

Seznam sekcí a složení komisí

Sekce: **Anorganická chemie**
posluchárna A211, 9:00 hod

Komise:

Předseda:

Členové:

prof. Dr. Ing. David Sedmidubský
Ing. Irena Hoskovcová, CSc.
Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.
Ing. David Petrádes, Ph.D. (Crytur)
Ing. Aleš Strejc, Ph.D. (Moser)
Ing. Peter Barath, Ph.D. (Metrohm)
Mgr. Tomáš Baše, Ph.D. (ÚACH AV ČR)
Ing. Stanislava Stará, Ph.D. (Preciosa)

Sekce: **Anorganická technologie I**
posluchárna A 25, 9:00 hod

Komise:

Předseda:

Členové:

doc. Ing. Martin Paidar, Ph.D.
doc. Ing. Jan Vídenský, CSc.
Dr. Ing. Vlastimil Fíla
Ing. Jaromír Hnát, Ph.D.
Ing. Martin Zlámal, Ph.D. (organizační tajemník)

Sekce: **Anorganická technologie II**
posluchárna A 32, 9:00 hod

Komise:

Předseda:

Členové:

doc. Ing. Bohumil Bernauer, CSc.
Ing. Šárka Paušová, Ph.D.
Ing. Roman Kodým, Ph.D.
Ing. Tomáš Bystroň, Ph.D.
Ing. Miloslav Lhotka, Ph.D. (organizační tajemník)

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

Komise:

Předseda:

Členové:

doc. Ing. Jaroslav Bystrianský, CSc.
doc. Ing. Pavel Novák, Ph.D.
Ing. Petr Dvořák, Ph.D.

Sekce: **Kovové materiály II**
posluchárna A50, 10:00 hod

Komise:

Předseda:

Členové:

prof. Ing. Pavel Lejček, Dr.Sc.
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. Martin Míka, Dr.
Ing. František Novotný, CSc
Ing. Eva Gregorová, CSc. (organizační tajemník)

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

Komise:

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

Členové: doc. Ing. Stanislav Kasa, CSc..
Ing. Diana Horkavcová, Ph.D.
Ing. Miroslav Rada, CSc. (organizační tajemník)

Sekce: **Analýza a vlastnosti léčiv**
posluchárna A31, 9:00 hod

Komise:

Předseda: prof. Ing. František Kovanda, CSc.

Členové: doc. Dr. Ing. Michal Hušák
RNDr. Alexandr Jegorov, CSc. (Teva Czech Industrie s.r.o.)
Dr. Ing. Jiří Brus (ÚMCH, AV ČR, v. v. i.)
Ing. Iva Briksová (organizační tajemník)

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

Komise:

Předseda: prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.

Členové: doc. Ing. František Hampl, CSc.
Ing. Petra Cuřínová, Ph.D. (ÚCHP)
Ing. Radek Jurok, Ph.D. (organizační tajemník)
Mgr. Martin Švec (VWR)
Ing. Marie Dymičová (Apigenex)

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

Komise:

Předseda: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Členové: doc. Ing. Igor Linhart, CSc.
Ing. Hana Kotoučová (PedF UK)
Ing. Michal Kohout, Ph.D. (organizační tajemník)
Ing. Jan Kočí, Ph.D. (Interpharma)
Ing. Petr Michálek (NeoTec)

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

Komise:

Předseda: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Členové: doc. Ing. Jan Kotek, Ph.D. (PřF UK)
Ing. Tomáš Martinů, Ph.D.
doc. Ing. Jan Budka, Ph.D. (organizační tajemník)
Ing. Jiří Vokál, Ph.D. (Lach-Ner)
Ing. Hanuš Slavík (Hexion)

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

Komise:

Předseda: prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

Členové: doc. Dr. Ing. Jana Hodačová
Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.
Ing. Eva Svobodová, Ph.D. (organizační tajemník)
Ing. Ivan Veselý, CSc. (CaymanPharma)
Ing. Karel Zelinka (LZ Draslovka)

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

Komise:

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

Členové: doc. Ing. Stanislav Rádl, CSc. (Zentiva)
Ing. Václav Kozmík, CSc.
Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D. (organizační tajemník)
PharmDr. Jan Pavlík, Ph.D. (CaymanPharma)
Ing. Jan Kroupa, Ph.D. (Proxim)

Sekce: **Výroba léčiv a technologie organických látek**
posluchárna A01, 9:00 hod

Komise:

Předseda: prof. Ing. Libor Červený, DrSc.

Členové: Ing. Jiří Krupka, Ph.D. (organizační tajemník)
doc. Ing. Josef Koubek, CSc.
Ing. Petr Durdil, CSc. (Zentiva)
Ing. Jana Šplíchalová, Ph.D. (VUAB Pharma)

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

Komise:

Předseda: prof. Ing. Jiří Hanika, DrSc. (ÚCHP AV).

Členové: Ing. Jan Patera, Ph.D. (organizační tajemník)
doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.
Ing. Radka Malá (Zentiva)
Ing. Zdeněk Cakl, Ph.D. (Lonza Ltd., Visp, Switzerland)
Ing. Jiří Petruš

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

Komise:

Předseda: doc. Ing. Pavel Čapek, CSc.

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

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

Komise:

Předseda: prof. Ing. Petr Sysel, CSc.

Členové: doc. Ing. Antonín Kuta, CSc.
Ing. Radka Kalousková, CSc.
Mgr. Soňa Hermanová, Ph.D.
Ing. Anatolij Sokolohorskyj (organizační tajemník)

Sekce: **Materiálové inženýrství I – Materiály pro elektroniku a nanotechnologie**
posluchárna B360, 9:00 hod

Komise:

Předseda: prof. Ing. Jindřich Leitner, DrSc.

Členové: doc. Ing. Petr Macháček, CSc.
doc. Ing. Petr Slepíčka, Ph.D.
doc. Ing. Jakub Siegel, Ph.D.
Ing. Jiří Podzemský, ABB s.r.o.

Sekce: **Materiálové inženýrství II – Materiály pro bioaplikace a farmacii**
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.
Ing. Eduard Suda, Maneko s.r.o.

Sekce: **Chemická informatika a bioinformatika**
posluchárna B34, 12:45 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.
Ing. Marek Matocha, Merck Sharp & Dohme

Sekce: **Restaurování a konzervování anorganických materiálů
prostor G02, 9:00 hod**

Komise:

Předseda: doc. Ing. Petr Kotlík, CSc.

Členové: Ing. Alexandra Kloužková CSc.

Dr. Ing. Dana Rohanová

Ljuba Svobodová

Ing. Jiří Děd, CSc.

Ivan Houska

PhDr. Světlana Spiwoková

Ing. Michal Novák, Ph.D.

Sekce: **Restaurování a konzervování textilu
prostor před A64, 9:30 hod**

Komise:

Předseda: doc. Ing. Petr Hron CSc.

Členové: Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.

Ing. Klára Drábková

Bc. Jana Bureš Víchová, DiS.

Sekce: **Technologie restaurování památek
prostor před A62, 8:30 hod**

Komise:

Předseda: doc. Dr. Ing. Michal Ďurovič

Členové: prof. Ing. Pavel Novák, CSc.

Ing. Irena Kučerová, Ph.D.

Ing. Vítězslav Knotek, Ph.D.

Ing. Šárka Msallamová

Sekce : Anorganická chemie

Syntéza misfitových kobaltitů metodou solid state pro termoelektrické aplikace

Autor: Jan Kovařík
Ročník: B3
Ústav: Anorganická chemie
Školitel: Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.

Cílem práce bylo keramickou cestou připravit řadu vrstevnatých kobaltitů s termoelektrickými vlastnostmi, přičemž příprava $[\text{Bi}_{2-x}\text{Sr}_x\text{O}_4][\text{CoO}_2]_{1,85}$, $[\text{Ca}_2\text{CoO}_4][\text{CoO}_2]_{1,62}$, $\text{Li}[\text{CoO}_2]$, $\text{Na}_{0,7}[\text{CoO}_2]$, $[\text{Bi}_{1,74}\text{Co}_{0,31}\text{Ca}_{2,01}\text{O}_4][\text{CoO}_2]_{1,69}$ proběhla úspěšně. Příprava $[\text{Ge}_x\text{Sr}_{2-x}\text{CoO}_3][\text{CoO}_2]_{1,8}$ systému nebyla úspěšná z důvodů termodynamické nestability této fáze. Vzorky byly analyzovány pomocí rentgenové difrakční analýzy a skenovací elektronové mikroskopie. Následně byly detailně charakterizovány termické a termodynamické vlastnosti systému $\text{Li}[\text{CoO}_2]$. Kyslíková nestechiometrie a termické vlastnosti byly analyzovány simultánně, pomocí simultánní termické analýzy. Nízkoteplotní tepelná kapacita byla změřena pomocí PPMS a DSC, relativní entalpie byla měřena pomocí vzhazovací kalorimetrie. Detailní analýza struktury a termodynamických vlastností směsných oxidů kobaltu je nezbytná pro následnou optimalizaci termoelektrických i mechanických vlastností těchto materiálů.

Sekce : Anorganická chemie

Syntéza a charakterizace chemicky a termicky redukováného grafenu

Autor: Petr Marvan
Ročník: B3
Ústav: Anorganická chemie
Školitel: Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.

Grafen je v poslední době velice zkoumaným materiálem především pro jeho unikátní mechanické vlastnosti, elektrickou a tepelnou vodivost. Cílem této práce bylo vyzkoušet přípravu grafenu top down metodami a následně přesně charakterizovat připravený materiál. Grafen byl připraven chemickou a termickou redukcí pěti různých oxidů grafitu, které byly připraveny Brodieho, Hofmanovou, Hummersovou, Staudmayerovou a Tourouovou metodou. Složení a vlastnosti byly následně analyzovány pomocí spalovací elementární analýzy, Ramanovy spektroskopie, elektronové mikroskopie, rentgenové difrakce, rentgenové fotoelektronové spektroskopie a simultánní termické analýzy. Nalezení nejvhodnější přípravy grafenu s požadovanými vlastnostmi je nezbytné pro zavedení nejvhodnější technologie průmyslové výroby grafenu.

Sekce : Anorganická chemie

Optické vlastnosti nanodiamantových vrstev

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

V současnosti je diamant považován za jeden z perspektivních materiálů ve fotonice. Důvodem je především jeho vysoká hodnota indexu lomu, vysoká chemická a mechanická odolnost, extrémní tepelná vodivost a biokompatibilita. Optické vlnovody zhotovené z tohoto materiálu vykazují vysoký kontrast indexu lomu, což umožní výrazné zmenšení fotonických součástek a vysokou kapacitu přenosu optického signálu. Jednou z možností přípravy uvedených vlnovodů je nanášení nanokrystalických vrstev pomocí MW PECVD (microwave plasma enhanced chemical vapor deposition). Předpokládáme, že dotace vrstev ionty erbia, které mají výraznou emisi v oblasti okolo 1,5 μm , umožní především snížení útlumu optického signálu.

Ve spolupráci s FÚ AVČR byly připraveny nanokrystalické diamantové vrstvy na různých podložkách, které jsme poté implantovali erbitými ionty s energií 190 keV a s dávkou 1×10^{14} až 5×10^{15} ion.cm^{-2} . Podle množství poruch vzniklých implantací byla hledána vhodná teplota a způsob žíhání. Ve své práci jsem namodelovala distribuci implantovaného erbia v monokrystalickém vzorku, spočítala množství poruch a navrhla jsem podmínky žíhání v souladu s dosud publikovanými pracemi. Změny vlastností vrstev vlivem žíhání byly analyzovány Ramanovou a luminiscenční spektroskopií. V příspěvku budou presentovány první experimenty.

Sekce : Anorganická chemie

Syntéza *ortho*-karboranyl sulfamidů, inhibitorů karbonické anhydrázy IX

Autor: Dominik Pek
Ročník: M1
Ústav: Anorganické chemie; ÚACH AV ČR, v.i.i., Husinec-Řež
Školitel: RNDr. Václav Šícha, Ph.D.

Ortho-karboran je základní sloučeninou karboranové chemie a nejčastěji užívaným analogem benzenu pro cílenou modifikaci vlastností léčivých látek. Je prekurzorem pro přípravu *meta*- i *para*- isomerů $\text{C}_2\text{B}_{10}\text{H}_{12}$ klastrů, může být také degradován na *nido*-7,8- $\text{C}_2\text{B}_9\text{H}_{11}^{(-)}$, který se používá jako ligand pro přípravu mnoha metallakarboranů. Jeho příprava je však omezena pouze na inzerci alkynu do bis(ligando)-*arachno*-dekaboranu, jelikož samotný *nido*-dekaboran reakcí s ethynem kýžený *ortho*-karboran neposkytuje. Pro zvýšení jeho reaktivity je v prvním kroku výhodné substituovat terminální vodíkové můstky *nido*-dekaboranu Lewisovou bází.¹ Jiná metoda využívá namísto Lewisovy báze iontovou kapalinu jakožto katalyzátor. Za těchto podmínek obvykle reakční doba, v závislosti na použité iontové kapalině, nepřekročí jednu hodinu, s dobrými až vynikajícími výtěžky.² Tuto metodu jsme také použili pro syntézu dvou nových látek N-(1-karboranyl)methylftalimidu a N-3-(1-karboranyl)fenylftalimidu, které byly následně převedeny třemi kroky na biologicky aktivní sulfamidové deriváty. Produkty byly charakterizovány pomocí ^1H , ^{11}B , ^{13}C NMR, MS, HPLC a v případě N-(1-karboranyl)-methylftalimidu i rentgenovou difrakcí. Následně byl připravený sulfamid derivát *ortho*-karboranu poskytnut pro testy inhibice terapeuticky významné isoformy IX karbonické anhydrázy.³

1. Grimes RN, Carboranes. 2. vydání. Academic Press New York 2011, 1139 stran.

2. Li Y. et al., *Inorg. Chem.* 2008, 47(20), 9193.

3. Brynda J. et al., *Angew. Chem. Int.* 2013, (52)51, 13760.

Sekce : Anorganická chemie

Syntéza a chemické modifikace fluorografenu

Autor: Alena Libánská
Ročník: B3
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: doc. Ing. Zdeněk Sofer, Ph.D.

Fluorografen patří mezi několik málo derivátů grafenu, které je možno syntetizovat v stechiometrickém poměru C_1X_1 , v tomto případě C_1F_1 . Na rozdíl od čistého grafenu je možné kontinuální změnou obsahu fluoru měnit energii zakázaného pásu a další jeho vlastnosti. Syntéza fluorografenu s různým obsahem fluoru až po stechiometrii $C_1F_{1.1}$ byla prováděna reakcí termicky redukovaného grafenu s fluorem za zvýšeného tlaku a teploty. Syntetizovaný materiál byl následně charakterizován širokým spektrem analytických technik pro studium vlivu obsahu fluoru na jeho vlastnosti. Optimalizovaný postup fluorace byl následně použit pro syntézu výchozího „perfluorovaného“ grafenu o stechiometrii $C_1F_{1.1}$ pro studium jeho reaktivity s Grignardovými činidly. Byl detailně studován vliv struktury Grignardova činidla na stupeň modifikace výsledného fluorografenu. Pro analýzu syntetizovaných materiálů byla použita elementární spalovací analýza, FT-IR a Ramanova spektroskopie, fotoelektronová spektroskopie, rtg. difrakce. Morfologie byla studována pomocí SEM, STEM a AFM mikroskopie. Deuteroaná Grignardova činidla (deuteroaný methylmagnesium bromid) byla použita pro měření stupně chemické modifikace pomocí sledování obsahu deuteria metodou jaderné spektroskopie (RBS/ERDA).

Sekce : Anorganická chemie

Vliv teploty na mechanismus exfoliace oxidů grafitu

Autor: Michal Lojka
Ročník: B3
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: Ing. Ondřej Jankovský, Ph.D.

Tématem mé práce je detailní analýza procesu termické redukce / exfoliace oxidu grafitu. Termická redukce probíhala ve dvou atmosférách, konkrétně v dusíkové a vodíkové za různých teplot (400°C, 600°C, 800°C a 1000°C). Celkem bylo připraveno 16 vzorků grafenu ze dvou různých oxidů grafitu, připravených Hofmannovou a z Hummersovou metodou. Všechny vzorky byly analyzovány pomocí Ramanovy spektroskopie, simultánní termické analýzy, fotoelektronové spektroskopie a spalovací elementární analýzy. Ke zjištění skutečné struktury byl použit elektronový skenovací mikroskop. Produkty vzniklé během termické redukce byly analyzovány pomocí kombinace plynové chromatografie a hmotnostní spektrometrie. Ukázalo se, že za nízkých teplot z grafenu unikají jednodušší organické sloučeniny, zatímco za vysokých teplot dochází ke vzniku převážně složitějších organických látek jako například benzen nebo naftalen. Tyto výsledky ukazují, že mechanismus termické redukce není spojen pouze se vznikem CO_2 a H_2O , ale dochází i ke vzniku celé řady organických látek, které mohou být často velmi nebezpečné pro zdraví. Tato práce je klíčová pro nastavení vhodných podmínek pro syntézu grafenu v průmyslovém měřítku.

Sekce : Anorganická chemie

Templátová syntéza modelových komplexov Co(II), Ni(II), Zn(II) s ligandmi typu Schiffových bází

Autor: Bc. Miroslava Guricová
Ročník: M2
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: Ing. Irena Hoskovcová, CSc.

Schiffove bázy vznikajú kondenzáciou aldehydu a amínu. V živých systémoch sú Schiffove bázy medzistupňom transaminačného procesu. Dôležitú úlohu pri tvorbe Schiffových báz zohrávajú ióny ľahkých prechodných kovov. Ako modelové kovy boli vybrané Ni(II), Co(II) a Zn(II). Študovali sme roztoky, ktoré obsahovali niektorý z vybraných iónov, amín taurín (Tau), a jeden z aldehydov, salicylaldehyd (sal) alebo pyridoxal (PL).

Komplexy boli pripravované reakciou síranov kovov s neizolovanými ligandmi a bázou KHCO_3 . Boli charakterizované elementárnou analýzou, IR spektroskopiou, RTG analýzou a cyklickou voltametriad. Pre porovnanie vlastností boli pripravené a charakterizované všetkými opísanými metódami aj izolované ligandy sal-Tau, PL-Tau.

Koordinačné zlúčeniny obsahujúce Schiffovu bázu sal-Tau boli izolované so všetkými tromi kovmi. V prípade PL-Tau vznikli komplexy iba s Co(II) a Ni(II). RTG štruktúrnou analýzou sme stanovili štruktúru komplexu $[\text{Co}(\text{PL-Tau})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$, ktorá zatiaľ nebola popísaná.

Sekce : Anorganická chemie

Modelování infračervených spekter koordinačních sloučenin metodou DFT

Autor: Bc. Martin Pižl
Ročník: M2
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: Ing. Irena Hoskovcová, CSc.

Infračervená spektroskopie je hojně využívána k určování donorových skupin na ligandu po vytvoření komplexů. K určení těchto skupin je nutné charakterizovat spektrum samotného ligandu a porovnáním se spektrem komplexu lze identifikovat donorová místa. Cílem této práce bylo najít vhodnou metodu pro výpočet modelových spekter tak, aby co nejlépe odpovídala experimentu. Jako modelové sloučeniny byly vybrány - komplexy $[\text{Co}(\text{HPL-Tau})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ a ligand HPL-Tau(1-).

Výpočty byly provedeny v programu Gaussian 09 metodou DFT (density functional theory). Pro modelování spekter DFT metodikou byly použity tři typy hybridních funkcionalů – B3LYP, M062X a PBE1PBE. Byl vyzkoušen vliv difúzních funkcí na bázi atomových orbitalů (AO) 6-311G(d) pro H, C, O, N, S a 6-311G(3df) pro Co. Kritériem hodnocení nejlepšího způsobu výpočtu bylo srovnání vypočtených vzdáleností atomů v koordinační sféře a vzdáleností nalezených v krystalové struktuře komplexu. Nejlepší kombinace funkcionalu a báze AO byla poté ověřena na $[\text{Cu}(\text{HPL-Tau})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$.

Sekce : Anorganická chemie

Hybridní katalyzátor na bázi grafenu modifikovaného FePt a IrO₂

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

Grafen patří díky svému velkému povrchu a výborné elektrické vodivosti k perspektivním nosičům katalyzátoru pro široké spektrum elektrochemických aplikací. Hybridní katalyzátor na bázi grafenu modifikovaného Fe, Pt a IrO₂ může fungovat jako magnetický duální katalyzátor pro oxidaci vodíku i redukci kyslíku. Syntéza byla realizována termickou redukcí oxidu grafitu, dopovaného prekurzorem Fe a Pt v molárním poměru 1:1 v atmosféře vodíku. Pro dopování oxidem iridičtým byl následně grafen dotován Fe a Pt rozdispergován ve vodě s prekurzorem ((NH₄)₂IrCl₆). Syntéza IrO₂ byla realizována dvěma postupy. První postup je založen na srážení hydratovaného IrO₂ hydroxidem draselným na povrchu grafenu za zvýšené teploty a dehydratací při 350 °C v inerte atmosféře. Druhý postup je založen na rozkladu prekurzoru tavením s NaNO₃ při 350 °C. Syntetizované hybridní katalyzátory byly následně detailně charakterizovány pomocí fotoelektronové spektroskopie, rtg. difrakce, Ramanovy a FT-IR spektroskopie. Morfologie hybridního katalyzátoru a distribuce jednotlivých prvků byla studována pomocí SEM, STEM a elektronové mikrosondy. Magnetické vlastnosti byly studovány pomocí vibračního magnetometru. Katalytické vlastnosti byly následně testovány pomocí cyklické voltametrie pro vývoj vodíku a redukci kyslíku.

Sekce : Anorganická chemie

Studium přípravy tenkých optických vrstev mědi připravených pomocí metody sol-gel

Autor: Petr Vařák
Ročník: B3
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: Ing. Blanka Švecová, Ph.D.

Skla obsahující ionty jednomocné mědi Cu(I) jsou perspektivním materiálem pro fotoniku především díky svému silnému, širokému emisnímu pásu v modro-zelené oblasti spektra. Bylo prokázáno, že ve sklech obsahujících ionty Cu⁺ často dochází k oxidaci na Cu²⁺ nebo redukci na Cu⁰. Oxidační stav mědi lze ovlivnit jednak způsobem, jakým se měď do skla dotuje, ale také složením hostující matrice skla.

