barviv bylo zkoumáno v závislosti na čase při dvou různých teplotách (7 °C a 37 °C). Dokázali jsme, že riboflavin je v methylcelulóзовých filmech nasorbovaný, zatímco direct yellow se pevně chemicky váže. Vliv viskozity materiálu se ukázal jako zanedbatelný. Na počátku vliv teploty prostředí demonstroval rychlejší uvolňování barviva při vyšší teplotě. Nicméně při nižší teplotě dochází v čase k úplnému rozpuštění filmů, a tím tedy k nárůstu koncentrace uvolněného barviva. V našem prostředí nemůžeme pracovat s léčivými látkami (antibiotiky), a tímto studiem jsme za použití barviv nasimulovali uvolňování léčiv z filmů do těla, přičemž riboflavin se ukázal jako vhodnější pro tuto simulaci.

Sekce : Materiálové inženýrství II – Materiály pro bioaplikace a farmacie

Oxidovaná celulóza – simulácia uvoľňovania liekov z krytov rán

Autor: Michaela Opltová
Ročník: B1
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Kateřina Kolářová Ph.D.; Ing. Vladimíra Vosmanská

Celulózové materiály alebo ich deriváty ponúkajú pre hojenie rán radu cenných vlastností. Táto práca je zameraná na výskum uvoľňovania modelových liekov z materiálov na báze celulózy za účelom pochopenia mechanizmu naviazania zlúčenín a ich uvoľňovania v prostredí simulujúcom ľudské telo – nehojacu sa ranu.

Vo svojej práci som využila modelové zlúčeniny, ktorými boli farbivá Direct Yellow a Golden Yellow (vitamín B2 - riboflavín) a materiály na báze celulózy (oxidovanú celulózu a celulózu) slúžiace ako kryty rán. Skúmala som vplyv koncentrácie modelových zlúčenín, času naviazania a plazmatickej modifikácie na uvoľňovanie modelových liekov z celulózových krytov rán. Uvoľňovanie bolo sledované UV spektroskopiou v destilovanej vode, PBS a fyziologickom roztoku za laboratórnej teploty. Absorbancia roztokov bola prepočítaná na koncentráciu.

V závere práce bolo zistené, že vplyvom dlhšieho času naviazania, vyššej koncentrácie modelových zlúčenín je uvoľňovanie rýchlejšie. Zistilo sa, že úprava povrchu materiálu argónovou plazmou pred naviazaním modelových zlúčenín taktiež napomohla k rýchlejšiemu uvoľňovaniu.

Sekce : Materiálové inženýrství II – Materiály pro bioaplikace a farmacie

Povrchová funkcionalizace antimikrobiálních nanočástic stříbra vázané na molekuly citlivé na světlo

Autor: Martin Radocha
Ročník: M2
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Mgr. Oleksy Lyutakov, Ph.D.

Nanočástice stříbra i molekuly porfyrinu jsou známé antimikrobiální materiály. Vykazují antimikrobiální účinky díky různým mechanismům – generací reaktivního kyslíku a rozrušení mikrobiální membrány. Tato práce se zabývá přípravou nanočástic stříbra, na které jsou kovalentně navázány molekuly porfyrinu s cílem kombinace antimikrobiálních účinků obou látek. Hlavním úkolem práce je navrhnout a připravit světlem-říditelný antimikrobiální materiál. Dalším cílem je porovnat antimikrobiální vlastnosti takto modifikovaných nanočástic a komponent, z kterých se skládají, tzn. samotných nanočástic a samotného porfyrinu. Dále se sleduje antimikrobiální účinnost jednotlivých antimikrobiálních agens za ozařování spektrem viditelného světla, protože antimikrobiální vlastnosti porfyrinu se nejvíce projevují při tomto ozaření, kdy vytváří výše zmíněný reagentní kyslík, který vykazuje silné antimikrobiální vlastnosti.

Přenos kovových nanostruktur z pevného substrátu pomocí polysacharidových fólií

Autor: Bc. Daniel Samec
Ročník: M1
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Kateřina Kolářová, Ph.D.

Stříbrné nanočástice nacházejí široké využití pro jejich optické, katalytické a antibakteriální účinky. Tento výzkum je zaměřen na přenos stříbrných nanostruktur z pevného substrátu na polysacharidové filmy a následně do roztoku. Porovnával jsem schopnost transferu nanostruktur pomocí methylcelulózy a chitosanu. Pomocí dewettingu, což je jednoduchá, levná metoda pro tvorbu stabilní nanostruktur na bázi tenké kovové vrstvy, jsem vytvořil tzv. nanostrůvky stříbra na pevných substrátech (křemík, hliník, polyimid, mikroskopické krycí sklíčko). Po nanesení polysacharidových roztoků na tyto materiály, následném sušení a odtržení od pevného substrátu se mi podařil přenos stříbrných nanostruktur na polysacharidový tenký film. Rozpuštěním těchto filmů ve vhodném rozpouštědle (destilovaná voda, acátový pufr) jsem získal roztoky o stejném složení s obsahem stříbrných nanočástic. Nejlepší výsledky vykazovaly nanostruktury přenesené z mikroskopického krycího sklíčka a křemíku. Filmy a roztoky obsahující stříbrné nanočástice mohou být přínosem pro své antibakteriální vlastnosti.

Charakterizace AuNP připravených přímou depozicí do polyethylenglykolu

Autor: Nikola Slavíková
Ročník: M2
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Alena Řezníčková, Ph.D.

Tato práce se zabývá přípravou a charakterizací zlatých nanočástic (AuNPs), připravených katodovým naprašováním do polyethylenglykolu (PEG), polyethylenglykol-thiolu (PEG-SH) a polyethylenglykol-dithiolu (PEG-S₂H₂). Velikost, distribuce a tvar připravených nanočástic byla stanovena pomocí transmisní elektronové mikroskopie (TEM) a dynamického rozptylu světla (DLS). Dále byla studována teplotní a časová stabilita připravených nanočástic pomocí UV-Vis spektroskopie. Koncentrace zlata v připravených koloidních roztocích byla stanovena atomovou absorpční spektrometrií (AAS). Z TEM analýzy byl zjištěn kulovitý tvar AuNPs a velikost, která se pohybovala v rozmezí od 2,9 do 5,9 nm, a to v závislosti na druhu použitého zachytávacího média. Na základě metody DLS bylo potvrzeno, že přímou depozicí do PEG, PEG-SH a PEG-S₂H₂ nedochází k tvorbě shluků a nanočástice jsou v roztoku homogenně rozptýlené. Z AAS bylo zjištěno, že koncentrace zlata v koloidním roztoku se zvyšuje lineárně s časem depozice. Z UV-Vis spektroskopie dále vyplývá, že pro nanočástice, jejichž velikost je menší než 3 nm, dochází ke ztrátě píku povrchové plasmonové rezonance (SPR). Roztok AuNPs připravený přímou depozicí do PEG-SH byl stabilnější, jak z teplotního tak z časového hlediska, ve srovnání s roztokem AuNPs stabilizovaném PEG-S₂H₂.

Sekce : Materiálové inženýrství II – Materiály pro bioaplikace a farmacii

Příprava kovových nanočástic platiny a paládia metodou přímého katodového naprašování do glycerolu a studium jejich vlastností.

Autor: Jan Smolka
Ročník: M2
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: doc. Ing. Jakub Siegel, Ph.D; Ing. Marek Staszek

V posledních letech proběhl velký rozmach ve využívání nanočástic díky jejich unikátním vlastnostem v širokém spektru oborů jako elektronika, lékařství, farmacie nebo optika. Práce se zabývá přípravou kovových nanočástic platiny a paládia metodou přímého katodového naprašování do glycerolu za kontrolované teploty. Glycerol je použit z důvodu nízké tenze jeho par, což je důležité při samotném naprašování, schopnosti stabilizace nanočástic v roztoku a také jeho snadné biologické odbouratelnosti. Přípravené vzorky byly poté naředěny vodou na iontovou chromatografii v poměru 1:3. Následně byla provedena analýza spektroskopii v ultrafialovém a viditelném spektru (UV-VIS), dynamického rozptylu světla (DLS), atomové absorpční spektroskopie (AAS) a transmisní elektronové mikroskopie (TEM) a tím byly určeny jejich základní parametry jako koncentrace, velikost a její distribuce.

Důležitým aspektem je také vliv teploty na naprašování a pozorování tvorby nanočástic v roztoku nebo vzniku tenké vrstvy na jeho povrchu. U připravených nanočástic budou také zkoumány jejich cytotoxické vlastnosti a schopnost inhibice růstu různých buněčných kultur metodou WST-1.

Sekce : Materiálové inženýrství II – Materiály pro bioaplikace a farmacii

Příprava a a navazování kovových nanočástic na polymerní substrát

Autor: Helena Špinková
Ročník: M2
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Nikola Slepíková Kasálková, Ph.D.

Práce se zabývá studiem změn fyzikálních vlastností polymerního materiálu – polylaktidu. Jeho povrch byl upraven naprašováním uhlíku ze tří různých vzdáleností. Takto připravené vzorky byly dále ponořeny do roztoků nanočástic třech různých kovů – zlata, platiny, stříbra.

K hodnocení fyzikálně-chemických vlastností povrchů vzorků byla použita metoda goniometrického měření kontaktního úhlu na přisedlé kapce, mikroskopie atomárních sil a rentgenová fotoelektronová spektroskopie.

Sekce : Materiálové inženýrství II – Materiály pro bioaplikace a farmacii

Studium vlivu podmínek modifikace na povrchové vlastnosti polymeru

Autor: Kristýna Váchová
Ročník: M2
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Nikola Slepíčková Kasálková, Ph.D.

Tato práce je zaměřená na studium vlivu podmínek modifikace na změnu fyzikálně-chemických vlastností polymeru. Studovaným polymerem byl vysokohustotní polyethylen (HDPE), který byl modifikován argonovým plasmatem a na takto aktivovaný polymer byl poté roubován polyethylenglykol (PEG). Roubování probíhalo při různých časech (2 - 24 hod) a v roztocích PEGu o různých koncentracích (2 - 25 %).

K následnému sledování vlivu podmínek roubování na změny vlastností HDPE bylo použito několik analytických metod – gravimetrie, XPS a AFM.

Sekce : Materiálové inženýrství II – Materiály pro bioaplikace a farmacii

Syntéza kationických nanočástic pro transfekci RNA

Autor: Jan Vávra
Ročník: M2
Ústav: UOCHB AV ČR
Školitel: Mgr. Petr Cígler, Ph.D.

Messenger RNA (mRNA) nachází využití jako nová třída genetických terapeutik s potenciálem nahradit terapeutika založená na plasmidové DNA. mRNA pro svoji funkci nevyžaduje internalizaci do buněčného jádra a nehrozí integrace do genomu hostitelské buňky. Několik preparátů na bázi mRNA se již dostalo do klinických testů. Samotná mRNA však není schopna účinně překonat buněčnou membránu a pro úspěšné využití vyžaduje delivery systém. Některé typy kationických nanočástic se ukazují jako slibné transfekční vektory. Unikátní vlastnosti FND by mohly poskytnout nové informace o procesu transfekce při testování in vitro. Stabilní fluorescence s emisí mimo autofluorescenční oblast buněk umožňuje dlouhodobé sledování interakce nanočástic s buňkami. Citlivost fluorescenčního centra vůči nabitým funkčním skupinám v nejbližším okolí nanočástice by dále mohla sloužit k odhadu účinnosti internalizace hybridních nanočástic. Tato práce se tedy zabývá přípravou nových typů hybridních kationických nanočástic na bázi fluorescence nanodiamantů (FND), silikagelu a lipidů s potenciálním využitím jako RNA delivery systémy. V rámci této práce byl vyvinut první syntetický postup přípravy inherentně kationických FNDs. Dále byla úspěšně aplikována mikrofluidní technika přípravy liposomů definované velikosti a tyto liposomy byli použity pro syntézu hybridních nanočástic obsahující FND uzavřený v lipidické dvojvrstvě.