Tenké vrstvy obsahující ionty mědi byly připraveny metodou sol-gel, konkrétně technikou dip-coating. Sodno-vápenaté silikátové sklo bylo ponořeno do křemičitých solů obsahujících stejné množství iontů mědi Cu(I), avšak lišících se typem surfaktantu. Po odpaření rozpouštědla byly vzorky vypáleny. U vzorků byl sledován vliv surfaktantu na kvalitu připravených vrstev, vlnovodné vlastnosti a spektroskopické vlastnosti připravených vrstev.

Sekce : Anorganická chemie

Příprava a charakteristika tenkých vrstev $\text{Er}^{3+}:\text{Yb}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$

Autor: Bc. Vojtěch Polák
Ročník: M2
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: Ing. Vít Jakeš, Ph.D.

Granátová struktura je velmi vhodnou základní maticí pro umístění opticky aktivních iontů a lze ji proto použít pro přípravu optických planárních vlnovodů. Jako dopanty se nejčastěji používají ionty přechodných kovů anebo ionty kovů vzácných zemin. Cílem této práce bylo připravit vrstvy o složení $(\text{Yb}_{1-x}\text{Er}_x)_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$, ($x = 0,005; 0,02; 0,1$). Jako substrát jsem použil monokrystalický SiO_2 (001). Roztoky pro nanášení vrstev jsem připravoval metodou sol-gel. Prekurzory pro syntézu roztoků byly octany erbitů a ytterbitů společně s chloridem hlinitým. Jako chelatační činidlo jsem použil kyselinu octovou a polyvinylpyrrolidon. Fázová analýza takto připravených tenkých vrstev byla provedena pomocí rentgenové difrakce. Pro zhodnocení morfologie vrstev byla použita skenovací elektronová mikroskopie a mikroskopie atomárních sil. Optické vlastnosti vrstev byly charakterizovány měřením luminiscence (infračervená emisní spektra Er^{3+}) a m-line spektroskopie.

Sekce : Anorganická technologie I

Stanovení transportních parametrů O_2 v katalytické vrstvě pro HT PEM-FC imobilizované Nafionem[®]

Autor: Bc. Michal Carda
Ročník: M1
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Ing. Tomáš Bystroň, Ph.D.

Palivové články s protonově vodivou membránou (PEM-FC) jsou progresivním řešením v přeměně chemické energie uložené ve vodíku na elektrickou energii. Vyžadují však použití platinových katalyzátorů, které jsou citlivé na katalytické jedy, jako je CO. Jednou z možností jak zabránit otravě katalyzátoru CO je zvýšení provozní teploty na 160 °C (HT PEM-FC). To ovšem vyžaduje přítomnost PBI membrány dopované H_3PO_4 . Přítomnost horké koncentrované H_3PO_4 vede ke značným potížím se stanovením aktivity katalyzátorů, což je problém zejména u katalyzátorů pro redukci O_2 na katodě HT PEM-FC. Tato reakce značně limituje celkový výkon HT PEM-FC.

Cílem práce bylo stanovení transportních parametrů O_2 ve vrstvě pojiva katalyzátoru. To je jeden z parametrů nezbytných pro stanovení katalytické aktivity katalyzátoru. Metodou tenkého filmu byly připraveny elektrody s komerčním katalyzátorem imobilizovaným vrstvou vodivého polymeru Nafion[®] o různých tloušťkách. Transportní parametry O_2 ve vrstvě pojiva byly vyhodnoceny z voltametrických křivek naměřených s použitím rotační diskové elektrody.

Sekce : Anorganická technologie I

Možnosti čištění skládkových výluhů s využitím vyspělých membránových technologií

Autor: Bc. Michal Carda
Ročník: M1
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: doc. Ing. Martin Paidar, Ph.D.

Rostoucí počet obyvatel, rozšiřující se průmysl a obchodní růst v mnoha zemích na celém světě vede v posledních dekádách k rapidnímu zvyšování produkce pevných komunálních a průmyslových odpadů. Například v 90. letech byla roční produkce odpadu ve vyspělých zemích 300 až 800 kg na osobu. Jedním z efektivních způsobů zpracování skládkových výluhů se ukazují membránové separační procesy. Na základě veřejně dostupných informací bylo zjištěno, že pro čištění výluhů je možné použít celou plejádu technologií, kterými mohou být například tlakové membránové procesy jako mikro- a nano-filtrace, především pak reversní osmóza (RO). Samozřejmě dominující technologií se ukázalo použití membránových bioreaktorů, jež však nebyly zahrnuty do celkového kompendia informací. V jistých případech se ukázalo i použití elektromembránové technologie – elektrodialýzy jako vhodné alternativy vůči konvenčním čistírnám odpadních vod.

Cílem práce bylo provést literární rešerši a určit klady a zápory jednotlivých membránových technologií. Aplikace membránových technologií vyžaduje individuální přístup s ohledem na složení konkrétních vod. Nicméně vzhledem k vysoké separační schopnosti se RO jeví jako jedna z nejúčinnějších a nejvíce aplikovaných metod pro čištění skládkových výluhů.

Sekce : Anorganická technologie I

Vývoj svazkového alkalického elektrolyzéru s anion selektivním polymerním elektrolytem

Autor: Bc. Tereza Jadrná
Ročník: M2
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Ing. Jaromír Hnát, Ph.D.

Jedním z diskutovaných témat současné, nejen odborné, společnosti je téma vodíkové ekonomiky. Vodík zde nachází uplatnění nejen jako významná chemická surovina, ale i jako nosič energie, který je produkován elektrolýzou vody za využití okamžitých přebytků elektrické energie z obnovitelných zdrojů. Elektrolýtický rozklad vody se v současné době v průmyslové praxi provádí převážně alkalickou elektrolýzou vody. Mezi hlavní nevýhody tohoto přístupu patří anorganická diafragma používaná jako separátor anodového a katodového prostoru. S tím je do jisté míry spojená, v porovnání s membránovou elektrolýzou vody nižší intenzita procesu při stejné napěťové účinnosti. Cílem mé práce je částečná eliminace těchto nevýhod alkalické elektrolýzy vody pomocí vývoje moderního svazkového alkalického elektrolyzéru s použitím anion selektivních membrán.

V první fázi byl sledován vliv distributoru elektrolytu a vliv rychlosti průtoku elektrolytu na vznik distribučních stínů. V druhé fázi byl vyhodnocen vliv pracovních podmínek na proudovou účinnost procesu. V posledním kroku byly za různých pracovních podmínek stanoveny zátěžové křivky alkalické elektrolýzy vody. Získané výsledky představují originální přínos do problematiky alkalické elektrolýzy vody.

Sekce : Anorganická technologie I

Vliv vnější difuze na fotokatalytickou oxidaci toluenu v plynné fázi

Autor: Bc. Libor Obal
Ročník: M2
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: prof. Dr. Ing. Josef Krýsa

Toluen patří mezi těkavé organické látky (VOC), které mohou mít negativní vliv na lidské zdraví i při nízkých koncentracích. Jednou z možných metod eliminace toluenu ze vzduchu je fotokatalytická oxidace na TiO_2 . Pro praktické aplikace lze využít povlaky obsahující částice TiO_2 nanesené na různých podkladech (sklo, beton, dlaždice). Za účelem porovnávání aktivit různých fotokatalyticky aktivních materiálů byla vyvinuta standardní metoda (ISO 22197) využívající průtočné deskové fotoreaktory.

Cílem předložené práce bylo stanovit, zda při experimentálních podmínkách daných touto normou pracuje fotoreaktor v kinetickém režimu, což je podmínkou pro rozlišení aktivity různých materiálů. Za tímto účelem byly připraveny částicové vrstvy komerčního fotokatalyzátoru na bázi TiO_2 (Degussa P90) o různé délce aktivní plochy. Princip experimentu spočíval v simultánní změně průtoku a plochy fotoaktivní vrstvy tak, aby byla vždy zachována stejná doba kontaktu plynu s povrchem fotokatalyzátoru. Dosažené konverze toluenu byly počítány ze vstupních a výstupních koncentrací zjištěných pomocí plynového chromatografu. V závěru předložené práce je diskutována závislost konverze toluenu na zvoleném průtoku.

Sekce : Anorganická technologie I

Ověření stability anion selektivních membrán s kladně nabitou funkční skupinou v alkalických roztocích

Autor: Michaela Plevová
Ročník: B3
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Ing. Jaromír Hnát, Ph.D.

Funkční anion selektivní materiály se mohou úspěšně uplatnit například jako náhrada za anorganickou diafragmu, používanou v průmyslových jednotkách alkalické elektrolyzy vody. Touto náhradou lze dosáhnout snížení koncentrace kapalného elektrolytu KOH, která může u současných jednotek dosahovat hodnoty až 30hm.%. Snížení koncentrace KOH povede ke zvýšení flexibility a bezpečnosti procesu a umožní zapojení této technologie do konceptu vodíkové ekonomiky. Membrány schopné vyměňovat záporně nabitě ionty jsou tvořeny polymerní maticí, ke které je připojena kladně nabitá funkční skupina, nejčastěji ve formě čtyřmocné sloučeniny dusíku. Problémem těchto membrán je jejich stabilita v prostředí koncentrovaného KOH a při vyšších pracovních teplotách. Mezi nejstabilnější funkční skupiny patří trimethylamoniová (TMA) funkční skupina. Trimethylamin má však negativní dopad na životní prostředí. Možnou náhradu TMA skupin představuje 1,4-Diazabicyklo[2.2.2]oktan (DABCO).

Cílem této práce je charakterizovat vlastnosti, jako je iontově výměnná kapacita a iontová vodivost, anion selektivních membrán s TMA a DABCO funkčními skupinami, při různých koncentracích KOH a při různých teplotách a tím ověřit jejich stabilitu za různých podmínek a identifikovat optimální pracovní podmínky.

Sekce : Anorganická technologie I

Elektrochemická příprava WO₃ vrstev a jejich fotoelektrochemické vlastnosti

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

Trendem současné doby je snaha o nahrazení fosilních paliv obnovitelnými zdroji energie. Jednou z možných variant je fotoelektrochemický rozklad vody, při kterém vzniká vodík a kyslík. Vodík je možnou alternativou k fosilním palivům a v budoucnu může sloužit jako médium pro uskladnění elektrické energie vyráběné z alternativních zdrojů.

K fotoelektrochemickému rozkladu vody se využívá vrstev některých polovodičových materiálů. Jedním z nich je oxid wolframový, který je vhodný pro svou vysokou odolnost ve vodném a kyselém prostředí. Vyznačuje se šetrností k životnímu prostředí a nízkou nákladností.

V této práci byla na kovovém wolframu elektrochemicky získána vrstva WO₃. Jako elektrolyt byl použit roztok obsahující 1 mol·dm⁻³ (NH₄)₂SO₄ a 0,5 % NH₄F. Wolfram ve formě plíšku byl zapojen jako anoda, protielektrodou byl Pt plíšek.

Základním cílem této práce bylo určit vliv napětí a doby oxidace wolframu na strukturu a fotoelektrochemické vlastnosti připravených vrstev. Dále se zjišťoval vliv doby žhání na vlastnosti WO₃ vrstev.

Sekce : Anorganická technologie II

Vliv asymetrie nátoky vstupních roztoků na rovnoměrnost distribuce hmoty a proudu v pilotní elektrodialýzní jednotce

Autor: Bc. Petr Bubeníček
Ročník: M2
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Ing. Roman Kodým, Ph.D.

Elektrodialýza (ED) je elektromembránový separační proces, při němž dochází k oddělení iontů z roztoku působením elektrického pole s využitím rozdílné permselektivity iontově selektivních membrán. Uplatnění nachází při výrobě pitné vody z vody mořské či brakické. Význam ED také roste zejména v oblasti regenerace odpadních průmyslových roztoků s obsahem cenné složky a při výrobě specialit farmaceutického a potravinářského průmyslu.

Technologické požadavky i rentabilita procesu aktuálně vedou ke zvětšování průmyslových ED jednotek. To může vést k problémům s vyšší nerovnoměrností distribuce hmoty a náboje. Tyto aspekty však rozhodují o výkonu a životnosti zařízení. Tato práce se zaměřuje zejména na odhalení příčin vedoucích k haváriím průmyslových ED jednotek, způsobených nerovnoměrnou distribucí náboje. Proto byl realizován provoz pilotní ED jednotky za podmínek blízkých průmyslové praxi. Během experimentů byly sledovány základní globální provozní parametry a lokální distribuce proudu podél obou elektrod (umožněné segmentací elektrod). V rámci práce byl studován vliv asymetrického nátoky vstupních roztoků a jejich různá koncentrace. Ukazuje se, že právě tyto provozní stavy mohou vést k selhání ED jednotky. Experimentální výsledky navíc představují cenná vstupní data pro matematické modely ED procesu.

Sekce : Anorganická technologie II

Příprava elektrod pro oxidační procesy v elektrochemické úpravě vod

Autor: Karel Denk
Ročník: B3
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: doc. Ing. Martin Paidar, Ph.D.

Elektrochemické metody odstraňování nečistot představují vysoce flexibilní způsob řešení problematiky odpadních vod. Jsou vhodné pro odstranění těžkých kovů, anorganických i organických nečistot, především u menších zdrojů kontaminace.

Tato práce se věnuje přípravě elektrod s vhodnými vlastnostmi k účinnému a dlouhodobému odstraňování organických nečistot z vody. Základem je titanová elektroda s vrstvou oxidu cínitého dopovaného antimonem. U tohoto základu jsou zkoumány vlivy různých způsobů předúpravy titanu a příměsí v nanášené vrstvě na výsledné elektrochemické vlastnosti a schopnost odbourávat organické látky z vody. Jako modelová látka je použita Acid orange 7.

U připravených elektrod jsou dále navrženy vhodné podmínky pro jejich použití. Vybrané elektrody jsou poté podrobeny dlouhodobým testům.

Ukazuje se, že vrstva tvořená pouze $\text{SnO}_2\text{-Sb}_2\text{O}_3$ není příliš odolná vůči degradaci a je potřeba ji upravit další vhodnou příměsí.

Sekce : Anorganická technologie II

Vývoj kompozitních membrán pro separaci plynů na bázi materiálu ZIF/Polyimid

Autor: Bc. David Dlouhý
Ročník: M1
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Dr. Ing. Vlastimil Fíla

Membránová separace plynů představuje vhodnou alternativu k dnešním, průmyslově realizovaným procesům pro separaci plynů, mezi které patří kryogenní destilace, absorpce plynů ve vhodných kapalinách, adsorpce plynů na porézních materiálech nebo chemická reakce plynu s vhodným reaktantem za vzniku pevné látky.

Cílem práce bylo nalezení vhodných materiálů pro jednokrokovou přípravu kompozitních membrán na bázi materiálu ZIF/Polyimid. ZIF (Zeolitic Imidazole Framework) je podtřída tzv. MOF (Metal Organic Framework). Jedná se o struktury na bázi kovu, schopného tvořit zejména tetraedrické komplexy a substituovaného imidazolu, který slouží jako ligand. Výsledkem jsou porézní matrice mající podobné struktury jako zeolity. V systému MMM (Mixed Matrix Membranes) ZIF plní roli plnidla. Polyimidy jsou polymery s dobrými užitnými vlastnostmi, jako např. chemická, tepelná a mechanická stabilita. Jedná se o struktury tvořené dvěma popř. více monomery, zpracováváné přímo nebo ve stádiu polyamidkarboxylové kyseliny. Při membránové separaci plynů se polyimidové membrány vyznačují vysokou selektivitou a nízkou permeabilitou. Membrány z materiálu ZIF mají větší propustnost. Kombinace těchto materiálů může vést k vytvoření membrán s dobrou selektivitou i permeabilitou zároveň.

Sekce : Anorganická technologie II

Příprava poplatinovaných titanových elektrod pro elektrochemické procesy

Autor: Zdeněk Korous
Ročník: B3
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: doc. Ing. Martin Paidar, Ph.D.

Anody z poplatinovaného titanu se dnes široce využívají v elektrochemických procesech. Nacházejí uplatnění při elektrochemickém čištění vody, elektrochemických syntézách, elektrodialýze nebo galvanickém pokovování. Cílem této práce je vyloučit a charakterizovat platinovou vrstvu na titanovém podkladu.

První částí práce byla příprava roztoku kyseliny hexachloroplatičité z kovové platiny. Platina byla následně nanášena elektrochemicky za použití platinovacích lázní o různém složení. Náplní práce bylo mimo jiné i posouzení efektivity různých platinovacích lázní. Dále byl studován vliv způsobu předúpravy povrchu titanu z hlediska vzájemné soudružnosti kovů a vliv proudové hustoty na vlastnosti platinového povrchu.

Pro charakterizaci připravených elektrod byly využity metody cyklické voltametrie a optické mikroskopie. Předúprava mořením v kyselině chlorovodíkové se ukázala jako vhodnější než moření v kyselině šťavelové. Volbou vhodných proudových hustot se podařilo dosáhnout kompaktní vrstvy platiny na titanovém podkladu.

Sekce : Anorganická technologie II

Příprava a optimalizace elektrolytu pro vysokoteplotní elektrolyzér vody metodou lisování

Autor: Marek Lavorenti
Ročník: B3
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Ing. Jaromír Hnát, Ph.D.

Vysokoteplotní elektrolýza vody (SOEC) s provozní teplotou okolo 800°C představuje velmi inovativní způsob výroby vodíku. Hlavní výhodou této technologie spočívá ve schopnosti pracovat jak v režimu elektrolýzy vody, tak v režimu palivového článku (SOFC), a tím tak zase z vodíku vyrábět zpětně elektrickou energii. Díky tomu lze udržet stabilní dodávku elektrické energie do rozvodné sítě v čase. Výkyvy jsou způsobeny použitím alternativních zdrojů energie, které jsou stále více zastoupeny, a jejichž výkon je silně závislý na změnách počasí.

Základní součástí článků je keramický elektrolyt, na který je kladena řada požadavků, jako je stabilita při provozní teplotě, plynatěsnost a vysoká iontová vodivost. Tyto nároky splňuje, například ZrO_2 dopovaný Y_2O_3 standardně označovaný zkratkou YSZ (yttria stabilized zirconia), jehož použití je v současnosti nejčastější.

Jednou z možností přípravy elektrolytu je lisování ve formě tablet, které se následně vypalují při teplotách až 1400°C, kdy dojde k jejich slinutí. Ve své práci jsem tablety YSZ připravoval různými způsoby tak, abych jejich tloušťku snížil na minimum, a tím dosáhl jejich optimálních vlastností. Sledoval jsem především jejich iontovou vodivost a plynatěsnost. S úspěchem jsem připravil YSZ elektrolyt s vyhovujícími vlastnostmi pro použití v SOEC/SOFC článku.

Sekce : Anorganická technologie II

Optimalizace přípravy anody pro PEM elektrolýzu vody

Autor: Jakub Rutrle
Ročník: B3
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Ing. Tomáš Bystroň, Ph.D.

Jedním z nejúčinnějších způsobů výroby vodíku je PEM elektrolýza vody. Její průmyslovou aplikaci však limituje především vysoká cena elektrolyzéru způsobená užitým katalyzátorem na bázi iridia a vysoce korozivním prostředím vyžadujícím antikorozi ochranu konstrukčních materiálů elektrolyzéru, např. platinováním a zlacením. Nejvyšší nároky jsou kladeny na stabilitu anody, která je vystavena kromě kyselého prostředí i vysokému elektrodovému potenciálu. Anoda je tvořena nosičem (Ti, Ta) a katalytickou vrstvou.

Cílem práce bylo optimalizovat přípravu anody. Připravené anody byly tvořeny titanovým drátem s nanosenou katalytickou vrstvou tvořenou katalyzátorem - IrO₂ a pojivem - Nafion®.

Byl zkoumán vliv moření titanového drátu, jeho poplatinování a výpalu elektrody na rychlost degradace a dosažené proudové hustoty při cyklovoltametrických měřeních ve 0,5 molárním vodném roztoku H₂SO₄. Uvedené experimentální podmínky simulují reálné podmínky v PEM elektrolyzéru.

K nejvyšším proudovým hustotám vedla předúprava povrchu titanu mořením v HCl a tepelné ošetření elektrody při 190 °C k nejvyšší stabilitě poté poplatinování titanového nosiče.

Sekce : Kovové materiály I

Nanostrukturování povrchu slitin na bázi TiNbTaSn

Autor: Bc. Matěj Člupek
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jaroslav Fojt, Ph.D.

Zkoumané slitiny na bázi Ti-25Nb-4Ta-XSn (X = 4, 6, 8, 10) patří mezi beta slitiny titanu. Ty se vyznačují nižším modulem pružnosti, který se blíží modulu kosti. Z tohoto důvodu se uvažuje o jejich využití v implantologii. Díky nižšímu modulu pružnosti je u beta slitin snížena biomechanická nekompatibilita. Povrch těchto slitin může být nanostrukturován, což by mělo vést ke snadnější osseointegraci implantátu. Nanostruktura tubulárního charakteru je tvořena oxidy titanu a legujících prvků a vzniká v důsledku anodické oxidace v prostředí fluoridových iontů, které rozrušují rostoucí oxidickou vrstvu. Cílem této práce bylo připravit nanotubulární povrch na výše uvedených slitinách titanu. Vhodnou volbou elektrolytu a elektrochemických podmínek modifikovat vznikající nanotrubky. Anodickou oxidací byly připraveny nanostrutury na všech zkoumaných slitinách. Volbou potenciálu byl modifikován jak průměr, tak délka vznikajících trubek.

Sekce : Kovové materiály I

Korozivzdorná ocel 316L připravená 3D tiskem

Autor: Michaela Fousová
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jiří Kubásek

Rozšíření technologie 3D tisku i na kovové materiály otevírá novou možnost, jak vyrábět 3D modely přímo z kovových prášků. Existuje několik různých metod 3D tisku kovových materiálů, např. *Selective Laser Sintering* (SLS), *Electron beam melting* (EBM) nebo *Selective laser melting* (SLM). Oproti běžným technologiím odlévání, tváření a obrábění nabízí tyto metody mnoho výhod. Umožňují připravit výrobky velmi komplikovaných tvarů, nevyžadují další povýrobní úpravy a také šetří náklady, jelikož při výrobě prakticky nedochází ke ztrátě materiálu. 3D tisk umožňuje nejen přípravu implantátů přímo na míru pacienta, ale i tvorbu složitějších porézních struktur, které jsou žádoucí pro přiblížení se mechanickým vlastnostem kosti a pro lepší fixaci implantátu v kostní tkáni.

Cílem této práce bylo porovnat strukturu a mechanické vlastnosti korozivzdorné oceli 316L připravené metodou SLM se stejným materiálem připraveným klasickými komerčními metodami. Na základě získaných dat byl připraven model porézního scaffoldu, který by mohl sloužit pro výplň kostních defektů.