Sekce : Materiálové inženýrství II – Materiály pro bioaplikace a farmacii

Simulace uvolňování léčiv z chitosanových filmů na modelu vybraných barviv

Autor: Mariia Vereshchaka
Ročník: M1
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Kateřina Kolářová, Ph.D.

Pomocí UV-VIS spektrometrie bylo zjišťováno množství uvolněného barviva z připravených chitosanových filmů. Cílem bylo zjistit, jak ovlivňuje koncentrace chitosanu v připravených filmech rychlost a množství uvolněného barviva do roztoků simulujících pH lidského těla. Filmy byly připraveny z roztoků o různých koncentracích chitosanu se stejným přídatkem zkoumaného barviva. Připravené filmy byly rozpouštěny ve vodných prostředích o různých pH, přičemž bylo zjišťováno množství uvolněného barviva. Bylo zjištěno, že původní koncentrace chitosanu má vliv jak na rychlost, tak i na množství uvolněného při rozpouštění v kyselém a neutrálním prostředí. Tyto výsledky mohou být přínosné pro drug delivery systémy a cílené uvolňování léčiv.

Sekce : Chemická informatika a bioinformatika

Simulation of DNA conformational dynamics

Autor: Bc. Hana Dohnalová
Ročník: M2
Ústav: Laboratory of Informatics and Chemistry
Školitel: Ing. Filip Lankaš, Ph.D.

Sequence-dependent conformation of DNA affects its interaction with proteins, packing in viruses and chromatin organization. In our work we study the interplay between conformational substates of DNA backbone and spatial arrangement of bases and basepairs. As a source of data we use atomic-resolution molecular dynamics simulations with explicit inclusion of water and ions.

Correlation analysis of backbone states identifies tetrameric sequences as natural units of conformational dynamics. We investigate all sixty-four possible backbone states of a tetramer and found that only several of them are substantially populated. Each of these substates uniquely defines the basepair configuration of the tetramer's central step.

We are planning to investigate all 136 unique DNA tetrameric sequences and thus obtain a comprehensive picture of DNA conformational dynamics.

Sekce : Chemická informatika a bioinformatika

Using tree edit distance to model structural similarity of RNA molecules

Autor: Tomáš Hromada

Ročník: M1

Ústav: Department of Software Engineering, Faculty of Mathematics and Physics, Charles University in Prague

Školitel: RNDr. David Hoksza, Ph.D.

This thesis analyses opportunities for using a tree edit distance for obtaining a similarity measure of a tertiary structure of RNA molecules. The core of such methods is the fact that it is possible to represent a secondary RNA structure as a mathematical tree, and also that these trees, similarly to sequences, can be compared using tree edit distance algorithms. The goal of this thesis is to explore the possible mechanisms for using the tree edit distance information for superposition of RNA structures, which is used for calculating 3D structural similarity

Sekce : Chemická informatika a bioinformatika

Domain organization of proteins by means of molecular modeling and simulation methods

Autor: Lucie Pfeiferová

Ročník: M1

Ústav: Institut of Organic Chemistry and Biochemistry AS CR, Bioinformatics

Školitel: RNDr. Jiří Vondrášek, CSc

Domains, as the small globular protein units with preserved functions, plays significant role in terms of function and stability of proteins. Is important to understand their possible pairing and combinations. There are information about organization of domains but mostly focused on one particular protein, or on organization within secondary or tertiary structure. In order to understand the basics of domain organization we have focused on domain pairs arranged in a row within a sequence, their behavior within molecular modeling, simulation methods and on studying their biological functions. We have selected the most common protein domain pairs occurring mostly in one combination (group I) and in both combinations (group II). In order to understand differences in the stability, we have performed coarse-grain explicit solvent molecular dynamics simulations in the isobaric-isothermal ensemble. We used IEM methodology to describe effect and influence of domain organization in both groups, as standard analyses tools for molecular dynamic as RMSD, RMSF and Rg curves.

Sekce : Chemická informatika a bioinformatika

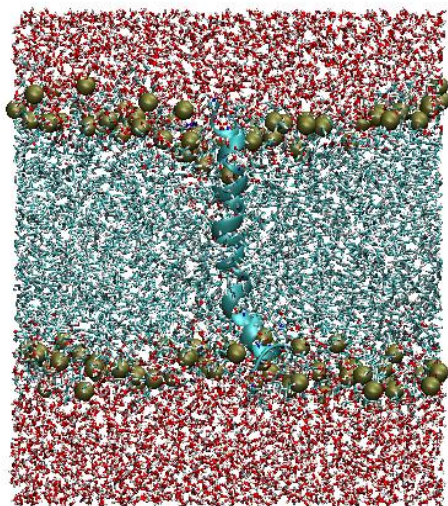
The Study of Pore-Forming Activity of Colicin U and Its Structure in Phospholipid Membranes

Autor: Kamila Riedlová

Ročník: M1

Ústav: Department of Genetics and Microbiology, Faculty of Science, Charles University in Prague; J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry, AS CR

Školitel: RNDr. Radovan Fišer, Ph.D.; Lukasz Cwiklik, Ph.D., DSc.



Colicin U is a protein produced by the bacterium *Shigella boydii* and it is characterized by a pore-forming activity. It consists of three parts: N-terminal, central and C-terminal domain. C-terminal domain is responsible for formation of pore in the membrane of bacteria related to the producer strain. This leads to membrane depolarization and subsequent cell death. The membrane-inserted C-terminal domain of the protein probably consists of ten alpha-helices according to sequence similarity with colicin B. In this study the behavior C-terminal domain in the membrane and mechanism of pore formation is deduced from MD simulations of individual helices in the POPC membrane. The simulation of interactions between selected helices in the membrane is also included in this analysis. Subsequent chemical synthesis and purification of these

ten peptides would allow empirical confirmation of simulated data. These measurements will include single-molecule conductivity recording on planar lipid membranes and fluorescence spectroscopy of labeled peptides. This study will be complemented with the study of full-length colicin U isolated directly from bacteria using similar biophysical methods.

Sekce : Chemická informatika a bioinformatika

Dark protein space: from theory to high-throughput experiment

Autor: Vjačeslav Tret'jačenko

Ročník: M2

Ústav: Organické chemie a biochemie AV ČR

Školitel: Mgr. Klára Hlouchová, Ph.D.

Nature emerged with fascinating set of different protein molecules, yet only the small part of potential sequence space is used. For 100 amino acid protein, 20^{100} sequences can be constructed from canonical amino acid alphabet. On the other hand the number of all different amino acid sequences in Nature is estimated to 10^{30} , with repeating motifs in sequence and structure. This work aims to investigate folding potential and secondary structure formation frequency in random protein sequences. Project bases on bioinformatic analyses of protein libraries with different amino acid alphabets and distributions and proceeds with design and preparation of semi-random protein libraries for experimental confirmation of bioinformatics analyses.

Sekce : Chemická informatika a bioinformatika

Application of cytogenetic methods to animals

Autor: Ksenia Troshchenkova

Ročník: M1

Ústav: Department of genetics at Universidade Estadual Paulista Julio de Mesquita Filho, Botucatu, Brasil

Školitel:

The following presentation is dedicated to the activities, which were performed during the internship on the Department of genetics at Universidade Estadual Paulista Julio de Mesquita Filho, Botucatu, Brasil. The internship included taking samples of blood and tissue from animals, observing their morphology and routine laboratory activities in order to define the karyotype of the animals in such cases, as deviant phenotype or defining the classification of animals. The mentioned activities could be applied in agricultural sector.

During the internship were proceeded following procedures: C-banding, G-banding, NoR-banding, electrophoresis, etc. As a result of the internship is to be named detected and specified excess chromosome in goat samples, which led to the further search of the reason. As well was studied the difference in phenotype of two species and a hybrid of turtles.

Sekce : Restaurování a konzervování skla a keramiky

Restaurování vitráže s květinovým motivem z depozitu Pražského arcibiskupství

Autor: Nagla Al Samsamová

Ročník: B2

Ústav: Skla a keramiky

Školitel: Dr. Ing. Dana Rohanová; Petr Coufal lic. restaurátor

Vitráž s květinovým motivem, složená z 32 bezbarvých, barevných a přejímaných skel, tvoří celek o rozměrech 52 x 82 cm. Její vznik je odhadován na první polovinu dvacátého století. Vitráž s motivem květin byla ve špatném stavu, chyběli dva kusy skla, část skel byla rozbitá a olověný profil se rozpadal. Restaurátorským záměrem bylo očištění skel, kompletní výměna olověné profilované konstrukce, doplnění chybějících částí vitráže kopiemi a restaurování sklomalby. V rámci rekonstrukce byly provedeny průzkumy poškození předmětu (optická mikroskopie). Chemické analýzy (RTF a SEM/EDS) potvrdily, že se jedná o sodno-vápenatá skla, vyráběné od konce 19. století. Na povrchu skel bylo patrné mechanické poškození, ale nebyla zjištěna přítomnost korozních produktů. Jednotlivá skla byla očištěna, chybějící části doplněny kopiemi, rozbité části spojené adhezivem Araldite 2020 nebo Pb tenkým profilem a opravená skla byla založena do nového olověného profilu. Práce obsahuje i doporučené podmínky ochrany pro interiérovou instalaci.

Sekce : Restaurování a konzervování skla a keramiky

Restaurování torza nádoby lužické kultury

Autor: Barbora Hübnerová
Ročník: B2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Alexandra Kloužková, CSc., Ljuba Svobodová

Předmětem restaurování byla pravěká nádoba lužické kultury ze záchranného archeologického výzkumu na obchvatu Chrudimi z roku 2013. Nádoba byla nalezena na nalezišti Vestec II, jedná se o amforu (tzv. osudí). Archeologický nález byl předán ve formě „in situ“. Ve výplni nádoby byla nalezena část kosti, pravděpodobně předloketní. Osudí bylo odpreparováno od vnitřní výplně a byla provedena rekonstrukce a doplnění chybějících částí, přičemž byly pro analýzu střeptové hmoty odebrány vzorky střepů, které nebylo možné zakomponovat do celku nádoby. Veškerá práce a zákroky byly provedeny v souladu s etikou restaurování za použití reverzibilních materiálů.

Sekce : Restaurování a konzervování skla a keramiky

Rekonzervace renesančního džbánu a torz barokních lahví na likér *Rosoglio* z Bratislavy

Autor: Petra Kádřová DiS.
Ročník: B4
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Dr. Ing. Dana Rohanová



Pro účely výstavy „*Sklenené poklady z odpadných jám*“ (prosinec 2016 v Bratislavě) byly provedeny rekonstrukce renesančního džbánu a torz barokních lahví na likér *Rosoglio*. Nádoby byly dodané ve fragmentárním stavu nebo částečně slepené zažloutlým lepidlem. Restaurátorským záměrem schváleným zadavatelem (Městský úrad ochrany pamiatok Bratislava) bylo odstranění dřívějších restaurátorských zásahů, očištění nádob, rekonstrukce tvaru a zajištění stability nádob pro účely výstavy. Použité adhezivum bylo před odstraněním analyzováno metodou IČ spektroskopie. Adhezivum bylo identifikováno jako lepidlo chloroprenového typu

s obsahem mastku a bylo dobře rozpustné v acetonu. Nádoby byly dále očištěny destilovanou vodou a poté acetonem. Při restaurátorském průzkumu byly provedeny i chemické analýzy metodou XRF nebo SEM/EDS. K fixaci tvaru poměrně velkých nádob bylo po odsouhlasení zadavatelem použito epoxidové adhezivum Araldite 2020. U některých nádob byla z důvodu lepší stability vytvořena křížová konstrukce z PMMA nebo výztuž ze skelného vlákna. V průběhu restaurování byla prováděna fotodokumentace a na závěr byl navržen ochranný režim pro expozici předmětů.