Sekce : Kovové materiály I

Impedanční odezva modifikovaného povrchu titanu a jeho slitin

Autor: Bc. Vojtěch Hybášek
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jaroslav Fojt, Ph.D.

Titan a jeho slitiny nachází široké uplatnění v oblasti implantologie. V současné době je značná pozornost věnována úpravám povrchu těchto materiálů, které vedou k jeho snadnější osseointegraci. Tyto modifikace však nesmí negativně ovlivnit stabilitu materiálu v tělním prostředí. Jedním z nástrojů, kterým lze popsat elektrochemické chování povrchu je impedanční spektroskopie. Cílem této práce je popsat impedanční chování různých stavů povrchu titanu a jeho slitin. V první řadě byla pozornost zaměřena na nativní pasivní vrstvu a dále pak na anodizovaný povrch. Získané poznatky budou sloužit jako podklad pro popis složitějších povrchových úprav, zejména pak nanotubulárních povrchů. Zkoumány budou alfa, beta i alfa-beta slitiny, kde se situace komplikuje o přítomnost vyleptaných beta fází, které tvoří povrch ještě komplikovanějším.

Sekce : Kovové materiály I

Využití buněčného media při studiu bioaktivity materiálů

Autor: Petra Jarolímová
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Ing. Luděk Joska, CSc.

Bioaktivita materiálů je studována v řadě modelových prostředí. Ve většině standardních prací se jedná o anorganické modely tělních tekutin na různé úrovni sofistikovanosti, počínaje fyziologickým roztokem, až po simulovanou tělní tekutinu. V organismu se však jedná o komplexní interakci materiálu a biologického prostředí. V buněčných studiích jsou používána tzv. minimální esenciální media. Cílem práce bylo formulovat obecné podmínky pro sterilní přípravu McCoy media a realizovat úvodní měření se slitinou TiAlV. V průběhu řešení byl zpracován postup garantující sterilitu a stabilitu média po dostatečně dlouhou dobu a způsob zajištění sterility expozičního prostředí. Byla realizována testovací měření v délce 148 hodin.

Sekce : Kovové materiály I

Vlastnosti kompozitů s hořčíkovou maticí vyztužených whiskery SiC

Autor: Vít Jonák
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jan Šerák, Ph.D.

Tento projekt se zabývá kompozitními materiály s hořčíkovou maticí vyztuženými whiskery SiC, jež jsou perspektivními materiály díky svému výbornému poměru mechanických vlastností a hustoty. Vzorky s různými obsahy výztuže byly připraveny metodami práškové metalurgie a gravitačního odlévání. Byla zdokumentována mikrostruktura na světelném mikroskopu a na skenovacím elektronovém mikroskopu (SEM). Dále byly měřeny mechanické vlastnosti kompozitů a to tvrdost dle Vickerse (HV) a pevnost v tlaku za laboratorních a zvýšených teplot. Lomové plochy byly zdokumentovány pomocí SEM. Whiskery nebyly homogenně distribuovány v matici, což se následně negativně projevilo na mechanických vlastnostech vzorků.

Sekce : Kovové materiály I

Vliv ultrazvuku a mikrovln na amoniakální loužení hlubokomořských konkrecí

Autor: Anna Knaislová
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Hong Ng. Vu, Ph.D.

Hlubokomořské konkrece jsou vzhledem ke zvyšující se poptávce a ztenčujícím se zásobám v pevninských ložiscích výhledově velmi zajímavou a perspektivní surovinou pro získání neželezných kovů, především mědi, niklu, kobaltu a manganu. Práce se zabývá vlivem ultrazvuku a mikrovln na extrakci Cu, Ni a Co z konkrecí amoniakálním loužením pomocí redukčního činidla thiosíranu amonného za různých reakčních podmínek. Na základě získaných výsledků byly stanoveny optimální podmínky pro redukční amoniakální loužení konkrecí.

Sekce : Kovové materiály I

Zpracování slitin Al-Fe metodami práškové metalurgie

Autor: Bc. Vojtěch Kučera
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Filip Průša

Hliník a především jeho slitiny nacházejí uplatnění hlavně v leteckém a automobilovém průmyslu, a to převážně díky jejich nízké hustotě, relativně vysokému poměru pevnosti ku hmotnosti a dobré korozní odolnosti. Hliník se vyrábí jak z rud, tak přetavením recyklovaného odpadního materiálu. Oba tyto zdroje obsahují jisté množství železa, které je hlavní nečistotou a je v hliníkových slitinách přítomno vždy. Rozpustnost železa v hliníku je v tuhém stavu velmi nízká a při jejím překročení dochází ke vzniku rozměrných intermetalických fází. Tyto fáze jsou velmi křehké s jehlicovitou nebo deskovitou morfologií a jejich přítomnost má významně negativní vliv na výsledné mechanické vlastnosti.

Prášková metalurgie zastoupená například rychlým tuhnutím nebo mechanickým legováním je možností jak tyto slitiny zpracovat a navíc dosáhnout vynikajících vlastností. V této práci byla připravena slitina AlFe17 rozdílnými způsoby zahrnujícími pomalé tuhnutí, mechanické obrobení, rychlé tuhnutí a mechanické legování. Následně byla u připravených práškových slitin provedena kompaktizace spékáním v plazmatu. U takto připravených vzorků byla studována mikrostruktura, chemické složení a mechanické vlastnosti.

Sekce : Kovové materiály I

Příprava vápenato-fosforečnanových vrstev na slitině hořčíku

Autor: Kateřina Mertová
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Horkavcová Diana, Ph.D.; Ing. Jiří Kubásek

V medicíně jsou velmi žádaným materiálem biodegradovatelné kovy. Jejich použití by mělo mnoho výhod např. v oblasti fixací zlomenin, kostních výztuží a náhrad. Za vhodného kandidáta pro toto aplikace jsou považovány slitiny hořčíku, které se svými vlastnostmi 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 anorganické vápenato-fosforečnanové vrstvy na slitině hořčíku, které mohou jeho počáteční degradaci efektivně zpomalit a přispět ke zvýšení biokompatibility materiálu. Hlavním procesem přípravy byla zvolena metoda využívající chemickou precipitaci z roztoku a zahrnující postupy metody sol-gel. V rámci práce se změnou podmínek procesu podařilo připravit rovnoměrné dobře přilnavé anorganické vrstvy tvořené fosforečnany. Tyto vrstvy byly však lokálně narušeny korozně napadenými oblastmi vznikajícími jako důsledek agresivity použitého solu.

Sekce : Kovové materiály I

Kompozity s hořčíkovou maticí vyztužené SiC whiskery

Autor: Darya Novikova
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jan Šerák, Ph.D.

Slitiny hořčíku se běžně používají za pokojových teplot, při teplotách nad 150 °C dochází ke zhoršení jejich mechanických vlastností. V současné době se však vyvíjí nové slitiny a kompozitní materiály na bázi hořčíku, které jsou použitelné i za zvýšených teplot, například ve spalovacích motorech, kde mohou částečně nahradit hliníkové kompozity. Relativně špatné mechanické vlastnosti hořčíku lze zlepšit pomocí legování řadou prvků anebo pomocí vyztuží ve formě vláken či částic převážně z SiC.

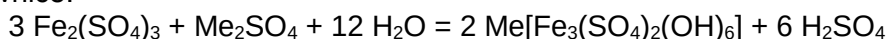
Cílem práce bylo prostudovat mikrostrukturu a mechanické vlastnosti kompozitů s hořčíkovou maticí vyztuženou SiC whiskery. U třech vzorků lišících se složením matrice byly měřeny tvrdost v závislosti na době žíhání při 250 a 300 °C, mez kluzu a mez pevnosti při laboratorní teplotě, 150 a 250 °C. Mikrostruktura vzorků byla pozorována na světelném a elektronovém mikroskopu.

Sekce : Kovové materiály I

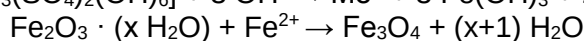
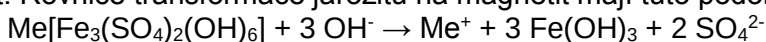
Vliv reakčních podmínek na velikost a morfologii jarožitových částic

Autor: Bc. Andrea Školáková
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Ng. Hong Vu, Ph.D.; Ing. Petr Dvořák, Ph.D.

Jarožit je žlutá, krystalická látka s obecným vzorcem $M[\text{Fe}_3(\text{SO}_4)_2(\text{OH})_6]$, kde M zastupuje kationty Na^+ , K^+ , NH_4^+ , H_3O^+ nebo Li^+ . Vzniká během jarožitého srážení, které probíhá podle následující rovnice:



Výhodou jarožitu je jeho snadná transformace na komerčně používané oxidy, mezi které patří hematit a magnetit. Rovnice transformace jarožitu na magnetit mají tuto podobu:



Tato práce se uskutečnila v rámci projektu na vývoj a aplikace kompozitních membrán na odstraňování CO_2 . Plniva v těchto membránách zvyšují selektivitu a permeaci, avšak během tuhnutí polymeru sedimentují. Cílem je tedy získat takové magnetické nanoplivo (magnetit), které pomaleji sedimentuje, a využít tak vnější magnetické pole, které by sedimentaci zabránilo. Práce se zaměřuje na zcela nový jarožitový způsob přípravy nanomagnetů, který probíhá v kyselém prostředí, a je možné připravit i ferity. Cílem práce bylo popsat vliv reakčních podmínek na velikost a morfologii jarožitových částic a provést jejich transformaci na magnetit.

Sekce : Kovové materiály II

Optimalizace výroby porézních slitin Ti-Si

Autor: Bc. Adriana Bernatíková
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Ing. Pavel Novák, Ph.D.

Porézní titanové materiály jsou v současnosti hojně využívány v oblasti implantologie a to především díky své vynikající korozní odolnosti, mechanickým vlastnostem, mechanickým vlastnostem blízcím se kosti, biokompatibilitě a dobré schopnosti osseointegrace. Jejich výhodou je, že díky porozitě mají nižší hustotu a kostní tkáň v nich snáze zakotví. Úpravou porozity lze také měnit jejich mechanické vlastnosti. Slitiny na bázi titanu a křemíku jsou nově vyvinutým materiálem pro výplně poškozených tkání (augmentace), dentální implantáty a meziobratlové ploténky. U této slitiny samovolně vzniká pórovitá struktura i bez přídavku pórotvorné látky. Cílem této práce bylo připravit práškovou metalurgii s využitím reaktivní sintrace slitiny, které by měly požadovanou pórovitost a mechanické vlastnosti. Byl testován vliv chemického složení, podmínek výroby i přídavku pórotvorného činidla (hydrogenuhličitanu amonného) na pórovitost a mechanické vlastnosti připravených materiálů. Bylo zjištěno, že jako nejperspektivnější materiály se jeví slitiny s 2-7 hm. % Si a 20 hm. % NH_4HCO_3 vyrobené s využitím izostatického lisování za studena.

Sekce : Kovové materiály II

Slitina WE43 připravená metodou práškové metalurgie

Autor: Drahomír Dvorský
Ročník: M2
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. Jednou z běžných komerčně používaných slitin je slitina WE43 obsahující 4 hm. % Y a 3 hm. % Nd, případně další prvky vzácných zemin. Velmi dobré mechanické vlastnosti této slitiny jsou běžně dosahovány v extrudovaném stavu v kombinaci s vhodným tepelným zpracováním. Tato práce je zaměřena na optimalizaci metody přípravy slitiny WE43 metodou práškové metalurgie, což by mělo vést k dalšímu zvýšení mechanických vlastností i korozní odolnosti materiálu. K přípravě finálního produktu jsou využívány mletí v planetárním kulovém mlýnu následované lisováním tablet a kompaktizací materiálu metodou SPS.

Sekce : Kovové materiály II

Moderní lehké slitiny se zvýšenou odolností za vyšších teplot

Autor: Jana Gladková
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jan Šerák, Ph.D.

V dnešní době se usiluje o snížení spotřeby paliv v automobilech. Se spotřebou paliva souvisí hmotnost vozidla, proto se při výrobě automobilů stále více používají lehké konstrukční materiály. Jako výhodný lehký materiál s dobrými mechanickými vlastnostmi se nabízí hořčíkové slitiny, které postupně nahrazují mnohem těžší oceli a hliníkové slitiny. Cílem této práce bylo zdokumentovat mikrostrukturu připravených hořčíkových slitin Mg-1Gd-1Zn-xCa-0,2Zr a Mg-1Gd-1Zn-1Li-xCa-0,2Zr, kde $x = 1, 2, 4$, které by mohly být použity na součásti vystavené vyšším teplotám. Dále byly zkoumány mechanické vlastnosti měřením tvrdosti Vickersovou metodou slitin v litém stavu a po žíhání při 250 a 300°C. Byly provedeny zkoušky jednoosým tlakem, které probíhaly při teplotách 20, 150 a 250°C.

Sekce : Kovové materiály II

Bioaktivita povrchu titanové slitiny

Autor: Jana Körberová
Ročník: B3
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Hynek Moravec

Titan a jeho slitiny jsou nejčastěji používanými materiály pro výrobu ortopedických implantátů. Vynikají dostatečnou mechanickou pevností, chemickou stálostí v tělním prostředí. S ohledem na zkrácení doby hospitalizace a následné rekonvalescence jsou intenzivně zkoumány a testovány nové způsoby, jak povrch implantátů upravit, aby se zkrátila doba primární osseointegrace.

Cílem práce bylo v první fázi vytvořit nanostrukturu na slitině Ti6Al4V a poté elektrochemickým způsobem upravit její chemické složení povrchu. Katodická polarizace vzorků probíhala v roztoku $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$ a KH_2PO_4 různých koncentrací. Povrchově citlivou metodou (XPS) byla detekována přítomnost vápenatých a fosforečnanových iontů na úrovni jednotek atomárních procent. Efektivita modifikací bude následně hodnocena interakcí se simulovanou tělní tekutinou. Očekáváno je zkrácení indukční periody vzniku apatitu na povrchu vzorku.

Sekce : Kovové materiály II

Struktura a vlastnosti kompozitních materiálů NiTi-Ti₂Ni

Autor: Bc. Eva Kristianová
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Ing. Pavel Novák, Ph.D.

Paměťová slitina NiTi je materiál využívaný především v medicíně, své uplatnění však nachází i v mnoha průmyslových aplikacích. Jeho vlastnosti jsou ve značné míře určovány strukturou a fázovým složením. Ukázalo se, že při výrobě metodou práškové metalurgie se ve struktuře vedle požadované fáze NiTi objevuje také určité množství fáze Ti₂Ni, která ovlivňuje mechanické vlastnosti slitiny a mohla by případně rozšířit využitelnost materiálu do nových odvětví.

Cílem práce je vytvořit kompozitní materiál NiTi-Ti₂Ni použitím vhodné metody přípravy umožňující korigovat množství vznikající fáze Ti₂Ni a s tím také jeho mechanické vlastnosti.

Sekce : Kovové materiály II

Vliv legujících prvků na mechanické vlastnosti slitin kobaltu

Autor: Bc. Kateřina Nová
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Ing. Pavel Novák, Ph.D.

Tato práce je zaměřena na studium vlivu legujících prvků na mechanické a tribologické vlastnosti kobaltových slitin. Slitiny Co-Cr-Mo se úspěšně používají pro výrobu ortopedických implantátů, především kvůli lepší odolnosti proti opotřebení, než nabízejí implantáty titanové. Avšak ani odolnost kobaltových slitin není dostatečná. Cílem práce je najít vhodný legující prvek, který by zvýšil odolnost proti opotřebení a zároveň nezhoršil, případně i zlepšil další charakteristiky materiálu. Při výběru nesmíme zapomenout ani na netoxicitu daného prvku pro lidský organismus.

Mechanickým legováním a následnou kompaktizací metodou „Spark Plasma Sintering“ byly připraveny slitiny Co-Nb s různým obsahem niobu (0, 1, 2, 5, 10 at %). U takto připravených slitin byla pozorována mikrostruktura a vliv obsahu niobu na některé mechanické vlastnosti – tvrdost, pevnost. Po kladném zhodnocení vlivu niobu na dané charakteristiky, byl tento prvek přidán do slitiny Co-Cr-Mo-C v množství 5 hm %. Vzorek byl připraven identickým způsobem a byly měřeny mechanické vlastnosti.

Sekce : Kovové materiály II

Vlastnosti biodegradovatelných slitin železa

Autor: Květa Stehlíková
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: prof. Dr. Ing. Dalibor Vojtěch

V poslední době jsou materiály na bázi železa zkoumány jako potenciální kandidáti pro výrobu biodegradabilních implantátů. Čisté železo však nemá pro toto využití vhodné vlastnosti, a proto je nutné jej legovat vhodnými příměsemi.

V této práci byly připraveny slitiny Fe30Mn, Fe2C, Fe2Ag a Fe2Pd práškovou metalurgií. Byla studována mikrostruktura, mechanické a korozní vlastnosti těchto slitin. Pro porovnání vlastností byl stejným způsobem připraven vzorek čistého železa.

Zjistili jsme, že nejlepší vlastnosti vykazuje slitina Fe2Pd. Naopak slitiny železa s manganem ukázaly nevhodné chování.

Sekce : Kovové materiály II

Vysoko-entropické slitiny

Autor: Alexandra Šenková
Ročník: B1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Filip Průša

Tato nová skupina kovových materiálů si v současné době získává stále více pozornosti, neboť reprezentuje netradiční přístup k přípravě slitin specifického chemického složení s vynikajícími vlastnostmi. U těchto slitin bývá dosahováno vynikající pevnosti a tvrdosti při současném zachování plasticity, odolnosti proti vysokoteplotnímu tečení, korozní odolnosti a dalších. Vysoko-entropické slitiny tedy mohou předurčovat budoucí směr, kterým se může výzkum a vývoj nových materiálů ubírat.

Na rozdíl od konvenčního způsobu přípravy kovových materiálů se postup, který je uplatňován u vysoko-entropických slitin již od počátku výrazně liší. Tyto slitiny jsou tvořeny nejméně pěti hlavními prvky o přibližně ekvatomárním zastoupení. Systémy o takovém složení spojuje maximální hodnota směšovací entropie, v jejímž důsledku je spíše než vznik intermetalických fází podporován vznik tuhých roztoků.

V rámci práce byla připravena slitina CoCrNiFeMn ekvatomárního složení metodou klasické tavné metalurgie a dále kombinací mechanického legování a kompaktizace spékáním v plazmatu. U připravených slitin byla pozorována mikrostruktura a dále byly vyhodnoceny mechanické vlastnosti reprezentované měřením tvrdosti a tlakovými zkouškami.

Sekce : Kovové materiály II

Vliv velikosti částic prášků na průběh reaktivní sintrace v systému Ni-Ti

Autor: Bc. Tomáš Veselý
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Ing. Pavel Novák, Ph.D.

Při výrobě slitiny Ni-Ti metodou klasického odlévání dochází k řadě technologických problémů. Jako alternativa klasického odlévání se jeví použití reaktivní sintrace. Tento proces je velmi jednoduchý, ale kromě fáze NiTi při něm vznikají i další nežádoucí fáze, nejčastěji Ti₂Ni.

V této práci byl zjišťován vliv velikosti částic niklu a titanu na průběh reaktivní sintrace prováděné při 900 °C. Byla provedena mikrostrukturní analýza a termická analýza (DTA) a zjišťována vhodná kombinace velikostí prášků titanu a niklu, která povede k dosažení nejvyššího množství NiTi fáze.

Výsledky naznačují, že větší vliv na mikrostrukturu má velikost částic titanu. Dále bylo zjištěno, že použitím hrubých částic niklu a titanu (200-800 µm) a nanočástic niklu reakce nenastane. Jako nejvhodnější kombinace se jeví titan o velikosti částic menších než 25 µm a nikl o velikosti částic 25 – 45 µm.

Sekce : Kovové materiály II

Mechanismus a kinetika vzniku fází Ni-Ti při reaktivní sintraci

Autor: Bc. Vladimír Vojtěch
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Ing. Pavel Novák, Ph.D.; Mgr. Zuzana Pecenová

Předmětem práce byl popis mechanismu a kinetiky vzniku intermetalických fází v systému Ni-Ti při výrobě reaktivní sintrací kovových prášků. Práce navazuje na předchozí experiment, který se zabýval vznikem fází při teplotách 500 - 650 °C. Tato fáze výzkumu se týká teplot 800 - 900 °C. Vzhledem k tomu, že je obtížné popsat procesy při reaktivní sintraci na reálných vzorcích tvořených jemnými prášky, byl experiment prováděn na modelových vzorcích tvořených titanovými vzorky povlakovanými niklem. Bylo studováno fázové složení a tloušťka vznikajících vrstev fází Ni-Ti v závislosti na době a teplotě procesu. Rovněž byl studován vliv rychlosti ohřevu. Na základě fázového složení a mikrostruktury vrstev byl popsán mechanismus reakce, zatímco časová a teplotní závislost tloušťky vrstvy byla využita k experimentálnímu vyhodnocení kinetiky procesu.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Testy cytotoxicity titaničitých sol-gel povlaků s obsahem stříbra na porézních slitinách titanu s křemíkem

Autor: Martin Černý
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Diana Horkavcová, Ph.D.

Využití slitin titanu pro výrobu zdravotnických prostředků je hlavně v bohatších částech světa téměř běžné. Ať už po úrazu způsobeného sportem nebo vlivem stárnutí, je třeba často nahradit u pacienta část tkání implantátem. Titan není volen jen z důvodu podobných mechanických vlastností jako jím nejčastěji nahrazovaná tkáň – kost, ale také z důvodu biokompatibility a snášenlivosti v těle pacienta. V případě, že by byla zvolena struktura implantátu porézní, bylo by možné, aby následně buňky vrůstaly do implantátu a zajistily tak jeho lepší fixaci v tkáni. V případě operace se může i přes veškerou snahu stát, že se do těla pacienta na povrchu implantátu vnese infekce. Ta může následně způsobit pooperační komplikace, které mohou vést až k reoperaci. Z tohoto důvodu je vhodné povrch implantátu upravit například tvorbou funkčního povlaku. V našem případě se jednalo o titaničitý sol-gel povlak s obsahem stříbra jako nosiče antibakteriální vlastnosti. Konkrétně se jednalo o stříbro ve formě Ag_3PO_4 a AgNO_3 . Povlakovaným materiálem byla zvolena porézní slitina TiSi10 a TiSi5. Vypálené titaničité povlaky byly následně sterilizovány a podrobeny 24 hodinovému testu cytotoxicity vůči buňkám L929 (myší fibroblasty) a U-2 OS (lidský osteosarkom). Tento experiment měl za cíl zjistit, jaký účinek bude mít materiál opatřen povlakem obsahující částice stříbra na viabilitu buněk.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Optimalizace složení skel s důrazem na zdravotní nezávadnost

Autor: Lenka Dillingerová
Ročník: M1
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Miroslav Rada, CSc.