Sekce : Restaurování a konzervování skla a keramiky

Kopie malované vitráže sv. Anežky České (část ruky) z Korozluk u Mostu

Autor: Nikol Mikšovská
Ročník: B2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Dr. Ing. Dana Rohanová; restaurátor Jiří Černohorský

Vitráž je funkční umělecko-řemeslné dílo, tvorba kopie je tedy jednou ze základních dovedností restaurováteře. Předmětem práce bylo osvojit si tyto dovednosti na výrobě kopie části okenní výplně s motivem ruky svaté Anežky České. Vitrážová skla (bez olověného profilu) byla nalezena majitelem, panem Peroutem. Dvojdílné vodorovně dělené okno o rozměrech cca 1,2 x 1,7 m je v horní části zaklenuté. Vitráž byla vyrobena klasickou technikou, kde byla skla zakládána do olověného oboustranně cínovaného profilu. Malovaný motiv je vyveden na čtyřech typech skel – červeném (vápenato-křemičité sklo s přejímanou vrstvou barvenou koloidním Au), zeleném (sodno-vápenaté sklo barvené Cr a Fe), žlutém (sodno-vápenaté barveno Fe) a čirém (sodno-vápenaté). Nápis „Gewidm. v ***** Pilz AD 1933“ ve spodní části je sice z větší části zničený, ale je pravděpodobné, že vitráž byla darována občanem Pilzem, Anno Domini 1933.

Sekce : Restaurování a konzervování skla a keramiky

Restaurování různých typů materiálů

Autor: Kateřina Pulcová
Ročník: B2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Alexandra Kloužková, CSc.; Ljuba Svobodová, restaurátorka s licencií MK

V této práci bylo provedeno restaurování různých typů keramických materiálů z odlišných historických období. Jsou to jak archeologické nálezy, tak předměty novodobé ze siderolitu a porcelánu. Cílem práce bylo na základě zhodnocení střepových hmot předmětů zvolit postup čištění a vhodná pojiva. Nejstarší je keramická nádoba vyjmuta „in situ“ ze žárového pohřebiště lužické kultury ve Vestci II, okres Chrudim. Po preparaci střepů bylo provedeno čištění tohoto nestabilního materiálu a lepení disperzním pojivem. Byly odebrány vzorky a provedeny příslušné analýzy (XRF, XRD) vedoucí ke stanovení chemického a mineralogického složení střepové hmoty. Antropolog určil typ kostí, které se nacházely uvnitř nádoby. U plastiky ležícího pastýře s ovci ze siderolitu bylo provedeno čištění a odstranění v minulosti použitých adheziv, poté bylo provedeno lepení rozpouštědlovým pojivem. Ostatní předměty byly ze slinutého materiálu – porcelánu a po očištění byly lepeny epoxidovým pojivem. U slánky s plastikou včely značky Goebel byly doplněny ztráty epoxidovým systémem a provedena barevná retuš. Na závěr práce byly navrženy podmínky uložení restaurovaných předmětů.

Sekce : Restaurování a konzervování skla a keramiky

Restaurování torza zásobnice ze žárového hrobu lužické kultury

Autor: Veronika Pulcová

Ročník: B2

Ústav: Skla a keramiky

Školitel: Ing. Alexandra Kloužková, CSc.; Ljuba Svobodová, restaurátorka s licencií MK

Cílem této práce bylo restaurování pravěké keramiky z lužické kultury. Tato nádoba byla nalezena při záchranném archeologickém výzkumu v oblasti Vestec II. na obchvatu u města Chrudim. Jedná se o torzo zásobnice, která byla převzata ve formě „in situ“. Součástí výplně byly fragmenty antropologického materiálu. Konzultace s antropologem vedla ke zjištění, že jsou lidského i zvířecího původu. Po preparaci střepů následovalo jejich mokré čištění, pak vyhledávání a následné lepení reversibilními lepidly. Neumístěné střepy byly použity na analýzy. Ztráty byly doplněny sádkou, která zpevnila předmět a byla retušována za mokra i za sucha. Na závěr byly navrženy podmínky uložení restaurovaného torza.

Sekce : Restaurování a konzervování skla a keramiky

Restaurování koflíku únětické kultury

Autor: Ondřej Vejsada

Ročník: B2

Ústav: Skla a keramiky

Školitel: Ing. Alexandra Kloužková, CSc.; Ljuba Svobodová

Restaurovaný únětický koflík pochází z archeologického naleziště v Chrudimi – Vestec II. (nález z r. 2013) a byl převzat ve formě „in situ“. Střepy byly vypreparovány a část nezařaditelných byla použita k restaurátorskému průzkumu (XRF – chemické složení, XRD – mineralogické složení, hodnocení parametrů – nasákavosti, objemové hmotnosti a skladovací vlhkosti). Dále bylo postupováno podle restaurátorského záměru: mytí, sušení, vyhledávání, lepení a doplnění ztrát. Celý průběh byl dokumentován pomocí fotoaparátu. Zbylé nezařaditelné střepy byly uloženy do sáčků společně s hlínou z nádoby pro další analýzy. Při celém zásahu byla dodržena etika restaurování, byly použity reverzibilní materiály a navrženy podmínky uložení.

Sekce : Technologie restaurování

Vlastnosti fasádních nátěrů a jejich kompatibilita s pružnými tmely

Autor: Bc. Richard Bureš
Ročník: M2
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Vítězslav Knotek, Ph.D.

Pružné polymerní tmely jsou široce používanými materiály pro výplně dilatačních spár a opravy prasklin ve zdivu či na fasádách. Použití tmelů proniká i do oblasti restaurování památek, kde je zvláště důležitá otázka finální retuše. Ta může být řešena použitím vhodného nátěru. Informace o vzájemné kompatibilitě a interakci exteriérových tmelů a fasádních nátěrových hmot jsou nedostatečné. Proto byly nejběžnější kombinace otestovány experimentálně.

Práce se zabývá změnami vlastností fasádních barev nanesených na stavebních tmelech po umělém stárnutí. Byly použity tři typy fasádních barev silikonová, silikátová a akrylátová. Mezi typy stavebních tmelů byly vybrány silikonový, silikon akrylový, polyuretanový a hybridní MS tmel. Připravené vzorky byly stárnuty v prostředí se zvýšenou teplotou, mrazovými cykly, v prostředí se zvýšenou vlhkostí, v QUV panelu a za laboratorních podmínek. Po stárnutí byla měřena změna barevnosti, změna lesku, adheze k podkladu a změna chemického složení. Dále byla měřena rychlost zasychání a propustnost pro vodní páry volných filmů fasádních barev.

Sekce : Technologie restaurování

Modelové tavby gotického sklářského kmene pro repliku historické pece

Autor: Bc. Kateřina Dvořáčková
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Dr. Ing. Dana Rohanová

Sklo se v českých zemích začalo systematicky vyrábět až na přelomu 13./14. století. Z archeologických nálezů v odpadních jámkách měšťanských domů se dá dobře vysledovat jak tvarosloví, tak chemické složení používaného nádobí ze skla. Cílem práce bylo zjistit teplotu nutnou pro dokonalé protavení gotického (13./14. – 1.pol.16. století) sklářského kmene. Podíly surovin (písek : alkalické složky) ve sklářských kmenech byly vypočteny na základě prací Dr. Rohanové. Kmeny byly taveny v laboratorní peci nastavené na teploty od 800 °C do 1300 °C s krokem 100 °C. Stupeň protavení byl sledován jednak pomocí optické mikroskopie a také metodou SEM/EDS. Chemické složení finálních skel bylo zjištěno pomocí XRF a vznik krystalických fází po jednotlivých teplotách byl studován pomocí XRD. Předpokládané vypočtené složení skel laboratorní tavby potvrdily. Dále se ukázalo, že gotické sklo je dobře protavené při teplotě kolem 1200 °C. Získané informace byly s úspěchem využity při tavení skla v replice středověké pece realizované Muzeem Vysočiny Havlíčkův Brod.

Sekce : Technologie restaurování

Charakterizace dlaždic z rotundy sv. Václava v Praze

Autor: Bc. Pavla Dvořáková
Ročník: B3
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Alexandra Kloužková, CSc.; Ing. Mária Kavanová

Při archeologickém výzkumu na Malostranském náměstí v budově Karlovy univerzity byly odkryty základy románské rotundy sv. Václava spolu s dochovanou terakotovou figurální podlahovou dlažbou nalezenou in situ. Cílem práce byl průzkum románské dlažby vyšehradského typu z rotundy sv. Václava. Nejprve byla provedena charakterizace střepových hmot, glazur a korozních vrstev z hlediska chemického a mineralogického složení. Dále byla práce věnována studiu systému střepová hmota – glazura a hodnocení souladu koeficientů délkových teplotních roztažností glazur a střepových hmot dlaždic. Pomocí optické mikroskopie byla provedena defektoskopie glazur a zdokumentovány příslušné korozní vrstvy.

Sekce : Technologie restaurování

Vliv kyselin a zásad na vlastnosti dřeva

Autor: Bc. Pavel Holec
Ročník: M1
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Irena Kučerová, Ph.D.; Ing. Václava Antušková

Dřevo se chrání proti biologickému napadení nebo proti ohni různými ochrannými přípravky. V důsledku jejich aplikace však může docházet k degradaci dřeva, projevující se třeba změnou jeho barvy nebo pevnosti. Příkladem takových ochranných přípravků mohou být protipožární nátěry na bázi amonných solí, užívané na ochranu historických krovových konstrukcí, které prokazatelně způsobují rozvlákňování dřeva. Mechanismus reakcí vedoucích k rozvlákňování dřeva není doposud přesně popsán. Protože některé chemikálie obsažené v ochranných přípravcích mohou měnit hodnotu pH dřeva při své aplikaci nebo během svého stárnutí, může zkoumání vlivu vodných roztoků kyselin a zásad na vlastnosti dřeva pomoci k identifikaci těchto degradačních procesů.

Sekce : Technologie restaurování

Identifikace příčin poškození astronomických desek tzv. zlatou nemocí

Autor: Bc. Petra Korandová
Ročník: M2
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Miroslava Novotná, CSc.

Skleněné želatinové negativy byly používány od počátku 19. do 80. let 20. století. Z této doby se dochovalo velké množství astronomických desek, které mají nejen významnou vědeckou hodnotu, ale také hodnotu historickou. V současné době bylo v mnoha archivech zaznamenáno poškození těchto skleněných negativů. Jedním z nich je tzv. „zlatá nemoc“, kdy se na povrchu želatiny za nevhodných atmosférických podmínek vyredukuje kovové stříbro a vytvoří se tzv. stříbrné zrcátko. V přítomnosti sirných polutantů se pak na jeho povrchu vytvoří tenká vrstva sulfidu stříbrného, a to má za následek zlatý vzhled. Tomuto jevu se říká „zlatá nemoc“ a může se vyskytovat buď na povrchu želatinové vrstvy, nebo uvnitř této vrstvy, kde nevratně poškozuje obrazovou část.

Cílem práce bylo zdokumentovat stav skleněných želatinových negativů z německé observatoře v Bamberku, na kterých se zlatá nemoc nachází. Pomocí nedestruktivních analytických metod jako je optická mikroskopie a Ramanova spektroskopie byl potvrzen výskyt sulfidu stříbrného a jeho přibližné množství v okolí skvrny. Dále byly vyhodnoceny charakteristické pásy molekul papíru, kterým byly skleněné negativy prokládány, pomocí infračervené spektroskopie.

Sekce : Technologie restaurování

Studium stárnutí proteinových pojiv

Autor: Bc. Alena Mochalina
Ročník: M1
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.; Ing. Klára Drábková

Adheziva na bázi proteinů se často používají v restaurátorské praxi. Proteinová adheziva se využívají pro lepení mnoha druhů materiálů. Výsledky práce poskytují porovnání vlastností často používaných adheziv před stárnutím a po umělém stárnutí. Umělé stárnutí probíhalo dvěma způsoby - vlhkým teplem a denním světlem. Testován byl kostní, kožní a rybí kůž, vyzina a želatina. Změny vlastností adheziv po umělém stárnutí byly vyhodnoceny na základě změn mechanických vlastností (tvrdost, pružnost), barevné difference, změny hodnot pH a strukturní změny kolagenu.