Cílem této práce bylo navrhnout nová složení skel, která by měla zvýšený měrný elektrický odpor a neobsahovala by toxické látky, hlavně olovo, arzen, kadmium a baryum, a vlastnostmi se co nejvíce podobala olovnatým křišťálům. Složení jednotlivých skel byla volena tak, aby byl vyšetřen vliv přítomnosti a naopak nepřítomnosti oxidů zinku, vápníku, stroncia, hliníku, lanthanu a lithia při současném měnění obsahu ostatních oxidů (kromě oxidů antimonu, fosforu a gadolinia) na zkoumané parametry skel – především na měrné elektrické odpory, teploty liquidus, teploty maximálních krystalizačních rychlostí, teploty tavení, teplotní roztažnosti a hydrolytické odolnosti.

Složení skla č.5 v hmot.% – 58,45 SiO₂; 10,44 Σ(K₂O+Na₂O+Li₂O); 11,40 Σ(ZnO+CaO); 11,00 Σ(B₂O₃+Al₂O₃+Sb₂O₃+Gd₂O₃); 8,01 Σ(TiO₂+ZrO₂); 0,70 P₂O₅ – nejlépe splňovalo vytyčené požadavky.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Testování antibakteriálního účinku titaničitých sol-gel povlaků s různou formou stříbra vůči *Escherichia coli* a *Staphylococcus epidermidis*

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

Kovy se stávají podstatnou součástí biomedicínských aplikací hlavně v případě implantace do zátěžových míst. Ve většině případů se využívá antikorozi ocel a biokompatibilní titan a jeho slitiny. Pro tuto práci byl vybrán titan a jeho slitina s křemíkem (Ti, TiSi₅, TiSi₁₀), protože právě křemík je netoxický pro lidský organismus. Někdy však může dojít k zánětlivé reakci způsobené nedostatečnou sterilitou. Způsob vyřešení tohoto problému je pokrýt implantát antibakteriálním povlakem. Tento povlak se může nanášet metodou sol-gel. Je několik technik nanášení povlaku na materiál. Pro tuto práci byla použita technika dip-coating, během níž dochází k postupnému ponořování substrátů do solu, tvorbě vazeb mezi substrátem a molekulami solu a vytahování substrátů. Potažené substráty byly vypáleny při 400°C po dobu 2 hodin. Jako prvek, který má antibakteriální vlastnosti, bylo použito stříbro. Stříbro bylo přidáno do základního titaničitého solu ve formě AgNO₃ a Ag₃PO₄. Antibakteriální aktivita byla pozorována na grampozitivní bakterii *Staphylococcus epidermidis* a gramnegativní *Escherichia coli*. Substráty s titaničtým (referenčním) povlakem bez obsahu stříbra neměly žádnou antibakteriální vlastnost. Zatímco povlaky s přidaným stříbrem ve formě Ag₃PO₄ a rozpuštěného AgNO₃ potvrdily antibakteriální vlastnost připravených povlaků.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Vlastnosti nových typů biorozpustných vláken

Autor: Eva Kohoutová
Ročník: M1
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Jan Macháček, Ph.D.

Byly sledovány fyzikální vlastnosti čtyř vysokoteplotních izolačních rohoží uvedených na trh v nedávné době. Rohože jsou vyráběny z biorozpustných vláken, zdravotně nezávadných pro lidský organismus. Mimo tyto čtyři rohože, byly dále sledovány vlastnosti žárovzdorné rohože s vysokým obsahem oxidu zirkoničitého, který zajišťuje vysokou teplotu použití. Rohože byly tepelně exponovány při teplotách jejich plánovaného použití a bylo zjištěno, že vlákna zkrystalizovala a produkty krystalizace představují potenciální zdravotní riziko.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Efektivní elastické a tepelné vlastnosti parciálně slinuté spinelové keramiky

Autor: Vojtěch Nečina
Ročník: B3
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: doc. Dr. Willi Pabst

Parciálně slinuté materiály se vyznačují tím, že mají konkávní póry mezi konvexními částicemi. Na rozdíl od materiálů s konvexními póry lze proto očekávat nižší Youngův modul a nižší tepelná vodivost. Cílem práce je hlubší prozkoumání této skutečnosti na příkladu porézní spinelové keramiky. Uniaxiálním lisováním (50–100 MPa) byly ze spinelového prášku s příměsí PEG připraveny vzorky ve tvaru trámečků a tablet. Parciální slinování bylo provedeno výpalem na různé teploty (1350–1600 °C). Objemová hmotnost byla naměřena Archimedovou metodou, skutečná pórovitost byla pak vypočtena na základě znalosti teoretické hustoty spinelu. Youngův modul byl naměřen metodou impulzní excitací, tepelná vodivost byla vypočtena na základě teplotní vodivosti naměřené metodou laser-flash a znalosti specifického tepla. Pórovitost se pohybuje v rozsahu 5–38 %. Srovnání s mikromechanickými mezi a teoretickými modely pro konvexní póry potvrzuje, že hodnoty této parciálně slinuté keramiky jsou skutečně výrazně nižší než Hashin-Shtrikmanova horní mez, mocninová a exponenciální předpověď. Jako alternativa je navržen jednoduchý empirický způsob hrubého odhadu závislosti vlastností na pórovitosti. Navíc je ukázáno, že tzv. křížový vztah umožňuje velmi přesnou předpověď jedné vlastnosti, pokud druhá je známa. Numerické modelování je používáno k potvrzení těchto výsledků.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Testování stability modifikované simulované tělní tekutiny

Autor: Adam Stříbný
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Diana Horkavcová, Ph.D.

Jedním ze způsobů testování bioaktivního chování biomateriálů je test *in vitro* v simulované tělní tekutině, která má iontové koncentrace velmi blízké anorganické částí krevní plazmy. Je tak možné získat prvotní pohled na pravděpodobné chování materiálu v organismu. V některých pracích však bylo ukázáno, že test tak, jak je běžně prováděn, neposkytuje správné výsledky. Bylo zjištěno, že přítomnost pufru TRIS v tekutině výrazně ovlivňuje chování sklokeramického materiálu v tekutině. V naší práci testujeme možné náhrady pufru TRIS. Byly vybrány další dva pufrы z řady tzv. Goodových pufrů – MOPS a TES. Úspěšně jsme otestovali stabilitu modifikovaných simulovaných tělních tekutin s různou koncentrací pufrů. Dále je v plánu provést interakci modifikované tekutiny se sklokeramickým materiálem 45S5 Bioglass® ve formě *scaffoldu* za staticko-dynamických podmínek. Každých 24 hodin budou pomocí AAS a UV-VIS analyzovány výluhy roztoků za účelem popsání iontové výměny mezi materiálem a okolím. Metodami BET, XRD a SEM-EDS budou vyhodnoceny děje proběhnuvší uvnitř i na povrchu materiálu.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Laserová skla dopovaná Ho_2O_3 a Yb_2O_3 pro fotoniku

Autor: Marta Balíková
Ročník: B3
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: doc. Dr. Ing. Martin Míka

Křemičitá skla dopovaná Ho_2O_3 představují velmi slibné materiály pro konstrukci laserů, které emitují záření o vlnové délce kolem 2 μm . Světlo o této vlnové má výhodu v tom, že nepoškozuje lidské oko. Proto je toto záření velmi slibné pro konstrukci bezpečné volnosvazkové optiky.

Pro vývoj uvedených laserů byla připravena sodnohliníto-boritokřemičitá skla dopovaná Ho_2O_3 a Yb_2O_3 . Skla byla připravena ze směsi příslušných uhličitánů a oxidů. Aby se dosáhlo vysoké homogenity, byla tato směs důkladně míchána po dobu 10 min v třecí misce. Následně byla směs tavena v PtRh kelímku po dobu 2 hodin v superkanthalové elektrické peci při teplotě 1480°C. Homogenní tavenina byla získána mechanickým mícháním skloviny, které se provedlo celkem pětkrát vždy po 15 minutách. Následně se sklovina odlila do nerezové formy a byl vytvořen vzorek skla ve tvaru kvádru. Získané sklo bylo pomalu ochlazováno na laboratorní teplotu, aby nedošlo k popraskání vzorku. U připravených vzorků skel byla porovnána jejich absorpční a emisní spektra získaná měřením na vláknovém spektrometru Ocean Optics.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Laserová skla dopovaná Eu a Ho pro fotodynamickou terapii

Autor: Daria Cecico
Ročník: B3
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: doc. Dr. Ing. Martin Míka

Ve své práci se zabývám přípravou laserově aktivních skel pro fotodynamickou terapii. Připravená skla převádějí světlo modré LED na delší vlnové délky, a tak světlo může pronikat přes kůži do větších hloubek nádorových tkání v lidském organismu. V těchto nádorových buňkách jsou umístěny fotocitlivé látky, pomocí kterých se v nich generuje vysoce reaktivní singletový kyslík. Tento kyslík mění dvojné vazby bílkovin rakovinných buněk na jednoduché a tím ničí i samotný nádory.

V této práci jsem připravila laserově aktivní sodnozinečnatohlinitokřemičitá skla dopovaná atomy Eu, Ho. Pro přípravu skel byly navázeny příslušné uhličitany a oxidy a směs surovin byla homogenizována třecí misce po dobu 10 minut. Tato směs byla vložena do PtRh kelímku a následně tavena v elektrické superkanthalové peci při teplotě 1500°C po dobu 30 min.. Poté byla směs vždy po 15 min pětkrát míchána. Následně bylo sklo odlito do kovové formy a pomalu zchlazeno.

U připravených skel byla na vláknovém spektrometru Ocean Optics proměřena jejich absorpční a emisní spektra.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Laserová skla dopovaná Eu_2O_3 a TeO_2 pro fotoniku

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

Křemičitá skla dopovaná lanthanoidy představují velmi slibné materiály pro konstrukci laserů, optických zesilovačů nebo vysoce efektivních LED zdrojů. Pro tento účel byla připravena sodnozinečnatohlinitokřemičitá laserová skla dopovaná Eu_2O_3 a TeO_2 . Tato skla byla připravována z příslušných uhličitánů a oxidů. Pro dosažení vysoké homogenity byla jejich směs důkladně míchána 10 min v třecí misce a následně tavena v PtRh kelímku v elektrické superkanthalové peci při teplotě 1480°C. Pro získání homogenní skloviny, byla tavenina celkem pětkrát míchána vždy po 15 minutách. 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 popraskání vzorku. U připravených skel byla naměřena jejich absorpční a emisní spektra na vláknovém spektrometru Ocean Optics.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Laserová skla dopovaná Eu a Bi pro fotodynamickou terapii

Autor: Simona Chrenová
Ročník: B3
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: doc. Dr. Ing. Martin Míka

Fotodynamická terapie (PDT) je metoda využívaná při diagnostice i léčbě tumorů. PDT je kombinací tří složek: světla, fotosenzitivní látky a kyslíku. Fotosenzitivní látka se po aplikaci hromadí v nádorových buňkách a po ozáření světlem určité vlnové délky ničí nádorové buňky. Rakovinotvorné buňky jsou ničeny pomocí singletového kyslíku, což je reaktivní forma kyslíku, která vzniká přímo v tumoru a způsobuje oxidativní destrukci. Výhodami PDT je neinvazivnost a nulová toxicita na rozdíl od chemoterapie. Nevýhodou je omezenost použití, tedy malá penetrační hloubka.

Sodnozinečnatohlinitokřemičitá laserová skla dopovaná Eu a Bi byla připravena z příslušných uhličitánů a oxidů. Tato směs byla důkladně homogenizována 10 minutovým třením v třecí misce a následně tavena v PtRh kelímku v elektrické superkanthalové peci při teplotě 1480°C. Po vyčerení byla sklovina pětkrát míchána vždy po 15 minutách. Po homogenizaci byla sklovina odlita do kovové formy kvádového tvaru a následně pomalu ochlazena, aby nedošlo k popraskání vzorku. U připravených skel byla na vláknovém spektrometru Ocean Optics proměřena jejich absorpční a emisní spektra.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Materiály pro fotodynamickou terapii

Autor: Bc. Aleš Mareška
Ročník: M1
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: doc. Dr. Ing. Martin Míka

Fotodynamická terapie je nová perspektivní metoda určená pro ničení nejen nádorů, ale i zánětů, sterilizaci nanočástic aj. Princip fotodynamické terapie spočívá v excitaci fotosenzitivní látky definovaným zářením o v hodné intenzitě a o vhodné vlnové délce. Po excitaci dané fotosenzitivní látky dojde k přenosu excitované energie na kyslík, z něhož se na základě absorpce této energie generují nejrůznější formy kyslíku, mj. reaktivní singletový kyslík, který je zodpovědný za ničení nádorových buněk procesem nekrózy nebo apoptózy. Proces fotodynamické terapie se dá rozdělit na několik částí, kde každá z nich je velice důležitá. V rámci našeho výzkumu se věnujeme zdrojům fotodynamické terapie, přičemž se nám jako zdroj nejvíce osvědčil laser, jehož vlnovou délku měníme pomocí skelných luminoforů. LED zdroj oproti laserům není tak intenzivní a není fokusován, což má za následek to, že nepronikne tak hluboko do postižené tkáně. Dále se věnujeme výběru fotosenzitivních látek, které pomocí námi připravených zdrojů vzbuzujeme. Jako velice důležitá část fotodynamické terapie, možná ta nejdůležitější vůbec, se dnes ukazuje selektivita. Selektivita ve smyslu schopnosti dopravit námi podanou látku do místa postižení v co největší koncentraci. Z toho důvodu se v dnešní době fotosenzitizéry podávají v rámci složitých struktur jakou je například mezoporézní oxid křemičitý.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Kinetika interakcie fosforečnanov vápenatých s telovými tekutinami

Autor: Bc. Zuzana Styková
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: prof. Ing. Aleš Helebrant CSc.

Cieľom práce bolo vytvorenie modelov interakcie fosforečnanov vápenatých, využívaných v dentálnej medicíne a ortopédii, so simulovanou telovou tekutinou (SBF). Časová závislosť koncentrácie vápenatých a fosforečnanových iónov v roztoku bola vyjadrená na základe ich hmotnostnej bilancie rovnicou:

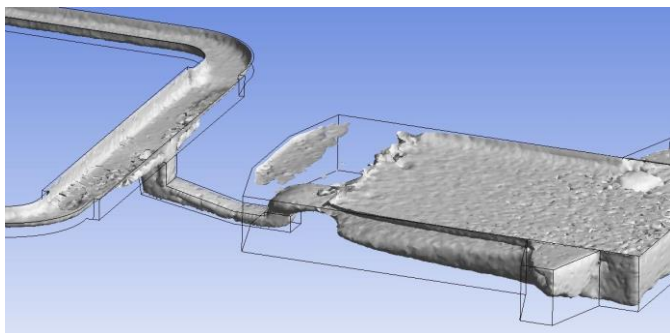
$$c = A \exp(-Kt) + c_{\infty} = (c_0 - c_{\infty}) \exp(-Kt) + c_{\infty}.$$

Hodnoty konštanty K a ustálenej koncentrácie c_{∞} sú funkciami nasýtených koncentrácií sledovaných zložiek, rýchlostných konštant precipitácie a rozpúšťania, rýchlosti prietoku a objemu SBF a povrchu materiálu v kontakte SBF. Model bol overený porovnaním s dátami získanými z literatúry, popisujúcimi chovanie komerčných biomateriálov na báze hydroxyapatitu a fosforečnanu vápenatého v SBF. Na rozdiel od predchádzajúcich modelov nebolo nutné uvažovať len zrážanie hydroxyapatitu. Model uspokojivo popisuje situácie, pri ktorých dochádza k nárastu alebo poklesu sledovaných zložiek v roztoku ako dôsledok rôznych rýchlostí precipitácie a rozpúšťania.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Využití matematického modelování k odstranění vad ve skle

Autor: Jan Viduna
Ročník: M2
Ústav: Skla a Keramiky
Školitel: doc. Ing. Stanislav Kasa, CSc.



Tato práce je zaměřená na odstranění vady ve skle při výrobě obalového skla. Jedná se konkrétně o oxidační šlíru na redukční sklovině Ambler, která pravděpodobně vzniká v důsledku přebarvování vany. Studie zahrnuje identifikaci možné příčiny, vytvoření matematického modelu tavící vany, pracovní části a feederů odpovídající konkrétní reálné peci. Součástí práce je také nalezení mrtvých prostorů, návržení

vhodného řešení a samotná realizace projektu. K vytvoření autentického modelu bylo nutné získat většinu dat reálným měřením na dané peci, např. aktuální informace o sklovině, tepelný profil skloviny na hladině bazénu a kanálech, výpočet tepelných ztrát stěnami a dnem pece. Po vytvoření modelu a vypočítání parametrů bylo provedeno vyhodnocení pomocí vizuálních projekcí proudění a rozložení teplot v peci, energetické bilance, tavící výkonnosti a dalších vlastností pece.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Rentgenová strukturní analýza solí acetylsalicylové kyseliny

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

Kyselina acetylsalicylová patří mezi nejvíce využívaná léčiva dnešní doby. Používá se již přes 110 let. V nedávné době se objevilo použití k léčbě akutního infarktu myokardu, nestabilní anginy pectoris a jako prevence kardiovaskulárních onemocnění. Perspektivní je aplikace aspirinu jako prevence proti karcinomu tlustého střeva, jícnu a žaludku a při léčbě stařecké demence. Nevýhodou, umocňující vedlejší účinky acetylsalicylové kyseliny, je špatná rozpustnost ve vodě. Tu lze zvýšit použitím jednoduchých solí této kyseliny.

Jsou známy dvě formy sodné soli acetylsalicylové kyseliny – nestabilní dihydrát a stabilní anhydrát. U těchto forem dosud nebyla vyřešena struktura ani nejsou popsány práškovým difraktogramem. Přípravy solí popsané v literatuře jsou obtížně reprodukovatelné. Byl proveden screening přípravy solí s drobnými úpravami cílenými na reprodukovatelnou přípravu. Byla úspěšná příprava dihydrátu, který se podařilo dehydratovat za vzniku práškového vzorku, pravděpodobně anhydrátu acetylsalicylátu sodného. Dále se podařilo objevit novou formu soli – monohydrát acetylsalicylátu sodného a vyřešit její strukturu.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Příprava luminiscenčních měďných klastrů a jejich zabudování do polymerní matrice

Autor: Bc. Veronika Kadlecová
Ročník: M2
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: prof. Ing. František Kovanda, CSc.

Práce se zabývá přípravou tetranukleárních měďných klastrů $\text{Cu}_4\text{I}_4\text{L}_4$ s různými ligandy L, konkrétně pyridinem (Py), 4-vinylpyridinem (vinyl-Py), trifenyfosfinem (PPh_3) a 4-(difenyfosfino)styrenem (vinyl- PPh_3), které po zabudování do polymerní matrice mohou být využity pro detekci vysokoenergetického záření. Klastry byly připraveny reakcí uvedených látek s roztokem jodidu měďného v chloroformu. Připravené produkty byly charakterizovány ^1H NMR spektrometrií a UV-VIS absorpční spektroskopií. Klastry $\text{Cu}_4\text{I}_4(\text{Py})_4$ a $\text{Cu}_4\text{I}_4(\text{PPh}_3)_4$ vykazovaly luminiscenci pod ultrafialovým a rentgenovým zářením. Jako matrice pro zabudování klastrů byl zvolen polystyren. Klastry $\text{Cu}_4\text{I}_4(\text{Py})_4$ a $\text{Cu}_4\text{I}_4(\text{PPh}_3)_4$ byly dispergovány v roztoku polystyrenu v chloroformu a po depozici na sklo byly připraveny vrstvy polymeru. Tyto vrstvy vykazovaly luminiscenci pod UV zářením, ale zároveň byla pozorována značně nehomogenní distribuce klastrů v polymeru v důsledku jejich aglomerace. Ověřena byla také polymerace styrenu s rozpuštěným klastrem $\text{Cu}_4\text{I}_4(\text{vinyl-PPh}_3)_4$, ostatní klastry nebyly ve styrenu rozpustné.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Vývoj aproximační metody obrazové analýzy pro měření distribuce velikosti částic ve farmacii

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

Velikost částic je důležitý parametr farmaceuticky aktivních substancí (API), jelikož významně ovlivňuje výrobu a chování pevné lékové formy. Obrazová analýza je jednou ze dvou nejpoužívanějších metod stanovení distribuce velikosti částic účinných látek, kterou je možné rozdělit do několika kroků: pořízení mikroskopického snímku, označení jednotlivých částic na snímku, získání délkových parametrů částic a výpočet histogramu objemové distribuce velikosti částic pomocí aproximací na ekvivalentní koule. Právě způsob aproximace bývá nejčastěji označován jako slabý článek popisované metody, a proto bude prezentován nově vyvinutý způsob aproximace, který využívá vhodných délkových parametrů a poměrových ukazatelů pro identifikace skutečného tvaru částic, čímž výrazně přesněji vypočítává objemovou distribuci velikosti částic. Nad rámec cílů této původně bakalářské práce došlo k implementování dalších tvarových identifikátorů, které nyní rozpoznávají všechny nejběžnější se vyskytující tvary částic ve farmacii, a tím poskytují přesnější výsledky objemové distribuce velikosti částic.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Příprava kokrystalů metodou společného zahřívání

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

Kokrystaly jsou stechiometrické multikomponentní pevné fáze, které jsou známy již mnoho let, přesto až v současné době nabývají na významu. V případě, že jednou z komponent kokrystalu je aktivní farmaceutická substance (API), hovoříme o tzv. farmaceutických kokrystalech, které jsou v poslední době zkoumány především pro možnost úpravy fyzikálně-chemických vlastností pevné formy API.

Doposud se však nedaří předpovídat, jaké látky a za jakých podmínek spolu vytvoří kokrystal. Proto jsou zkoumané aktivní substance podrobeny důkladnému kokrystalizačnímu screeningu s mnoha kokrystalizačními partnery. Během něj se využívají metody přípravy kokrystalů za přítomnosti rozpouštědla (pomalá krystalizace z rozpouštědla, krystalizace ze suspenze, sprejové sušení ad.) nebo naopak bez přítomnosti rozpouštědla (společné mletí, společné tavení).

Tato práce se zabývá další potenciální metodou přípravy kokrystalů. Jde o metodu společného zahřívání, při které se nepoužívá rozpouštědlo. Ta by mohla mít oproti společnému mletí či tavení určité výhody. Metoda byla prozatím testována na modelových systémech kokrystalů kofeinu, tropium chloridu a theofylinu.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Modifikace složení samo-emulgujících systémů

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

Samo-emulgující systémy (SEDDS – *Self-emulsifying Drug Delivery Systems*) jsou směsí účinné látky, olejů, surfaktantů, kosurfaktantů a rozpouštědel. Takto tvořená lipofilní léková forma se při perorálním podání v gastrointestinálním traktu samovolně emulguje díky střevní šťávě. Spontánně se tedy vytvoří emulze „olej ve vodě“ a účinná látka se dostává na místo absorpce již v rozpuštěné podobě. Malá velikost vytvořených kapiček poskytuje větší mezifázový povrch pro usnadnění absorpce.

Při ředění SEDDS vodou nebo šťávami GIT se často stává, že se účinná látka zpětně vysráží z emulze. Tomuto jevu lze zabránit vhodným kvalitativním a kvantitativním výběrem excipientů ve formulaci.

Cílem práce je nalezení těchto excipientů i jejich poměrů pro maximální zvýšení rozpustnosti účinné látky candesartanu cilexetilu.

Experimentální množství excipientů bylo vybráno na základě pseudo-ternárních fázových diagramů. Následně byly formulovány vzorky SEDDS, jejichž efektivita byla analyzována porovnáním disolučních profilů candesartanu cilexetilu. Rozpustnost této účinné látky byla zvýšena o 40 až 60% v porovnání s modelovou tabletou léčivého přípravku.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Predikce ternárních fázových diagramů farmaceutických kokrystalů trospium chloridu

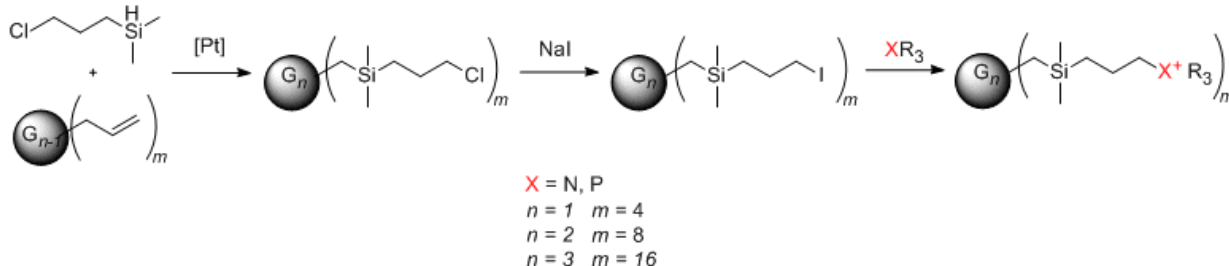
Autor: Bc. Tereza Skalická
Ročník: M1
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc.

Cílem práce bylo zkonstruovat ternární fázové diagramy farmaceutických kokrystalů trospium chloridu (TCI). Přínosem ternárních fázových diagramů je jejich využití k plánování robustní výroby kokrystalu. Sestavení diagramu na základě podrobné analýzy vzorků, kdy se analyzuje jak pevná, tak kapalná fáze, je obtížná a časově náročná. V literatuře je však popsán způsob predikce diagramů na základě naměřených rozpustností vstupních komponent. Tento způsob konstrukce diagramů byl použit i v této práci. Ke konstrukci diagramů byly použity kokrystalové TCI – kyselina salicylová a TCI – kyselina šťávelová, které byly připraveny mletím s přikapáváním rozpouštědla. Rozpustnosti kokrystalů a vstupních komponent byly stanoveny pomocí UV-VIS spektrofotometru. Tato metoda spočívala v měření absorbance kalibračních roztoků a dopočtení koncentrace nasyceného roztoku. Druhým způsobem stanovení rozpustnosti byla gravimetrie. Kromě experimentálního stanovení rozpustnosti byly některé údaje o rozpustnosti převzaty z databází či literatury. Rozpustnosti byly stanoveny v *n*-propanolu a *n*-butanolu, neboť v těchto rozpouštědlech nedochází ke vzniku solvátů, které konstrukci diagramů značně komplikují. Podařilo se zkonstruovat ternární fázové diagramy obou kokrystalů TCI, k jejich vizualizaci byl použit software ProSim Ternary Diagram.

Syntéza kationtových karbosilanových dendrimerů pro biomedicínské aplikace

Autor: Monika Müllerová
 Ročník: M2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Karbosilanové dendrimery jsou trojrozměrné, větvené makromolekuly s přesně definovanou strukturou a molární hmotností. Jejich jedinečné vlastnosti jsou mimo jiné intenzivně studovány pro řadu biomedicínských aplikací. Flexibilní skelet složený z uhlovodíkových řetězců, které se větví na atomech křemíku, je značně hydrofobní, díky čemuž je schopen vázat nepolární látky (např. léčiva). Periferie makromolekuly může být po modifikaci vhodnými funkčními skupinami polární, a tudíž schopná interakce s řadou biologických struktur. V této práci byla připravena série karbosilanových dendrimerů první až třetí generace, na jejichž periferní řetězce byly navázány deriváty fosfoniových a amoniových solí. Jejich biochemické vlastnosti, především toxicita a schopnost interakce s biomolekulami (DNA, RNA) a buněčnými strukturami, jsou zkoumány ve spolupráci s katedrou biologie UJEP v Ústí nad Labem.



Sekce : Organická chemie M1

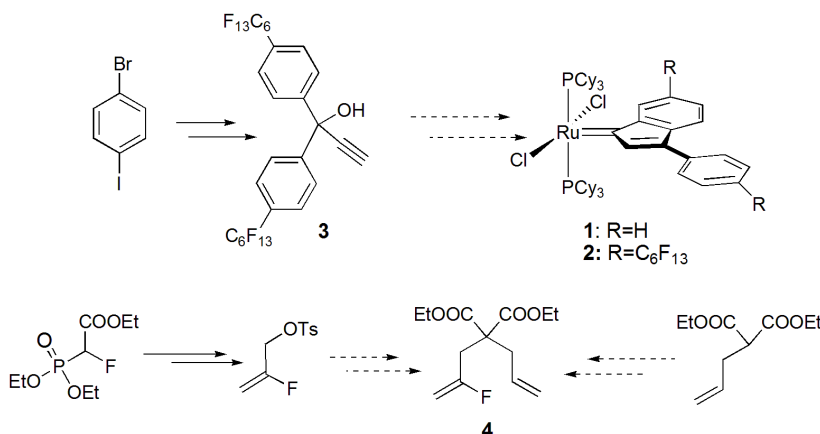
Syntéza intermediátů pro fluorované Ru komplexy

Autor: Kateřina Kučňírová
 Ročník: M1
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Rutheniový indenylidenový komplex **1** je robustní, komerčně dostupný katalyzátor pro metateze alkenů s vysokou stabilitou, ale pomalou iniciační fází. Modifikací perfluoralkylovými řetězci by mělo vlivem elektronakceptorních skupin dojít k urychlení iniciační fáze a umožnění recyklace katalyzátoru **2** z reakční směsi fluorovými separačními metodami. Prvním cílem mé práce byla

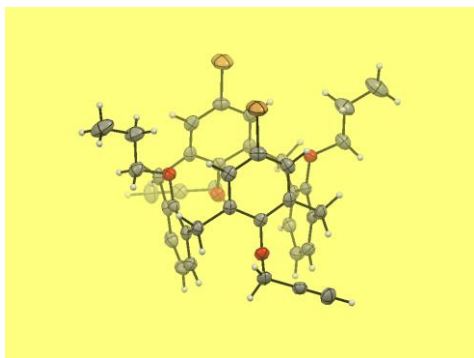
proto syntéza intermediátů pro fluorový indenylidenový ligand. Úspěšně se mi podařilo dvěma cestami připravit perfluoralkylovaný intermediát **3**. Jeho transformace na indenylidenový komplex **2** je rozpracována.

Cílem druhé části práce je nalezení nejvýhodnější syntézy fluorovaného dienu **4** pro následné studium jeho reaktivity při metatezi s uzavřením cyklu (RCM).



Zavádění terminálních alkynů do skeletu calix[4]arenu jako příprava stavebních bloků pro následné reakce

Autor: Tomáš Klejch
Ročník: M2
Ústav: Organické chemie
Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.



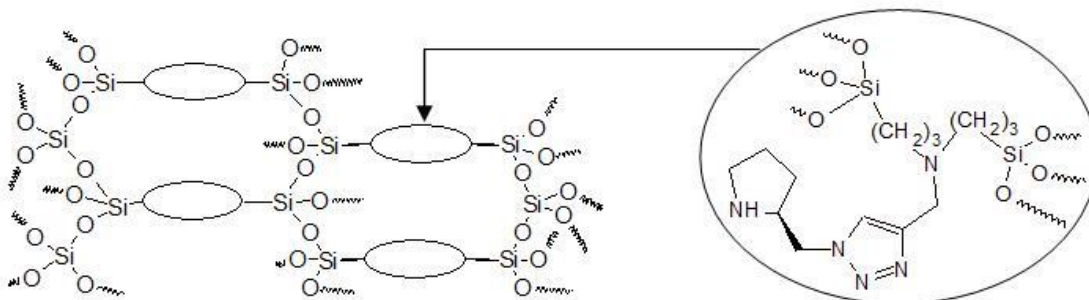
Calixareny jsou díky své preorganizaci výbornými stavebními bloky pro syntézu (nejen) biologicky aktivních látek. Jedním z vhodných způsobů jejich derivatizace je zavedení terminální trojné vazby, která nabízí širokou škálu dalších syntetických transformací. Bohužel, příprava těchto derivátů na bázi calix[4]arenu nebyla doposud systematicky studována.

V rámci této práce byly zkoumány možnosti syntézy terminálních alkynů na bázi calix[4]arenu, a to jak na spodním, tak i na horním okraji. Alkylací spodního okraje propargylovou skupinou byly připraveny různé konformery calix[4]arenu. Pro přípravu acetylenů na horním okraji byly zkoumány různé metody, jako například Corey-Fuchsova reakce nebo použití Ohira-Bestmannova činidla. Takto připravené látky mohou být dále použity například pro click-reakce s vhodnými azidy.

Chirální hybridní organicko-anorganické materiály na bázi pyrrolidinu jako katalyzátory enantioselektivních reakcí

Autor: David Tetour
Ročník: M2
Ústav: Organické chemie
Školitel: doc. Dr. Ing. Jana Hodačová

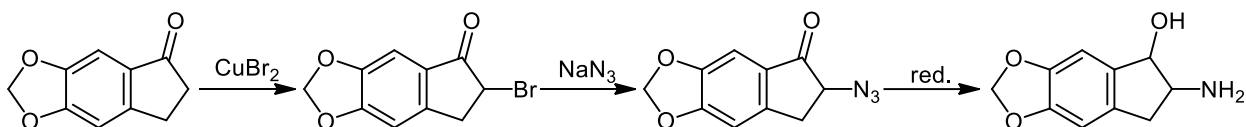
Mnoho vědeckých skupin se v posledních letech zabývá vývojem nových heterogenních katalyzátorů s možným uplatněním v enantioselektivní katalýze. Ve spolupráci s pracovištěm Dr. Wong Chi Mana z Ecole National Supérieure de Chimie de Montpellier se věnujeme přípravě hybridních organicko-anorganických křemičitých materiálů, které by měly sloužit jako katalyzátory některých enantioselektivních reakcí. V této práci bude prezentována příprava dvou typů křemičitého materiálu obsahujících enantiomerně čistý derivát pyrrolidinu a studie jejich schopnosti katalyzovat aldolizační reakce a Michaelovy adice.



Syntéza metabolitu 5,6-methyendioxy-2-aminoindanu (MDAI)

Autor: Michal Vetýška
 Ročník: M1
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: Ing. Michal Himl, Ph.D.

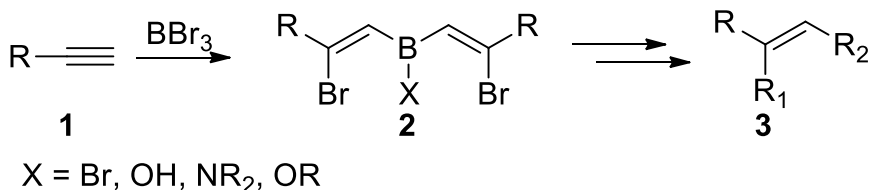
Cílem této práce byla syntéza jednoho z potenciálních metabolitů nové syntetické drogy 5,6-methyendioxy-2-aminoindanu (MDAI), která patří do skupiny 2-aminoindanů. Aminoindany jsou poměrně nová skupina látek, které jsou zejména poslední dobou vyhledávány kvůli svým psychoaktivním účinkům. Prvním stupněm syntézy byla bromace 5,6-methyendioxyindan-1-onu do α -polohy. Bromderivát byl následně převeden nukleofilní substitucí azidovým iontem na 5,6-methyendioxy-2-azidoindan-1-on. 5,6-Methyendioxy-2-azidoindan-1-on byl úspěšně redukován na výsledný produkt 5,6-methyendioxy-2-aminoindan-1-ol a to přímou redukcí nebo postupnou redukcí nejprve azido-skupiny a následně karbonylové skupiny. Výsledné produkty byly kvůli své nízké stabilitě izolovány ve formě stabilních hydrochloridů. Připravený metabolit může být využit při farmakokinetických studiích. Také může najít uplatnění při identifikaci MDAI a jeho metabolitů v moči a jiném biologickém materiálu.



Bromoborace terminálních alkynů

Autor: Vyšnickij Jegor
 Ročník: M1
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D.

Trisubstituované alkeny jsou častým motivem přírodních látek a léčiv. Intermediáty na bázi trisubstituovaných alkenů nacházejí široké spektrum aplikací v organické syntéze. Jednou z možností, jak připravit trisubstituované alkeny je využití bromoborace alkynů **1**. Reakce je obvykle prováděna za vzniku alkenyldibromboranů. Bohužel velmi málo je známo o přípravě derivátů borinové kyseliny **2**. Substituované borany **2** lze velmi snadno připravit stereoselektivní bromoborací terminálních alkynů. V příspěvku budou diskutovány vlastnosti a příprava derivátů borinových kyselin **2** spolu s pokusy o jejich přeměnu na trisubstituované alkeny **3**.



Sekce : Organická chemie M2

Polymerní konjugáty nesoucí muskarinika pro aplikaci v onkologii

Autor: Aneta Pospíšilová
Ročník: M2
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Radek Jurok, Ph.D.

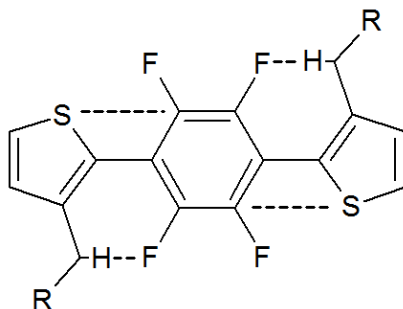
Současný trend v diagnostice a léčbě rakoviny je tzv. cílený transport, který oproti konvenčním metodám vyniká vysokou účinností a menším rizikem vedlejších účinků. Pro cílení nádorové tkáně jsou optimální hydrofilní polymery a nanočástice – díky své velikosti nejsou vylučovány ledvinami a proto setrvávají dlouho v krevním oběhu. Navíc, pokud mají velikost pod cca 200 nm, se hromadí v nádorové tkáni v důsledku tzv. „Enhanced Permeability and Retention“ (EPR) efektu. Toto pasivní cílení zvyšuje koncentraci částic v nádoru až o 1 – 2 řády v porovnání se zdravou tkání. Dalšího navýšení účinnosti lze dosáhnout navázáním aktivně cílící struktury na nanočástici. Bylo zjištěno, že muskarinový acetylcholinový receptor je hyperexprimován řadou nádorů a tak jeho ligandy, muskarinika, mohou aktivně cílit nádorovou tkáň. Můj příspěvek je věnován návrhu a syntéze polymerních nanodiagnostik nesoucích antagonisty muskarinového receptoru. Diskutována bude především syntéza methakrylamidových monomerů s vázanými estery tropinu nebo 3-chinuklidinyl benzilátem.

Sekce : Organická chemie M2

Syntéza a studium fluorovaných organických materiálů pro elektronické a optoelektronické aplikace

Autor: Bc. Roman Halaksa
Ročník: M1
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Jozef Krajčovič, Ph.D. (Ing. Václav Kozmík, CSc.)

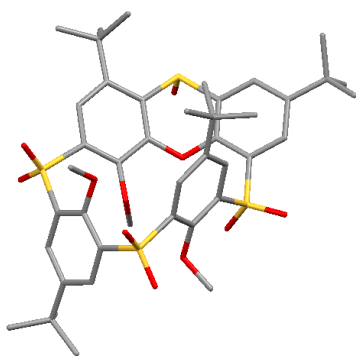
Práce pojednává o využití polyfluorovaných aromatických sloučenin, jakožto silných elektronakceptorních jednotkách, a jejich inkorporaci do pokročilých monomerních a oligomerních systémů s využitím pro elektronické a optoelektronické aplikace. Zabývá se teoretickými aspekty struktury zmíněných skeletů, včetně konkrétních příkladů již připravených molekul dostupných z literatury. Experimentální část práce se zabývá syntézou klíčových intermediátů s využitím Kumadova kaplinku a syntézou alkylovaných thiofenů propojených tetrafluorofenylenovým můstkem pomocí Stilleho kaplinku.



Obrázek 1: Struktura a intramolekulární interakce 3-BATTFPF

Studium reaktivity fenoxathiinového makrocyklu využitelného pro syntézu iontových receptorů

Autor: Tomáš Landovský
Ročník: M2
Ústav: Organické chemie
Školitel: doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.



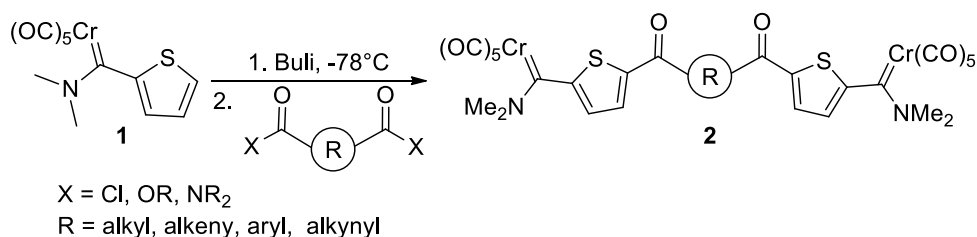
Calixareny a jejich sirná analoga – thiacalixareny, jsou makrocyclické sloučeniny, které mají široké využití coby stavební bloky v supramolekulární chemii. Zajímavou cestou jejich derivatizace je vnášení spirodienonových motivů. Konkrétně *p*-*tert*-butylmono(spirodienon)thiacalix[4]aren pak podle nedávných zjištění při reakci s HCl neposkytuje očekávaný produkt *ipso*-substituce, jako analogický derivát klasického calix[4]arenu, nýbrž dochází k intramolekulárnímu přesmyku za vzniku fenoxathiinového tricyklu. Výsledný inherentně chirální makrocyklus je studován s ohledem na jeho potenciální využití při syntéze iontových receptorů. Bylo prozkoumáno konformační

chování této unikátní struktury s využitím alkylací na spodním okraji, provedeny oxidace sirných můstků do různých stupňů s důrazem na jejich regioselektivitu a získané poznatky využity pro zavedení dalších funkčních skupin, které umožní tvorbu žádaných receptorů.

Reakce metalovaných Fischerových karbenových komplexů chromu s deriváty karboxylových kyselin

Autor: Kristýna Kolouchová
Ročník: M2
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D.

Fischerovy karbenové komplexy nacházejí široké spektrum aplikací v organické syntéze. V návaznosti na využití Fischerových karbenových komplexů jsme v naší laboratoři publikovali metodiku pro přípravu metalovaných karbenových komplexů chromu. Následnou reakcí připravených komplexů s elektrofilními činidly byly získány funkcionalizované biskarbenové komplexy chromu. Cílem mé práce bylo rozšíření publikované metodiky a prostudovat možnosti přípravy konjugovaných biskarbenových komplexů **2**. Výchozí aminokarbenový komplex **1** byl metalován účinkem BuLi a u připraveného organolithného činidla byla studována jeho reakce s deriváty dikarboxylových kyselin.

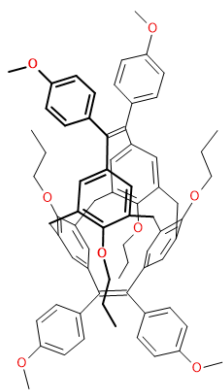


X = Cl, OR, NR₂

R = alkyl, alkeny, aryl, alkynyl

Syntéza *p*-acylcalix[4]arenů a jejich následná transformace

Autor: Matěj Sommer
Ročník: M1
Ústav: Organické chemie
Školitel: doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.



Calixareny a jejich deriváty hrají důležitou roli na poli supramolekulární chemie. Významným reakčním centrem v organické syntéze je karbonylová skupina, která je dále snadno modifikovatelná. Univerzální metoda pro syntézu *p*-tetraacylcalixarenů zatím nebyla nikde publikována. *p*-Tetraacylcalixareny v *1,3-střídavé* konformaci byly v naší laboratoři syntetizovány adicí organolithné sloučeniny na *p*-tetrakyanocalixaren, a dále byly přemostěny intramolekulární McMurryho reakcí za vzniku rigidní prostorové struktury. Cílem této práce je optimalizace této reakce, která bude dále využita pro přemostění různých *p*-acylcalixarenů. Kromě toho budou zkoumány i jiné možnosti acylace a syntéza bude rozšířena i na deriváty *kónické*.

Příprava nových chráněných aminokyselin cross-methathesí

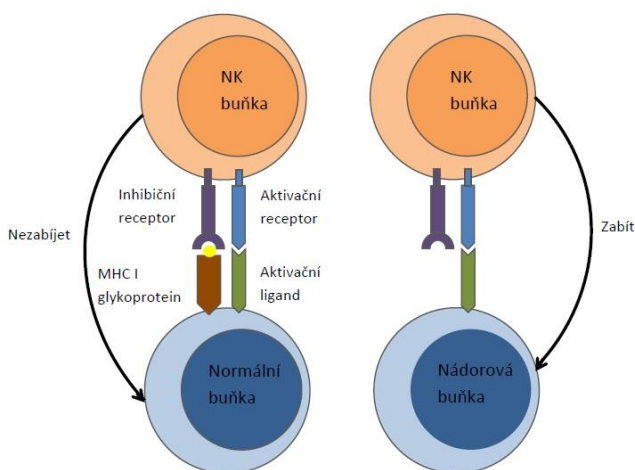
Autor: Jiří Lapčík
Ročník: M2
Ústav: Organické chemie
Školitel: prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.; Mgr. Miroslav Havránek, Ph.D.