Sekce : Technologie restaurování

Vliv β -naftolu na barevnost pergamenu

Autor: Bc. et Bc. Marie Sokolová
Ročník: M2
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: doc. Dr. Ing. Michal Ďurovič

V 50. letech minulého století prošla značná část listin Archivu České koruny nevhodnou konzervací β -naftolem za účelem jejich desinfekce. Pergamenové a papírové listiny zčervenaly a zhoršily se jejich vlastnosti. Po 20 letech od tohoto zásahu byl proveden výzkum na Přírodovědecké fakultě Univerzity Karlovy v Praze, jehož hlavním závěrem bylo doporučení β -naftol a jeho oxidační produkty vymýt v metanolové lázni. Vlastnosti listin se již dále nehoršily, barva ale zůstala totožná jako před rekonzervačním zásahem.

Práce se zabývá zkoumáním změn barevnosti vzorků pergamenu a papíru, u kterých byl záměrně proveden stejný postup jako v případě nevhodné konzervace listin Archivu České koruny, po expozici světlem. Po impregnaci vzorků β -naftolem a jeho vymytí v methanolové lázni byly vzorky umístěny do světelné komory, kde byly vytvořeny podmínky expozice ve výstavních prostorách. Měřením parametrů barvového prostoru CIELab vzorků během celého experimentu bylo zjišťováno, zda by potenciální vystavení listin mohlo negativně ovlivnit jejich barvu.

Sekce : Restaurování a konzervování textilu

Restaurování svatebního živůtku Libuše Bráfové

Autor: Aneta Dušková
Ročník: B4
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.; Ing. Klára Drábková; Bc. Veronika Šulcová

Restaurovaný svatební živůtek patřil Libuši Bráfové za svobodna Riegrové. V rámci textilně-technologického průzkumu byly zkoumány vazby a vlákna. Tylové aplikace a mašle byly z živůtku demontovány. Každá část byla čištěna jiným způsobem. Mašle byla po demontáži vyprána v lázni s detergentem. Svrchní tkanina a podšívka živůtku byla čištěna suchou cestou. Postupně vysavačem, poté použití houby Wallmaster (které bylo nejúčinnější) a stírání vlhčenými vatovými tamponky. Na IČ byla potvrzena přítomnost škrobu na tylových aplikacích. Na vzorku materiálu podobného charakteru byly testovány různé způsoby čištění. Nakonec bylo zvoleno čištění Perlozou. Po čištění celého živůtku byla podložena tylová aplikace hedvábnou krepelínou, avšak pouze v oblasti výstřihu a rukávků. Nakonec byl živůtek instalován na pannu vytvořenou na míru a podle analogií bylo obnoveno šněrování. Uložení živůtku bylo dle přání zadavatele na polstrované ramínko s obalem.

Sekce : Restaurování a konzervování textilu

Konzervování textilního šátku

Autor: Ing. Lenka Fikerová
Ročník: B3
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.; Bc. Jana Bureš Víchová, DiS.



Semestrální práce týkající se konzervování textilního šátku ze souboru předmětů vyzdvížených z krypty kostela sv. Mikuláše a sv. Alžběty v Chebu. Soubor předmětů patří Karlovarskému kraji a jejich datace se vztahuje k období 1699 – 1782. V rámci semestrální práce byl proveden historicko-umělecký průzkum textilního šátku pomocí dostupných historických faktů a textilně-technologický průzkum pomocí zmapování znečištění a stupně degradace šátku včetně provedení identifikace materiálů a použitých výrobních technik. Na základě těchto poznatků byl zvolen

technologický sled čistících a regeneračních operací a následně byl proveden.

Na základě jednání s majitelem byla na závěr semestrální práce provedena požadovaná adjustace konzervovaného předmětu.

Sekce : Restaurování a konzervování textilu

Konzervování škapulíře z kostela sv. Mikuláše v Chebu

Autor: Mgr. Kateřina Kouřilová
Ročník: B3
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.; Bc. Jana Bureš Víchová, DiS.

Konzervování škapulíře z archeologicko-antropologického výzkumu kostela sv. Mikuláše a sv. Alžběty v Chebu, který proběhl v roce 2014, bylo provedeno v rámci předmětu Semestrální práce II. v Restaurátorských dílnách Pražského hradu a Laboratořích VŠCHT Praha.

Škapulíř byl po vyzvednutí z krypty uložen do PE sáčku a spolu s ostatními předměty uložen ve sklepě depozitáře. Po roce došlo k biologickému napadení a následné sanaci předmětů a jejich uložení při -20 °C.

Prvním krokem práce bylo mechanické očištění škapulíře. Následovalo jemné čištění kovových částí 50% roztokem etanolu, kdy byly částečně odstraněny korozní produkty. Součástí konzervování bylo provedení textilně-technologického průzkumu, fotografické dokumentace a vypracování restaurátorské zprávy. Škapulíř byl následně uložen do krabice z nekyselého kartonu spolu s RTG snímkem a fotografií zadní strany škapulíře. Na závěr byly doporučeny vhodné podmínky pro uložení a expozici.

Sekce : Restaurování a konzervování textilu

Restaurování blůzy Jarmily Pellé

Autor: Nela Kýrová

Ročník: B3

Ústav: Chemické technologie restaurování památek

Školitel: Barbora Korbelová, restaurátorka s licenci MK ČR; Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.

V rámci předmětu Odborná praxe I byla ve Středočeském muzeu v Roztokách restaurována krajková blůza Jarmily Pellé. Blůza je datována do období 30. let 20. století a je ušita ze strojové tylové krajky, která se skládá z hedvábných a bavlněných vláken.