Nové chráněné aminokyseliny jsou významné pro přípravu derivatizovaných peptidů s aplikací například ve vývoji nových hormonálních léčiv. Pro syntézu funkcionalizovaných chráněných stavebních bloků je intenzivně zkoumána i methathese olefinů. Jedním z důvodů je vysoká tolerance přítomnosti funkčních skupin při methatesi. Limitujícím prvkem využití cross-methathese je vznik směsi *E*, *Z* izomerů produktu, produktů homomethathese a nízké výtěžky při reakcích některých substrátů. V této práci je studována příprava chráněných aminokyselin. Výchozí látkou je vhodně chráněný allylglycin, který reakcí s terminálním olefinem poskytne žádanou aminokyselinu. Je studován vliv reakčních podmínek a optimalizace reakce pro syntézu ve větším množství. Minimalizace vzniku vedlejších produktů a zajištění průběhu s definovanou konfigurací na dvojně vazbě při ekonomicky příznivých podmínkách vyžaduje hledání nových přístupů.

Nová imunostimulancia na bázi glykolipidů odvozených od trehalózy 6,6'-dimycolatu

Autor: Bc. Martin Vařeka
 Ročník: M2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.

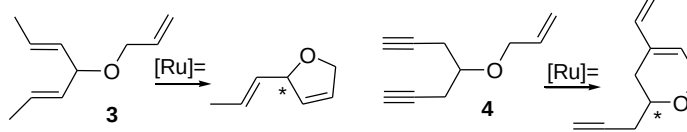
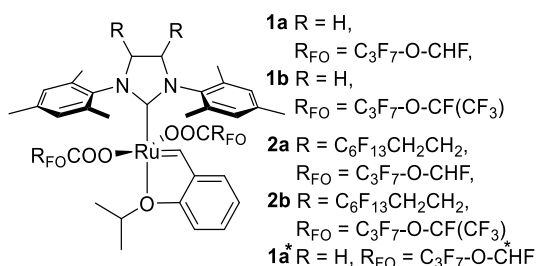
Trehalóza 6,6'-dimycolat byla identifikována jako nejvíce zastoupený glykolipid v buněčné stěně bakterie *Mycobacterium tuberculosis*. Struktura trehalózy 6,6'-dimycolatu je vysoce efektivně rozpoznávána imunitním systémem, kde vyvolává silnou imunitní reakci, především antigenně specifických mechanismů. Těchto imunostimulačních vlastností může být využito pro design moderních vakcín, či pro posílení protinádorové imunity. Použití přímo trehalózy 6,6'-dimycolatu jako imunostimulancia není možné, z důvodu její extrémní pyrogenity. Byla připravena série 6,6'-diacyl trehalóz s očekávaným imunostimulačním účinkem a jejich aktivita je nyní testována v *in vivo* a *in vitro* testech. Dále byly zahájeny formulační experimenty s cílem zakomponovat tyto látky do micel nebo liposomů.



Rutheniové komplexy modifikované racemickými polyfluoretherovými řetězci

Autor: Pavlína Lipovská
 Ročník: M2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

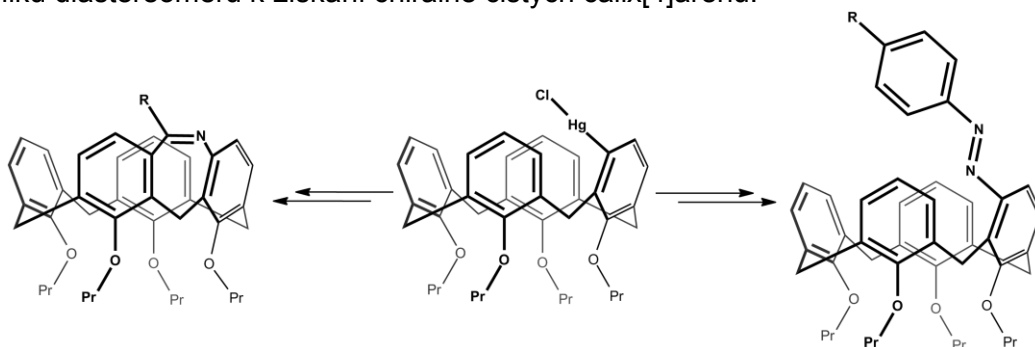
Ve své práci jsem se zabývala modifikacemi Hoveyda-Grubbsova prekatalyzátoru 2. generace s cílem získat jeho racemická „středně fluorová“ analoga **1** a **2**, recyklovatelná pomocí fluorového environmentálně benigního systému. Připravené komplexy jsou aktivní nejen v modelových metatezích s uzavřením cyklu (RCM) a enynových metatezích s uzavřením cyklu (RCEYM), ale také v RCM prochirálního trienu **3** a RCEYM prochirálního endiynu **4**. S využitím rezoluce racemického prekursoru jsem dále získala enantiomerně obohacený komplex **1a***. Paralelně jsem se věnovala modifikaci alkoxybenzylidenového ligandu v komplexech **1** polyfluoropolyoxaalkoholy.



Meta-nitrosace calix[4]arenu a její využití v syntéze azosloučenin a přemostěných derivátů calix[4]arenu

Autor: Martin Tlustý
 Ročník: M1
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

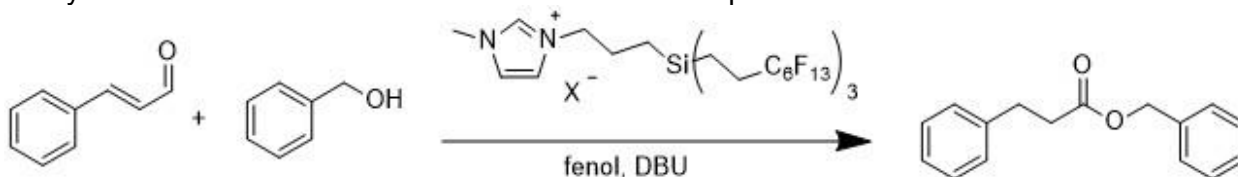
Elektrofilní aromatická merkurace calix[4]arenu představuje pravděpodobně jediný známý způsob, jak selektivně provést substituci v *meta*-poloze na nederivatizovaném horním okraji calix[4]arenu. V této práci byly merkurované deriváty převedeny na nitrososloučeniny. Takto získané mono- i disubstituované deriváty byly v první části práce dále transformovány na azosloučeniny, které by mohly být využity jako prekuzory pro přípravu složitějších inherentně chirálních receptorů. U jedné ze získaných azosloučenin byla zjišťována její schopnost komplexovat *N*-methylpyridinium jodid. Ve druhé části práce pak byly syntetizovány sloučeniny obsahující sedmičlenný kruh vzniklý intramolekulárním přemostěním horního okraje proximálních jader calix[4]arenu. Při využití chirálních derivátů kyselin může tento postup vést díky vzniku diastereomerů k získání chirálně čistých calix[4]arenů.



Syntéza fluorofilních imidazoliových solí a studium jejich katalytických vlastností

Autor: Veronika Bílková
 Ročník: M2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.

Imidazoliové soli jsou díky svým unikátním vlastnostem studovány z mnoha pohledů – jako rozpouštědla (iontové kapaliny), prekuzory NHC ligandů pro přechodné kovy i jako samostatné organokatalyzátory. Má práce je zaměřena na syntézu vysoce fluorovaných imidazoliových solí a jejich využití jako organokatalyzátorů. Takové sloučeniny jsou extrémně fluorofilní, čehož se dá využít například k snadnému odstranění katalyzátoru z reakční směsi a jeho recyklaci. Byly připraveny imidazoliové soli s různými anionty a byla zkoumána reakční kinetika jimi katalyzované benzoinové kondenzace a vliv aniontu na průběh reakce.

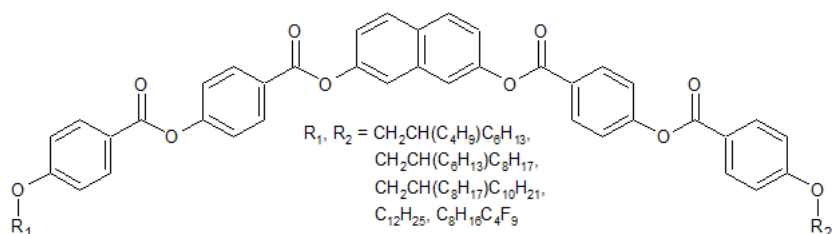


Syntéza kapalných krystalů s rozvětvenými alkylovými řetězci

Autor: Štěpán Laštůvka
 Ročník: M1
 Ústav: Organická chemie
 Školitel: Ing. Václav kozmík, CSc.; Ing. Martin Horčic

Současná společnost tlačí vědecký pokrok a technologie stále více kupředu a to i na poli zobrazovací techniky (LCD panely, apod.), kde se uplatňují právě kapalně krystalové krystaly. Bylo prokázáno, že mesomorfní vlastnosti lze také ovlivnit rozvětvením terminálních řetězců. Z těchto důvodů bylo mým úkolem syntetizovat kapalně krystalové krystaly tohoto typu a prozkoumat vliv rozvětvení alkylových řetězců, tzv. „vlaštovčích ocasů“ na jejich mesomorfní vlastnosti.

Pro syntézu byl použit jako centrální jádro naftalen-2,7-diol, který se v předchozích syntézách velmi osvědčil. V práci byla připravena tři prodlužující ramena s různou délkou terminálních rozvětvených alkylových řetězců. Tato byla použita k syntéze série cílových kapalných krystalů s různými prodlužujícími rameny. Mesomorfní vlastnosti připravených látek byly studovány na FZU AV ČR.

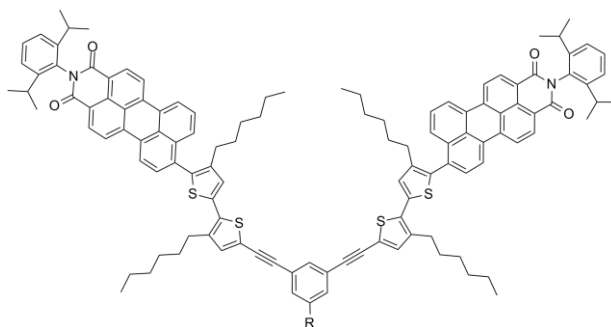


Syntéza barviv pro senzitivaci fotočlánků na bázi diamantu

Autor: Kateřina Bártová
 Ročník: M2
 Ústav: Organická chemie
 Školitel: Ing. Radek Jurok, Ph.D.

Barvivem senzitivované fotočlánky (DSSCs) budí zájem odborné veřejnosti již od roku 1991, kdy Michael Grätzel a Brian O'Regan publikovali první práci na toto téma. Důvodem, proč právě tyto články přitahují pozornost, je bezesporu jejich nízká cena oproti článkům z čistého křemíku. Mezi další výhody DSSCs patří také jejich technické provedení, články mohou být tenké jako fólie, a dokonce mohou být ohebné. Obecnou nevýhodou fotočlánků je jejich nízká účinnost, která se pohybuje okolo 15 %.

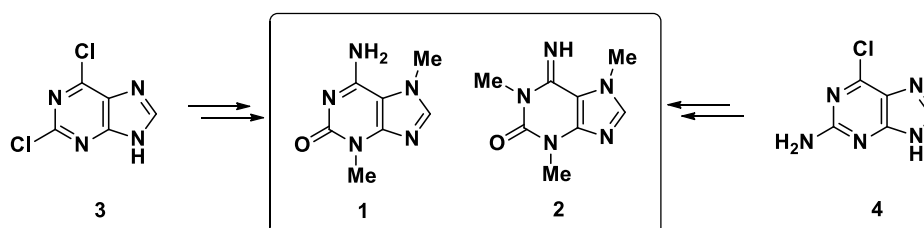
Teoretickým limitem pro DSSCs s jednou fotoaktivní elektrodou je 31 %, kterého ale zatím nebylo dosaženo. Zvýšení účinnosti až na 43 % by mohly přinést tzv. tandemové fotočlánky, které na rozdíl od článků Grätzelova typu mají fotoaktivní obě elektrody. Ve své práci se zabývám syntézou donor-akceptorového barviva pro senzitivaci fotokatody tandemového článku. Klíčovou komponentou barviva je dvojitá fotoanténa, založená na molekulárně vodivé struktuře na bázi perylenmonoimidu jako akceptoru. Jako donor slouží kotvicí struktura kovalentně spojená se substituovaným dithiofenem.



Regioselektivní syntéza N^7 -substituovaných isoguaninů

Autor: Lukáš Lattenberk
 Ročník: M2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D.

Isoguanin je heterocyklická sloučenina, jejíž N^9 -substituované deriváty vykazují zajímavou biologickou aktivitu. 3,7-dimethylisoguanin (X) a 1,3,7-trimethylisoguanin (x) jsou biologicky aktivní deriváty isoguaninu, které byly izolované z přírodních materiálů. O biologické aktivitě syntetických N^7 -substituovaných derivátů toho není mnoho známo, pravděpodobně z důvodů jejich obtížné dostupnosti. Proto byla vypracována metodika pro přípravu N^7 -substituovaných isoguaninů x. V příspěvku bude diskutována možnost použití 2,6-dichlorpurinu (x) a 2-amino-6-chlorpurinu (X) jako výchozích látek.



Příprava merkapturových kyselin odvozených od styren-7,8-oxidu

Autor: Aneta Bednářová
 Ročník: B3
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: doc. Ing. Igor Linhart, CSc.

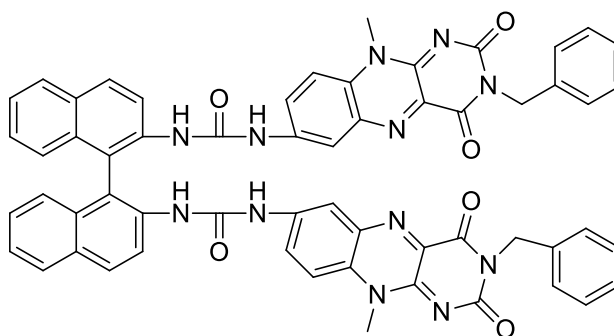
Styren-7,8-oxid (SO) je klíčovým elektrofilním metabolitem styrenu, který v buňkách reaguje s tripeptidem glutathionem a vzniklé adukty se pak dále metabolicky přeměňují až na S-substituované deriváty cysteinu, merkapturové kyseliny. Tyto metabolity mají využití jako indikátory expozice. SO obsahuje epoxidový kruh, který se může nukleofilním atakem otevírat na α a β uhlíku, což má za následek vznik dvou regioisomerů. V případě racemického SO pak vzniknou dva páry diastereomerů. Ve své práci jsem vycházela z N-acetyl-L-cystein-methylesteru (NAC-Me), který reakcí s čistými enantiomery SO po následné hydrolýze esteru poskytuje stereospecificky dva regioisomery, N-acetyl-S-(1-fenyl-2-hydroxyethyl)cystein (1-fenyl-2-hydroxyethylmerkapturová kyselina, 21-HPEMK) a N-acetyl-S-(2-fenyl-2-hydroxyethyl)cystein (2-fenyl-2-hydroxyethylmerkapturová kyselina, 22-HPEMK), které jsem oddělila pomocí sloupcové chromatografie. Za přítomnosti $(C_6H_5)_3B$ jako Lewisovy kyseliny dochází k regioselektivnímu otevírání epoxidového kruhu SO na α uhlíku. Tímto způsobem byly připraveny oba diastereomery 21-HPEMK.

Sekce : Organická chemie B1

Syntéza axiálně chirálních ligandů nesoucích flavinové zbytky

Autor: Leoš Valenta
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.

Již dříve byla v naší laboratoři zkoumána vlastnost močovín vzniklých z 1,1'-binaftalenu-2,2'-diaminu enantioselektivně interagovat s látkami. Vytvořením chirální močoviny s molekulou flavinu, jež má zajímavé optické vlastnosti, se otevírají nové možnosti využití, jako např. studium interakcí měřením fluorescenčních spekter. Cílem mé práce je vytvořit močovinu na bázi binaftalenu nesoucí flavinový substituent.

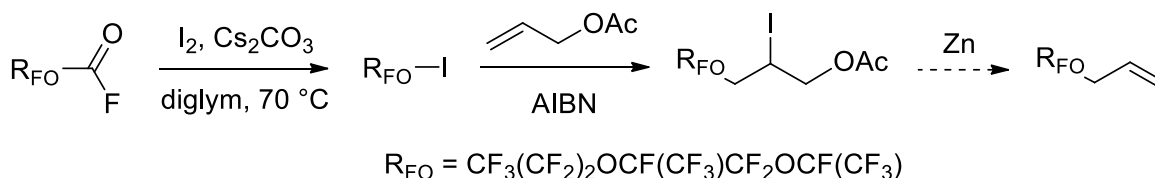


Sekce : Organická chemie B1

Príprava a radikálové reakcie perfluoropolyoxaalkyljodidov

Autor: Obertík Róbert
Ročník: B2
Ústav: Organické chemie
Školitel: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

V našej výskumnej skupine sme zistili, že zlúčeniny modifikované perfluoropolyetherovými reťazcami sú často fluorofilnejšie než odpovedajúce polyfluoralkylované látky. Vo svojej práci som sa preto venoval príprave stavebných blokov pre metatézy alkenov, obsahujúce perfluoropolyetherový reťazec a nefluorovanú násobnú väzbu. V prvom kroku som skúmal premenu trimeru HFPO na perfluor-2-jod-5-methyl-3,6-dioxanonan v závislosti na teplote reakčnej zmesi a rozpúšťadle. Produkt som v druhom kroku následne podrobil radikálovej adícii na ethén a alyl acetát.

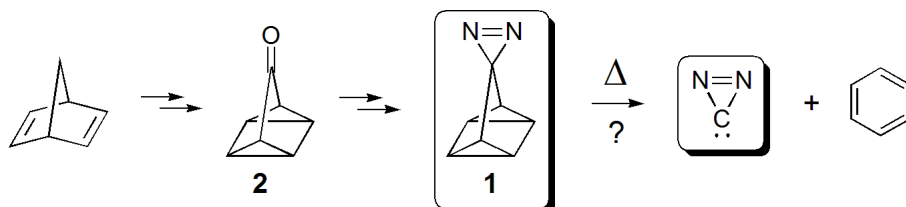


Sekce : Organická chemie B1

Syntéza azikvadricyklanu jako prekursoru cyklického karbenu CN_2

Autor: Filip Gracias
Ročník: B3
Ústav: Organická chemie
Školitel: Ing. Tomáš Martinů, Ph.D.

Projekt se zabývá syntézou 7-azikvadricyklanu (**1**), dosud nepopsané pentacyklické sloučeniny $\text{C}_7\text{H}_6\text{N}_2$ s vysokým pnutím, jako potenciálního prekursoru cyklického karbenu CN_2 (jehož existence v roztoku a v plynné fázi byla nedávno diskutována). 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**).



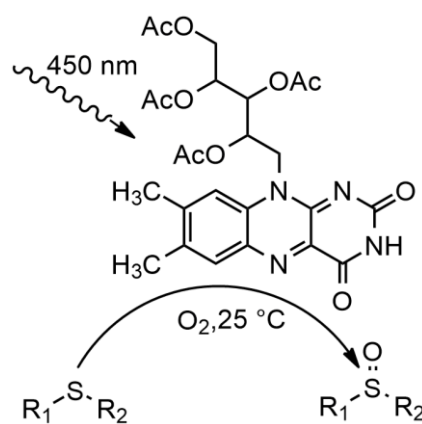
Sekce : Organická chemie B1

Příprava sulfoxidů oxidací sulfidů katalyzovanou deriváty vitaminu B2

Autor: Tomáš Neveselý
Ročník: B3
Ústav: Organická chemie
Školitel: doc. Ing. Radek Cibulka, Ph.D.

Byla vyvinuta efektivní metodika pro chemoselektivní oxidace sulfidů na sulfoxidy katalyzovaná tetraacetyl-riboflavinem, využívající viditelné záření a kyslík jako stechiometrické oxidační činidlo. Metoda je vhodná zejména kvůli použití malého množství snadno připravitelného katalyzátoru, viditelného záření o vlnové délce 450 nm na místo zahřívání a životní prostředí nezatěžujících rozpouštědel.

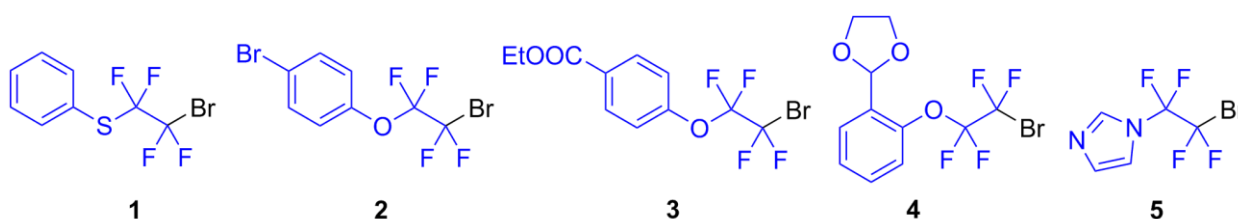
Výhodou této metody je vysoký kvantový výtěžek, tolerance širokého spektra funkčních skupin, rychlá oxidace stericky náročných substrátů, kterými jsou například diarylsulfidy či *tert*-butylsulfidy, a elektronově deficitních substrátů. Touto metodou lze připravit nejen farmaceuticky zajímavé sloučeniny, ale také konvertovat síru nesoucí bojové látky na méně toxické a snadněji odbouratelné produkty. Mechanistické studie ukázaly, že se uplatňuje oxidace singletovým kyslíkem či elektronovým přenosem v závislosti na povaze substrátu.



Nový přístup k nukleofilní tetrafluorethylaci

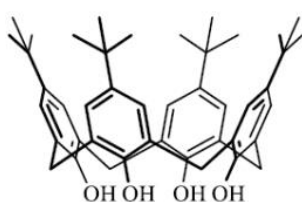
Autor: Alena Budinská
 Ročník: B2
 Ústav: Organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i.
 Školitel: Ing. Petr Beier, Ph.D.

Organické sloučeniny obsahující fluor dnes díky svým jedinečným vlastnostem nacházejí uplatnění např. jako léčiva, agrochemikálie, pokročilé polymerní materiály či kapalné krystaly. Práce se zabývá zaváděním substituované tetrafluorethylové skupiny ($\text{R}-\text{CF}_2\text{CF}_2-$) na organické substráty. Z výchozích tetrafluorethylbromidů (**1–5**) je v prvním kroku reakcí s $i\text{-PrMgCl}\cdot\text{LiCl}$ *in-situ* generováno činidlo $\text{R}-\text{CF}_2\text{CF}_2\text{MgCl}$, jehož využití je následně ukázáno na nukleofilních adičních reakcích. Po optimalizaci podmínek pro adice na karbonylové sloučeniny byl proveden screening dalších substrátů, jako jsou např. epoxidy, nitrony, sulfonyliminy či iminy. Metoda poskytuje nejen produkty nesoucí poměrně vzácné $-\text{CF}_2\text{CF}_2-$ uskupení, ale umožňuje také další transformace připravených aduktů s využitím funkčních skupin přítomných jak na výchozích bromidech, tak na zvolených elektrofilech.

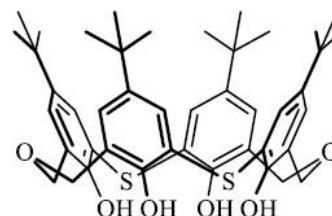


Syntéza calix[4]arenů se smíšenými můstkovými skupinami

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



Cílem mé práce je syntéza calix[4]arenů se smíšenými můstkovými skupinami a následné studium jejich struktury a dynamického chování. Calix[4]areny se smíšenými můstkovými skupinami vznikají nahrazením některých nebo všech methylenových spojek mezi jednotlivými

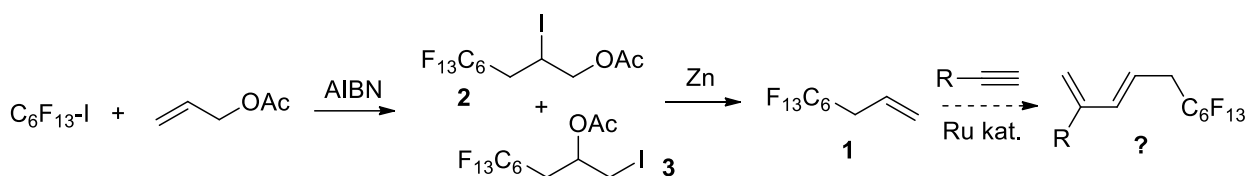


fenolickými jádry calix[4]arenu spojkami sulfidickými či dimethylenetherickými. Tyto exotické sloučeniny jsou na poli supramolekulární chemie neprozkoumaným územím, je však zřejmé, že záměny methylenových můstků mají razantní dopad na vlastnosti celého makrocyclu – od velikosti kavity přes flexibilitu a komplexační vlastnosti až po reaktivitu. Svou snahu budu soustředit na studium chemických a fyzikálních vlastností těchto pozoruhodných látek a na jejich možnou aplikaci v praxi.

Syntéza fluorovaných intermediátů pro enynovou metatezi

Autor: Pavlína Komínová
 Ročník: B3
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

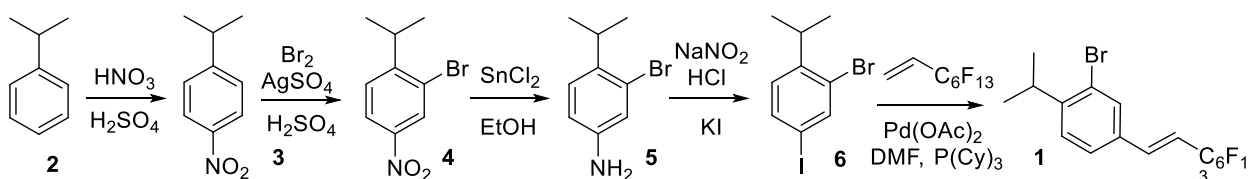
Ve své práci jsem studovala polyfluoralkeny jako substráty pro enynovou metatezi. Získané produkty, polyfluoralkylované dieny, mohou sloužit jako monomery pro polyfluorované kaučuky nebo jako intermediáty pro polyfluorované cyklické sloučeniny. První skupina fluoralkenů, perfluoralkyletheny, je komerčně dostupná, ale má nízkou reaktivitu. Proto jsem se věnovala syntéze 3-(perfluorhexyl)propenu (**1**). V prvním kroku jsem s využitím iniciace AIBN nebo $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_4$ získala z perfluorhexyljodidu a allyl-acetátu produkt radikálové adice **2** spolu s vedlejším produktem **3**, vzniklým termální isomerizací primárního produktu **2**. Dehalogenace směsi obou látek zinkem poskytla fluoralken **1**. Pro oba typy fluoralkenů jsem provedla pilotní enynové metateze s modelovými substráty, trimethylsilylacetylenem a 4-brombut-1-ynem.



2-Brom-1-isopropyl-4-[2-(perfluorhexyl)ethenyl]benzen

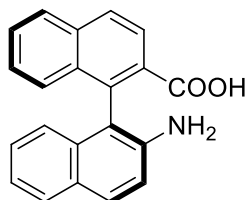
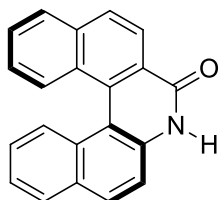
Autor: Antonín Edr
 Ročník: B3
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Častou součástí chirálních rutheniových katalyzátorů enantioselektivní metateze alkenů jsou NHC ligandy modifikované 2,5-disubstituovanými arylovými skupinami. Vzhledem k zaměření naší laboratoře na fluorofilní komplexy přechodných kovů byla cílem mé práce syntéza 2-brom-1-isopropyl-4-[2-(perfluorhexyl)ethenyl]benzenu (**1**) jako stavebního bloku pro NHC ligandy. V prvním kroku syntézy jsem nitroval kumen (**2**) za vzniku směsi *o*- a *p*-nitrokumenu (**3**), kterou jsem separoval rektifikací. Bromací *p*-nitrokumenu (**3**) za katalýzy Ag_2SO_4 jsem získal 2-brom-1-isopropyl-4-nitrobenzen (**4**), který jsem redukoval SnCl_2 na odpovídající substituovaný anilin **5**. Diazotace anilinu **5** vedla k odpovídající diazoniové soli, která reakcí s KI poskytla klíčový intermediát, 2-brom-1-isopropyl-4-jodbenzen (**6**). Kritickým krokem syntézy je v současné době studovaná Heckova reakce arenu **6** s (perfluorhexyl)ethenem na cílový fluoraren **1**.



Optimalizace přípravy aminokyseliny na bázi binaftalenu

Autor: Kristýna Janků
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.



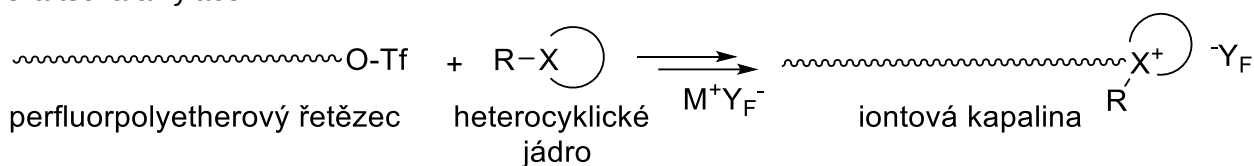
Axiálně chirální aminokyselina na bázi binaftalenu je známá, ale její poměrně komplikovaná příprava zatím brání širšímu využití této molekuly. Již dříve byl v naší laboratoři zkoumán postup přípravy této aminokyseliny jednodušším způsobem. Nakonec se ovšem podařilo získat pouze

cyklický amidový derivát. Cílem mé práce je nalézt takové podmínky přípravy aminokyseliny, které zabrání vzniku tohoto cyklického derivátu.

Syntéza a využití fluorofilních iontových kapalin

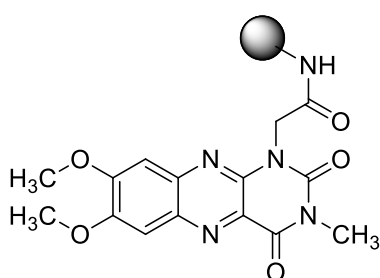
Autor: Nikola Štěpánková
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: prof. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

V naší laboratoři jsme při studiu fluorofilních vlastností organických sloučenin zjistili, že modifikace perfluoropolyetherovými řetězci vede ke sloučeninám s vyšší fluorofilitou než modifikace řetězci perfluoralkylými. Nejvýraznější byl tento rozdíl pro iontové kapaliny na bázi bis(polyfluorpolyoxaalkylovaných) imidazoliových solí, které jsou vysoce rozpustné v perfluorovaných rozpouštědlech. Jejich nevýhodou je nízká stabilita heterocyklického jádra. Cílem mé práce je proto syntéza nových typů fluorofilních iontových kapalin, které by obsahovaly stabilnější heterocyklické centrální jednotky. Zjistila jsem, že kvarternizace těchto jader jedním polyfluorpolyoxaalkylovým řetězcem vede k látkám s teplotou tání přes 150 °C, které proto nejsou iontovými kapalinami. Ve své práci dále studuji roli fluorovaných aniontů a nefluorovaného alkyly na teplotu tání získaných kvarterních solí a jejich stabilitu jako rozpouštědel v modelových reakcích jako je Dielsova-Alderova reakce nebo Friedelova-Craftsova alkylace.



Nové fotokatalyzátory na bázi funkcionalizovaných nanočástic

Autor: Jessica Špačková
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Eva Svobodová, Ph.D.



V posledních letech je intenzivně studováno uplatnění nanočástic (NPs) v heterogenní katalýze,¹ jejíž výhodou je průběh reakce v mírnějších podmínkách, vysoká selektivita, snadnější separace a díky možnosti opakovaného použití katalyzátoru také snížení nákladů celého procesu. Velmi rozšířené jsou křemičité nanočástice, zejména pro jejich snadnou přípravu, která navíc nezatěžuje životní prostředí.² Navázáním fotochemicky aktivních látek na mezoporézní křemičitý nosič je možné připravit sloučeniny využitelné ve

fotokatalýze. Cílem mé práce je připravit a funkcionalizovat křemičité nanočástice MCM-41, navázat „alloxazin“ na jejich povrch a otestovat účinnost připraveného katalyzátoru při [2+2] cykloadicích alkenů, které již byly v homogenním prostředí úspěšně provedeny v naší laboratoři³.

¹ Ciriminna R., Demma Carà P., Lopez-Sanchez J. A., Pagliaro M. *ChemCatChem* **2014**, 6, 3053.

² Meynen V., Cool P., Vansant E. F. *Microporous Mesoporous Mater.* **2009**, 125, 170.

³ Mojr V., Svobodová E., Straková K., Neveselý T., Chudoba J., Dvořáková H., Cibulka R.: *Chem. Comm.* **2015**, 51, 12036.

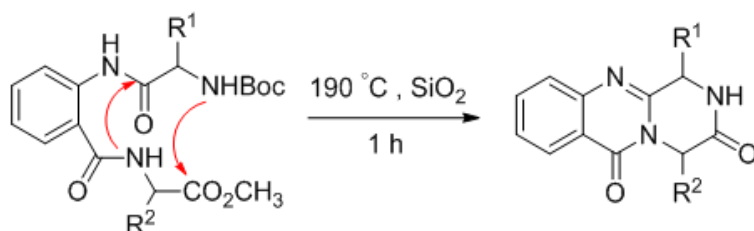
Nový přístup k derivátům chinazolinu, čtyřkroková syntéza ardeeminu

Autor: Václav Chmela
Ročník: B2
Ústav: Organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i.
Školitel: Ullrich Jahn, Dr. habil. (UOCHB)

Deriváty chinazolinu jsou rostoucí skupinou alkaloidů mající různou biologickou aktivitu.^[1] Biosynteticky jsou tvořeny z tryptofanu a anthranilové kyseliny se začleněním dalších jednotek aminokyselin. Zástupci této skupiny vykazují mnohočetnou rezistenci k lékům (MDR), cytotoxické a antivirotické účinky, a proto je potřeba praktických metod, které umožní syntézu těchto alkaloidů a jejich derivátů ve větších množstvích.

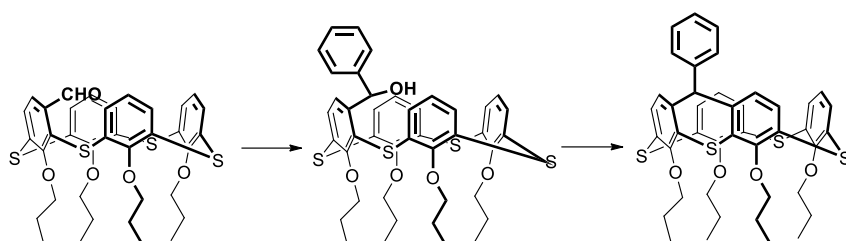
Níže popisující metodou vedoucí k derivátům chinazolinu je přístup využívající silikagelem zprostředkovanou dvojitou kondenzací. Tato metoda byla úspěšně aplikována na totální syntézu gyantrypinu a ardeeminu.

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



Příprava intramolekulárně přemostěných derivátů thiacalix[4]arenů a calix[4]arenů

Autor: Victoria Tarus
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Petr Slavík



V naší skupině byla nedávno publikována unikátní metoda přípravy intramolekulárně přemostěných calixarenů, které vykazují jedinečné vlastnosti a reaktivitu. Nicméně přemostění

thiacalixarenů není dosud popsáno, a proto se tímto tématem zabývám. Cílem této práce je vytvoření přemostěných derivátů thiacalixarenů, jejichž molekula je dodatečně zpevněna dalším intramolekulárním mostem. Pro přípravu těchto sloučenin byla využita *meta*-formylace thiacalix[4]arenů v *konické* konformaci. Dalším cílem práce je zkoumání vlivu různých substituentů, umožňujících další funkcionalizaci, na horním okraji klasických calixarenů na intramolekulární přemostění. Tyto vysoce preorganizované makrocikly budou sloužit základem pro konstrukci nového typu ligandů pro selektivní komplexaci a rozpoznávání.

Sekce : Organická chemie B2

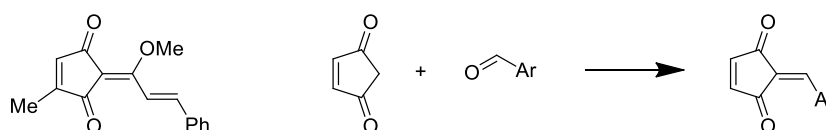
Syntéza a biologická aktivita 2-aryldencyklopent-4-en-1,3-dionů

Autor: Jakub Ottenschläger
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Radek Jurok, Ph.D.

Tato práce se zabývá syntézou a studiem biologické aktivity syntetických analogů odvozených od přírodní látky Coruscanonu A (Schema 1) vyznačující se antimikrobiálními a antifungicidními účinky. Tyto analogy tak představují deriváty cyklopent-4-en-1,3-dionu (CPD), přičemž již předchozí testy jednoduchého derivátu: 2-benzyliden-4-cyklopenten-1,3-dionu¹ ukázaly, že tato látka má oproti přírodnímu derivátu nižší cytotoxicitu. Tento výsledek proto skýtá vysokou pravděpodobnost, že existuje prostor ke zlepšení, vhodnou volbou strukturního motivu molekuly.

Syntéza 2-aryldencyklopent-4-en-1,3-dionů využívá Knoevenagelovu kondenzační reakci příslušně substituovaného aromatického aldehydu a komerčně dostupného cyklopent-4-en-1,3-dionu.

(1) Tichotova, L.; Matousova, E.; Spulak, M.; Kunes, J.; Votruba, I.; Buchta, V.; Pour, M. *Bioorg Med Chem Lett* **2011**, 21, 6062.

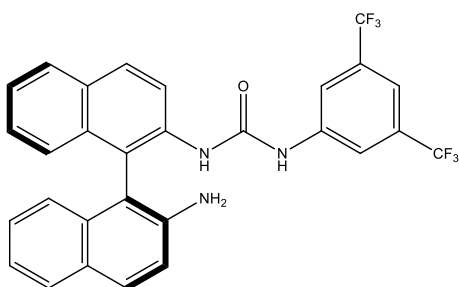


Schema 1. Coruscanon A, obecná syntéza CPD derivátů

Sekce : Organická chemie B2

Nesymetricky substituované deriváty **1,1'-binaftalen-2,2'-diaminu**

Autor: Adéla Sedlářová
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.



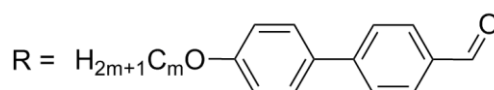
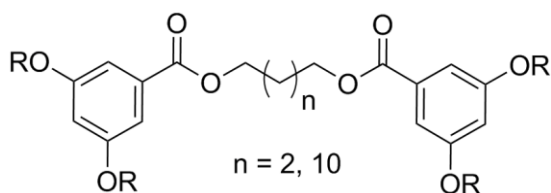
Je známo, že močovinné deriváty 1,1'-binaftalen-2,2'-diaminu enantioselektivně interagují s chirálními molekulami nesoucími akceptory vodíkové vazby. Nesymetrická substituce výchozího diaminu by umožnila lépe přizpůsobit výslednou molekulu. Cílem mé práce tedy bylo připravit molekulu nesoucí pouze jednu močovinnou skupinu a jednu volnou aminoskupinu, která by umožnila následné syntetické transformace podle požadovaného použití.

Sekce : Organická chemie B2

Syntéza kvapalné kryštalických dimérů na bázi **3,5-dihydroxybenzoové kyseliny**

Autor: Juraj Malinčík
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Michal Kohout, Ph.D.

Kvapalné kryštály sa stali neoddeliteľnou súčasťou elektrotechnického priemyslu. Dnes sú predmetom záujmu molekuly, tvoriace biaxiálne nematickú fázu, ktorá je zaujímavá z dôvodu potencionálneho zrýchlenia odozvy kvapalné kryštalického displeja na použité elektrické napätie. Doposiaľ pripravené molekuly vo svete vykazovali túto fázu pri teplotách nad 200 °C. Naším cieľom bolo pripraviť molekuly, tvoriace biaxiálne nematickú fázu pri nižších teplotách. Základom molekúl bola 3,5-dihydroxybenzoová kyselina, z ktorej bola pripravená séria molekúl nižšie uvedenej obecné štruktúry.



Sekce : Výroba léčiv a technologie organických látek

Multimolekulární screening kondenzátu vydechaného vzduchu

Autor: Filip Pavlíček
Ročník: B1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Kamila Syslová



Součástí moderní medicínské diagnostiky je sledování specifických molekul, neboli biomarkerů, které se vyskytují v tělních tekutinách (např. krevní plasma, kondenzát vydechaného vzduchu) ve zvýšených či snížených koncentracích jako důsledek odehrávajících se patologických procesů (např. onemocnění spojená s plicní obstrukcí). Práce se zabývá jak kvantifikací známých biomarkerů vznikajících poškozením fosfolipidových membrán (např. leukotrieny, lipoxiny, MDA, HNE, HHE a alifatické aldehydy), aminokyselin (o-Tyr, NO-Tyr a 3-Cl-Tyr), a nukleových kyselin (5-OHMeU, 8-OHG a 8-OHdG), tak i nalezením metabolických změn (metabolický fingerprinting) odehrávajících při patologických procesech. Princip metody je založen na kombinaci vhodné separační techniky (extrakce na pevné fázi – SPE) s citlivou detekční metodou na bázi hmotnostní spektrometrie. Nedílnou součástí práce byla klinická studie, jejímž cílem bylo porovnat koncentrační hladiny biomarkerů u pacientů s chronickou obstrukční plicní nemocí a kontrolní skupiny zdravých jedinců. Veškerá data byla statisticky zpracována metodou PCA (Principal Component Analysis).

Sekce : Výroba léčiv a technologie organických látek

Príprava a charakterizácia lipidických nanočastíc s obsahom ceramidu 6

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



Nektáre dermatologické ochorenia, napr. atopická dermatitída či lupienka sú spojené so zníženou hladinou ceramidu v koži, čo vedie k defektnej kožnej bariére a vyvoláva vleké zápal. Jednou z možných terapií by mohla byť topická aplikácia ceramidom, ktorá je viac menej limitovaná obmedzeným vstrebávaním ceramidom do kože. Je preto v centru záujmu nájst metódy napomáhajúci prieniku ceramidom do kože. Cieľom tejto práce bolo vyvinúť stabilné lipidové nanočastice obsahujúce ceramid v maximálnej možnej koncentrácii. Pre prípravu lipidických nanočastíc bola využitá metóda fázovej inverzie za zvýšenej teploty. Ďalej bol skúmaný vplyv pomeru lipidických zložiek ku rozpúšťadlu a aj zmena pH zmesi obsahujúcej ceramid 6 alebo ekvimolárnu zmes ceramidu 6, cholesterolu a kyseliny steárovej. Analyzovala som zmeny veľkosti a polydisperzity častíc v týchto systémoch v časovej závislosti. Podarilo sa mi pripraviť častice s 0,7% obsahom ceramidu 6. Väčšina pripravených častíc bola stabilná po dobu jedného mesiaca. Tato koncentrácia je približne 6x vyššia ako v súčasných prípravkoch dostupnými na trhu.

Sekce : Výroba léčiv a technologie organických látek

Mokrý oxidace odpadních vod

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



Jedním z nejdiskutovanějších témat dnešní doby jsou průmyslové odpady, jejichž množství rok od roku narůstá. Hlavním problémem je co s odpady udělat. Mokrá oxidace je pro tento problém efektivní metoda, protože vede ke zničení stálých a složitých sloučenin.

Konkrétně papírenský průmysl nebo odpadní vody se potýkají s obsahem látek, které jsou biologicky špatně odbouratelné, jako je např. lignin. Již používaná metoda spalování velmi zředěných odpadů je sice ekologicky schůdná, ale velmi finančně náročná. Mokrá oxidace odpadních vod vede ke snížení chemické spotřeby kyslíku (CHSK). Odpadní vody mají zpravidla tyto hodnoty velmi vysoké (cca přes 100 000) a pokud by se tato voda v nezměněném stavu poslala na čističku, nebyla by důkladně vyčištěna anebo by čištění trvalo příliš dlouho. Mokrá oxidace se již v průmyslu využívá, ale reakční podmínky jsou velmi specifické, protože je ovlivňuje typ látek, které je potřeba oxidovat.

Cílem práce bylo provedení nekatalyzované mokré oxidace černého louhu z OP papíren Olšová a vyzkoušení stejné metody na odpadní vodu z výroby kyseliny akrylové v Sokolově. Důležitá byla také správná volba analytické metody. Samotná mokrá oxidace se prováděla za různých reakčních podmínek v autoklávu.

Sekce : Výroba léčiv a technologie organických látek

Studium chemisorpce aminů na povrch Co-, Ni- a Cu-katalyzátorů

Autor: Jakub Havlík
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Dana Bílková; Ing. Jiří Krupka, Ph.D.