Restaurování blůzy spočívalo v podrobné fotodokumentaci a textilně-technologickém průzkumu. Blůza byla čištěna mokrou cestou a následně, včetně velice poničeného spodního okraje, skeletována na hedvábný tyl nití z hedvábné krepelíny. Na závěr byla blůza uložena ve speciální krabici z nekyselého kartonu v depozitáři muzea a zároveň byly doporučeny podmínky pro vhodné uložení a expozici.

Sekce : Restaurování a konzervování textilu

Restaurování úřednického fraku

Autor: Bc. Dominika Nagyová

Ročník: M1

Ústav: Chemické technologie restaurování památek

Školitel: Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.; Barbora Štěpničková (restaurátorka s licenci MK ČR)

Předmětem této práce bylo restaurování úřednického fraku. Zadavatelem restaurování bylo Národní muzeum. Na základě umělecko-historického průzkumu bylo možné restaurovaný frak datovat na přelom 19. a 20. století. Z důvodu volby vhodných čisticích prostředků, doplňujících materiálů apod., byl proveden textilně-technologický a materiálový průzkum. Práce pokračovala čištěním předmětu a samotným restaurováním. Největší znečištění představovali prachové polutanty. Nejrozsáhlejším poškozením hedvábné podšívky byly perforace, které byly restaurovány šitou skeletáží. Perforace byly tímto postupem zpevněny, čímž se minimalizovalo riziko dalšího rozšíření. Perforace v suknu byly různého charakteru, proto bylo použito různých způsobů podložení. Podobně jako u podšívky došlo ke zpevnění perforací a minimalizaci rizika rozšiřování poškození. Všechny aplikované zásahy jsou reversibilní. V závěru byl předmět adjustován a byly doporučeny podmínky uložení a expozice.

Sekce : Restaurování a konzervování textilu

Restaurování dámských hedvábných bot

Autor: Mgr. Daniela Sulíková
Ročník: B4
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Bc. Veronika Šulcová, DiS., restaurátorka s licencií MK; Ing. Klára Drábková

Restaurovaným předmětem byl pár dámských bot, datovaných do dvacátých let 20. století, z majetku NPÚ. Po nezbytném kulturně-historickém a textilně-technologickém průzkumu, jež objasnil materiálovou a vazebnou skladbu, bylo možné přistoupit k samotnému restaurátorskému zásahu.

Povrch obuvi byl silně znečištěn prachovými částicemi a rovněž červenými skvrnami neznámého původu. Kromě toho se, především v patní části, nacházelo množství perforací, způsobených špatnou výztuží během uložení.

Prachové nečistoty byly z povrchu stírány tampóny vlhčenými destilovanou vodou, červené skvrny se podařilo odstranit acetonem. Vázací stuha, jež mohla být demontována, byla čištěna mokrou cestou, tupováním pěnou Syntapon L. Následně byly perforace podloženy hedvábnou látkou a přiskeletovány nití taženou z hedvábné krepelíny. Dále byly čištěny usně izopropylalkoholem, vyrobena kopie chybějící spony (zajišťoval sám zadavatel), konzervována původní spona a odstraněny staré inventární štítky.

Pro obuv byla vyrobena výztuž z inertních materiálů vhodná jak pro vystavení, tak i pro uložení. Takto adjustovaný předmět byl uložen v krabici z inertních materiálů.

Sekce : Restaurování a konzervování textilu

Restaurování dámského čepce

Autor: Veronika Tománková
Ročník: B4
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Bc. Veronika Šulcová, DiS.; restaurátorka s licencií MK, Ing. Klára Drábková

Čepec je ze sbírky Národního muzea a je datován do 1. pol. 19. století.

Vrchní hedvábná tkanina je vzorována technikou brošování. Čepec je zdobený dracounovou paličkovanou krajkou a bílou bavlněnou krajkou vyztuženou kovovou konstrukcí.

Bílá krajka byla demontována, čištěna mokrou cestou a opravy byly provedeny tylovým stehem. Kovová konstrukce byla restaurována samostatně v Národním muzeu. Čištění čepce bylo provedeno ponořením do perchlorethylenu v uzavřené skleněné nádobě. Dracounová krajka byla čištěna pomocí vatových tyčinek a ethanolu. Tkaničky byly čištěny lokálně v Petriho misce ve vodní lázni s detergentem Syntapon L.

Perforace na podšívce a flotující nitě na vrchní tkanině byly podloženy a skeletovány. Bílá krajka byla opět našita na kovovou konstrukci a přišita k čepci.

Adjustace byla provedena na formu vyřezanou z polyethylenové pěny potažené vatelínem a bavlněným úpletem a uložena do krabice.

Sekce : Restaurování a konzervování textilu

Restaurování dívčích šatů

Autor: Anna Triščová
Ročník: B3
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Bc. Veronika Šulcová, DiS.; Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.

Předmětem restaurátorského zásahu jsou dívčí krajkové šaty ze začátku 20. století. V rámci restaurátorských prací byl proveden umělecko-historický průzkum zaměřený na netradiční zpracování šatů, textilně technologický průzkum, který se zabýval identifikací vláken a textilních vazeb, a následně samotný restaurátorský zásah.

Nejprve byl předmět čištěn. Kvůli možnému zapouštění barev na určitých částech oděvu byly šaty čišťeny mokrou cestou pouze lokálně a problematické části byly čišťeny suchou cestou, a to převážně pomocí houby Wallmaster.

Následně byly na šatech provedeny šité opravy. Byly začištěny nezajištěné okraje na textiliích a ozdobných aplikacích, došlo k zajištění uvolněných částí oděvu a doplnění krajky v místech, kde se nacházely trhliny.

V závěru byly šaty naaranžovány na figurínu a pomocí parního napařovače oděvů vyrovnány.

Šaty byly adjustovány na vycpané ramínko, uloženy do obalu z polyethylenové netkané textilie a byly určeny vhodné podmínky pro uložení a expozici.

Restaurátorské práce probíhaly v restaurátorské dílně na Vyšší odborné škole textilních řemesel a Střední umělecké škole textilních řemesel v Praze.