Prezentovaná práce se zabývá studiem chemisorpce aminů (butylaminu, dibutylaminu, tributylaminu) a butyronitrilu na povrch kovových katalyzátorů. Studované katalyzátory jsou tvořeny třemi hmotnostními procenty kovu (Co, Ni, Cu) nanesenými na silikátovém nosiči. Ke studiu byla použita metoda teplotně-programované desorpce (TPD) v prostředí helia na přístroji AutoChem II 2920, který byl vybaven teplotně-vodivostním detektorem (TCD) k neustálému monitoringu odchodu desorpčních produktů z kolony během TPD. Sledovanými parametry bylo množství desorpčních produktů a síla sorpce jednotlivých aminů, vyjádřená teplotou maximální rychlosti desorpce. Množství naadsorbovaných aminů na vzorek katalyzátoru bylo pro lepší porovnatelnost výsledků vyjádřeno jako množství naadsorbovaných aminů na gram čistého kovu. Všechny získané výsledky byly porovnány s výsledky adsorpce aminů na povrch Pt-katalyzátoru, které byly naměřeny již dříve na ÚOT VŠCHT Praha. Množství butylaminu adsorbovaného na povrch kovu je stejné pro všechny studované katalyzátory ($\approx 8 \text{ mmol} \cdot \text{g}_{\text{kov}}^{-1}$). Výsledky na kobaltu (míra a síla sorpce) jsou podobné jako na platině, což je zajímavé vzhledem k jejich rozdílným katalytickým vlastnostem při hydrogenačních procesech poskytujících aminy.

Sekce : Výroba léčiv a technologie organických látek

Vliv použité technologie lisování tablet na disoluční charakteristiky multikomponentního léčiva

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



Práce se zabývá studiem vlivu formulace a parametrů zpracování tabletovin multikomponentního léčiva besylátu amlodipinu a telmisartanu na disoluční charakteristiky pevné lékové formy tohoto léčiva. Byly zkoumány dvě tabletoviny, ze kterých se tablety na experimenty lisovaly při různých tlacích. Testované tablety byly podrobeny zátěžovým stabilitním testům při zvýšené teplotě a vlhkosti a byly u nich provedeny disoluční zkoušky. Dále byly testovány z několika hledisek. Zkoumáno bylo uvolňování besylátu amlodipinu z tablet, obsah API v tabletách a rozpad a porozita tablet v závislosti na použité tabletovině a lisovacím tlaku. Experimenty byly prováděny na disolučním přístroji, vzorky byly analyzovány pomocí kapalinového chromatografu a porozita byla zjišťována pomocí heliového pyknometru a rtuťového porozimetru. Bylo zjištěno, že stanovení obsahu amlodipinu je citlivé na kvalitu upráškování vzorku. Tlak, při kterém jsou tablety lisovány, je významným faktorem při uvolňování API z tablet. Zhoršený rozpad tablet je způsoben zvýšenou vlhkostí v přítomnosti alkalických excipientů. Uvolňování API z tablety je ovlivněno podílem největších pórů obsažených v tabletách.

Sekce : Výroba léčiv a technologie organických látek

Použití rutheniových katalyzátorů pro přípravu Mayolu

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



Vonná látka Mayol® (Firmenich SA, Ženeva) neboli 4-isopropylcyklohexylmethanol má široké uplatnění v mnoha odvětvích parfumerského průmyslu.

Syntéza Mayolu z kuminaldehydu vychází z heterogenně katalyzované hydrogenace za použití kovových nosičových katalyzátorů. Při realizaci reakce byly použity katalyzátory Ru/C a Ru/Al₂O₃, které vykazují vysokou efektivitu při hydrogenaci benzenového jádra a karbonylové skupiny za nízkých reakčních teplot. Zavedení zmíněných katalyzátorů do průmyslu brání jejich pozvolná deaktivace při opětovné aplikaci.

Cílem práce bylo vyhodnocení možnosti opakovaného použití rutheniových katalyzátorů pro heterogenní hydrogenaci kuminaldehydu na Mayol. Byla sledována závislost selektivity a výtěžku reakce na četnosti použití katalyzátoru v reakcích. Katalyzátor byl vždy promyt ethanolem, vysušen a použit pro následnou hydrogenaci. Bylo zjištěno, že selektivita reakce se opakovaným použitím významně neliší, ale výtěžek reakce v průběhu pokusů klesal. U katalyzátoru Ru/C byla pozorována změna výtěžku reakce na jeho skladování mezi pokusy. Ponecháním katalyzátoru v reakční směsi, oddělením a okamžitým použitím v dalším pokusu byl výtěžek reakce u 4krát použitého katalyzátoru srovnatelný s čerstvým katalyzátorem.

Sekce : Výroba léčiv a technologie organických látek

Příprava Silvialu

Autor: Martin Rott
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: prof. Ing. Libor Červený, DrSc.



Cílem práce byla dvoukroková příprava *p*-isobutyl-2-methylhydrokskořicového aldehydu, syntetické vonné látky používané v kosmetickém průmyslu k výrobě parfémových kompozic. Prvním krokem přípravy byla aldolová kondenzace *p*-isobutylbenzaldehydu s propanalem, jejíž produkt, *p*-isobutyl-2-methylskořicový aldehyd, byl dále hydrogenován.

V první části práce byly optimalizovány podmínky aldolové kondenzace *p*-isobutylbenzaldehydu s propanalem. Byl hledán vhodný katalyzátor, rozpouštědlo, teplota a vhodný způsob dávkování propanalu. Testovanými katalyzátory byly hydroxid sodný, draselný a methanolát sodný. Nejvyššího výtěžku (71 %) bylo dosaženo při reakci katalyzované hydroxidem sodným, methanolem jako rozpouštědlem, prováděné při teplotě 25 °C a za jednorázového přidávání propanalu ve 3 etapách s intervalem 15 minut.

Ve druhé části práce byly testovány podmínky hydrogenace *p*-isobutyl-2-methylskořicového aldehydu s použitím rutheniových katalyzátorů firmy Johnson Matthey (obsah Ru 5%). Tyto katalyzátory nebyly vhodné, neboť při hydrogenaci, kde byl hlavním produktem *p*-isobutyl-2-methylhydrokskořicový alkohol, byl žádaný *p*-isobutyl-2-methylhydrokskořicový aldehyd byl zastoupen v reakční směsi ve výtěžku menším než 5 %.

Sekce : Výroba léčiv a technologie organických látek

Nový přístup k heterogenizaci katalyzátorů pro asymetrickou hydrogenaci

Autor: Bc. Jaroslav Aubrecht
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Beáta Vilhanová; doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.



Homogenní katalyzátory typu $[\text{Ru}(\text{II})\text{Cl}(\eta^6\text{-aren})(N\text{-R-sulfonyldiamin})]$ (kde R = alkyl nebo aryl) jsou často využívány zejména v asymetrické hydrogenaci ketonů a iminů. Problémem je však jejich separace z reakční směsi, důsledkem čehož je kontaminace produktu těžkým kovem, a nemožnost recyklace často drahého katalyzátoru. Tento projekt je zaměřen na vyvinutí metody pro ukotvení těchto katalyzátorů na pevný nosič prostřednictvím kovalentní vazby. Vzniklý heterogenní katalyzátor je tak možné separovat z reakční směsi a následně recyklovat.

Primárně byl ve třech krocích připraven homogenní katalyzátor nesoucí 4-hydroxybutylovou skupinu a mesoporézní silikát SBA-15 jako pevný nosič. Byla optimalizována syntéza materiálu SBA-15 a jeho funkcionalizace 3-jódpropylovou skupinou potřebnou pro heterogenizaci. Následně byl potlačen jeho nežádoucí kyselý charakter silylací zbylých silanolových skupin. Finální heterogenizace je v principu reakce typu $\text{S}_{\text{N}}2$, mezi alkoholátem a alkyljodidem, probíhající v bazickém prostředí. Všechny meziprodukty i finální heterogenní katalyzátor byly charakterizovány rentgenovou difrakcí a fyzisorpcí dusíku při 77 K. Obsah jódu a ruthenia byl sledován hmotnostní spektrometrií s indukčně vázaným plazmatem. Připravený heterogenní katalyzátor byl úspěšně testován v asymetrické transfer hydrogenaci cyklického iminu.

Sekce : Výroba léčiv a technologie organických látek

Vliv bazicity rozpouštědel při přípravě perillového alkoholu

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



Projekt se zabývá přípravou perillového alkoholu – žádané látky s širokým spektrem využití. Perillový alkohol byl připraven štěpením β -pinenoxidu za katalytického působení anorganických dusičnanů nebo amonných solí anorganických kyselin v přítomnosti polárního aprotického rozpouštědla. V práci byl sledován vliv reakčních podmínek (rozpouštědlo, druh katalyzátoru, teplota, přítomnost kyseliny dusičné v reakční směsi) na průběh reakce s cílem navržení optimálních reakčních podmínek. Z provedených měření vyplynulo, že bazicita rozpouštědla pozitivně ovlivňuje výši výtěžku perillového alkoholu. Během experimentů vyšlo najevo, že přítomnost kyseliny dusičné v reakční směsi má pozitivní vliv na rychlost reakce. Je vhodné použít 5 – 10% hmotnostní podíl kyseliny dusičné vzhledem k substrátu. Nejvyššího relativního výtěžku perillového alkoholu a jeho izomeru anthemolu (81 %) bylo dosaženo za následujících podmínek: rozpouštědlo DMF, katalyzátor dusičnan amonný, teplota 80 °C, 10 hm.% kyseliny dusičné a reakční doba 40 minut při totální konverzi β -pinenoxidu.

Sekce : Výroba léčiv a technologie organických látek

Příprava hexylcinnamylaldehydu

Autor: Karlíčková Adéla
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: prof. Ing. Libor Červený, DrSc.



Práce se zabývá přípravou vonné látky (2E)-2-benzylidenoktanal, známou pod názvem hexylcinnamylaldehyd. Jedná se o látku vyznačující se svěží jasmínovou vůní, používanou v kosmetickém průmyslu zejména k výrobě parfémů a šampónů. Připravuje se pomocí aldolové kondenzace, výchozími látkami jsou benzaldehyd a n-oktanal. Aldolová kondenzace je bazicky nebo kysele katalyzovaná reakce, jejímž produktem je nenasycený aldehyd nebo keton. Preferovanější jsou bazicky katalyzované reakce, při kterých nedochází ke kondenzacím do vyšších stupňů. Jako bazické katalyzátory byly použity KOH, NaOH, K_2CO_3 , Na_2CO_3 nebo butylamin rozpuštěné ve vodě, nebo organických rozpouštědlech. Reakce byla prováděna s přebytkem benzaldehydu. Oktanal byl do reakční směsi postupně přidáván, aby nedocházelo k nežádoucí autokondenzační reakci. Nežádoucí je i tzv. Cannizzarova reakce benzaldehydu probíhající v bazickém prostředí. Byl sledován vliv množství katalyzátoru, rozpouštědla, teploty a poměru reaktantů na výtěžek žádaného produktu. Při použití 55 % vodného roztoku KOH (mol. poměry: katalyzátor : benzaldehyd = 0,28:1; rozpouštědlo CH_3OH : benzaldehyd = 1:0,26; benzaldehyd : oktanal = 1,2:1) byl dosaženo 98 % selektivity reakce. Navržené optimální podmínky budou sloužit k poloprovoznímu testování v Aroma Praha, a.s.

Sekce : Výroba léčiv a technologie organických látek

Studium účinku vybraných modulátorů absorpce na izolované stratum corneum

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



Transdermální aplikace léčiv má oproti jiným aplikačním cestám jisté výhody, hlavním problémem je ovšem extrémní nepropustnost nejsvrchnější vrstvy kůže stratum corneum (SC) pro léčiva. Urychlovače transdermální absorpce jsou látky, které mohou reverzibilně narušit strukturu SC, čímž napomáhají průniku léčiva. Cílem této práce je zavést metodiku izolace SC z nativní lidské a prasečí kůže a poté charakterizace izolovaného SC pomocí infračervené spektroskopie a rentgenové difrakce. První částí práce bylo nalezení optimálních podmínek izolačního postupu SC, především pak otázka omývání hexanem. Bylo zjištěno, že vzorky lidské kůže po izolaci promyté hexanem mají více uspořádané lipidy a obsahují více trans konformerů. Paradoxně, u vzorků prasečí kůže je tomu naopak. Rovněž bylo zjištěno, že prasečí kůže obsahuje více gauche konformerů než kůže lidská. V poslední fázi práce byl pomocí nově zavedených metodik sledován vliv modelového transdermálního urychlovače mentholu na SC. Menthol vyvolal změny v IČ spektrech i v rentgenových difraktogramech. Závěrem lze konstatovat, že byla nalezena vhodná metodika izolace SC. Obě zvolené charakterizační metody jsou vhodné pro studium mechanismu účinku transdermálních urychlovačů přímo na izolovaném SC.

Sekce : Výroba léčiv

Vývoj umělých ceramidových membrán jako substrátů pro testování transdermální permeace

Autor: Barbora Filková
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Mgr. Jarmila Zbytovská, Dr. rer. nat.

Vlastnosti kožní bariéry jsou založeny na konkrétním složení a obsahu lipidů v nejsvrchnější části kůže - stratum corneum (SC), obsahující ceramidy. Propustnost kůže pro léčiva se běžně testuje na Franzových difuzních celách na lidské či zvířecí kůži. V poslední době se uvažuje o náhradě nativní kůže umělými membránami s definovaným složením a vlastnostmi. Cílem této práce je vyvinout umělou membránu analogickou složení kůže a otestovat její permeabilitu pro modelová léčiva. Na experimenty byly použity dva typy ceramidů (Cer [AP], Cer [NP]). Tyto ceramidy (buď samostatně, nebo ve směsi), byly nanášeny společně s mastnou kyselinou a cholesterolem na polykarbonátové filtry za účelem vytvoření homogenních membrán. Permeace dvou modelových léčiv theofylinu (TH) a indometacinu (IND) přes připravené membrány byla sledována pomocí Franzových difuzních cel. Vzorky byly odebírány v časovém intervalu 2 hodiny a analyzovány pomocí vysokoúčinné kapalinové chromatografie (HPLC). Nejvyšší propustnost pro obě léčiva jevila membrána založená na samotném Cer [AP]. Nejméně propustná membrána, tedy ta s vlastnostmi nejvíce se blížícími nativní kůži, byla směsná membrána s Cer [AP] a Cer [NP], na které byla poté otestována aktivita transdermálního urychlovače absorpce L-Pro2.

Sekce : Výroba léčiv

Vliv lubrikantů na lisování a vlastnosti tablet

Autor: Bc. Kateřina Langrová
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: doc. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.

Lubrikanty neboli mazadla jsou excipienty, které snižují tření a zabraňují adhezi tabletoviny a vyrobených tablet na lisovací zařízení, a tím usnadňují proces lisování. Zároveň však ovlivňují vazné síly mezi částicemi tabletoviny a ovlivňují tak i vlastnosti výsledných tablet. Je známo, že uvedené charakteristiky jsou ovlivněny nejen typem a množstvím lubrikantu, ale i jeho disperzí v tabletovině. Proto bylo cílem této práce prostudovat vliv mísení tabletoviny na charakteristiky lisovacího procesu a výsledných tablet.

V této práci byl jako pilotní lubrikant vybrán stearan hořečnatý, patřící mezi nejčastěji používané lubrikanty ve farmaceutickém průmyslu. Jako modelové látky byly pro své odlišné vlastnosti zvoleny bezvodá laktóza, mikrokrytalická celulóza, a paracetamol. Při lisování tablet byly měřeny silové charakteristiky lisovacího procesu: průběh lisovací síly (F_L) po dráze, smyková pevnost adheze na lisovací trn (F_D) a ejekční síla tablety z matrice (F_E). Vliv lubrikantu byl sledován z hlediska různého obsahu lubrikantu a z hlediska doby mísení. Měření byla provedena též pro různé frakce velikosti částic lisovaného materiálu. Výsledky ukazují, že závislost lubrikačního efektu a pevnosti tablet na době mísení jsou navzájem různě citlivé a vytvářejí tak prostor pro optimalizaci vlastností tabletoviny.

Sekce : Výroba léčiv

Optimalizace syntézy biologicky aktivního aminu z fenonu „oximovým postupem“

Autor: Ondřej Matuška
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Martin Kindl; doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Syntéza sloučenin obsahující aminovou funkční skupinu je dnes již velmi dobře prozkoumána a uplatňována v řadě odvětví chemického průmyslu, zvláště pak v oblasti chemických specialit. Postupy, jež lze v této oblasti považovat dnes za nejvíce využívané jsou například příprava aminu redukcí nitrilové skupiny, syntézy s využitím Grignardova činidla nebo například reduktivní aminace karbonylových sloučenin. V předkládané práci byla prováděna optimalizace přípravy substituovaného methylaminu z výchozího ketonu přes methanon oxim. V první řadě byly zjišťovány nejpříznivější reakční podmínky pro přípravu oximového prekursoru dle Vogela, především množství a poměry výchozích látek. V další fázi práce byl připravený oxim podroben redukcím za pomoci různých chemických redukčních činidel (LAH, NaBH_4 , atd.), za účelem získání požadovaného aminu. Kromě využití chemických redukčních činidel byla testována i redukce na typických hydrogenačních katalyzátorech za použití plynného vodíku, jak při atmosférickém, tak zvýšeném tlaku. Z poznatků získaných z této práce byl navržen postup pro kompletní syntézu důležité biologicky aktivní látky, jenž je v současné době předložen k patentovému chránění.

Sekce : Výroba léčiv

Metoda stanovení markerů oxidačního stresu inkorporovaných v biomakromolekulách

Autor: Miloš Mikoška
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Kamila Syslová; doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Proteiny a nukleové kyseliny tvoří podstatu celého lidského organismu a jakékoliv jejich poškození představuje nebezpečí pro zdraví jedince či přímo značí patologický stav. Jako biomarkery poškození proteinů jsou všeobecně uznávány struktury vycházející z aminokyseliny tyrosinu; biomarkery poškození nukleových kyselin jsou oxidované nukleosidy mající za základ guanin a uracil. Problémem při stanovování těchto látek je jejich nízká četnost výskytu ve srovnání s nepoškozenými stavebními kameny proteinů a nukleových kyselin. Tato skutečnost však zdaleka nesnižuje jejich význam - podobně jako u karcinogenů se jistě nikdo neodváží stanovit jejich mezní bezpečnou hodnotu. Vyvinutá metoda je založena na důsledném propojení přípravy vzorku a LC-MS analýzy. Analyzované biomarkery jsou uvolněny z makromolekul pomocí enzymatické reakce, následně jsou podrobeny derivatizační reakci a separovány pomocí vysokoúčinné kapalinové chromatografie za účelem následné kvantitativní hmotnostně spektrometrické analýzy. Takto získané koncentrační hladiny nejlépe odráží rozsah poškození biomakromolekul u studovaných subjektů.

Sekce : Výroba léčiv

Vývoj a optimalizace senzoru pro monitorování sterilizační účinnosti VPHP procesu v reálném čase

Autor: Pavel Pícha
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Jiří Kovářík; doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Sterilizační a dekontaminační techniky založené na oxidačních vlastnostech peroxidu vodíku se zdají být perspektivní metodou pro degradaci nejrůznějších polutantů, ať už chemické nebo biologické povahy. Samotná detekce a naměřená hodnota koncentrace peroxidu vodíku v dekontaminovaném prostoru je nedostatečná pro průkaz sterilizační účinnosti. Stejně tak stěry ze sterilizovaných povrchů jsou nevhodné a to pro svoji neekonomičnost. Proto je v současné době jedinou validovanou metodou aplikace bioindikátorů založených na referenčních mikroorganismech naadsorbovaných na nosičích. Jejich nevýhodou je následné dlouhé zpracování výsledků spočívající v kultivaci vzorků bioindikátorů. V této práci jsem se zamýšlel nad možnostmi nahrazení stávajících indikátorů, volbou přijatelného nosiče a optimalizace přípravy nového indikátoru. Jako vhodné se jeví použití organických barviv, které jsou v oxidačním prostředí degradovány, a tím dochází ke změně zabarvení. Tato změna je detekována a vyhodnocena kolorimetricky a zároveň může být zaznamenávána on-line. Po porovnání se stávajícími bioindikátory by tato metoda měla vést k řádově rychlejšímu vyhodnocení účinnosti sterilizačního procesu a tak k významnému snížení nákladů VPHP procesu.

Sekce : Výroba léčiv

Smíšené aldolové kondenzace substituovaných benzaldehydů katalyzované pevnými bazickými katalyzátory

Autor: Bc. Lada Sekerová
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Eva Vrbková; Ing. Eliška Vyskočilová, Ph.D.

Aldolová kondenzace je hojně využívanou reakcí v přípravě některých vonných a biologicky aktivních látek. Tato reakce může být katalyzována jak bazicky, tak kysele. V průmyslu se nejčastěji využívá homogenní katalýzy (KOH, NaOH, atd.), která s sebou ovšem nese mnohá negativa (obtížná separace katalyzátoru, vysoká spotřeba vody, negativní vliv na životní prostředí, aj.). Použití heterogenních katalyzátorů, které je předmětem této práce, se jeví jako vhodnější z důvodu snadnější separace katalyzátoru a výhodou je i možnost jeho opakovaného použití.

Práce byla zaměřena na studium vlivu několika různých bazických katalyzátorů na průběh aldolové kondenzace substituovaných benzaldehydů (BAL) s propanalem (PAL), byl sledován vliv molárních poměrů reaktantů a druhu katalyzátoru. Pomocí analýzy na plynovém chromatografu byly hodnoceny parametry konverze substituovaného benzaldehydu a selektivity vůči žádanému produktu, kterým byl kondenzát substituovaného benzaldehydu s propanalem. Jako vedlejší produkt byl v reakci různou měrou zastoupen kondenzát dvou molekul propanalu. Jako nejvhodnější molární poměr reaktantů byl určen BAL:PAL = 1:2. Za použití katalyzátoru MgO bylo dosaženo nejlepší kombinace selektivit a konverzí.

Sekce : Výroba léčiv

Vliv excipientů na kompakťát při reformulaci léčiva

Autor: Jan Tomas
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: doc. Ing. Petr Zámotný Ph.D.; PharmDr. Tomáš Rysl, Ph.D.

Cílem této práce byla změna výrobního postupu tabletoviny modelového léčivého přípravku z nyní používané vlhké granulace na suchou granulaci (tzv. kompakťaci). Důvodem této změny je snaha o zlepšení stability účinné látky, zlepšení vybraných parametrů tablet a snaha o zrychlení výroby přípravku s menší energetickou náročností procesu, a s tím související snížení výrobních nákladů. Hlavním požadavkem bylo upravení výrobního postupu s minimálním zásahem do složení tabletoviny při zachování stejných kvalitativních a kvantitativních vlastností tablet. Byl sledován vliv jednotlivých excipientů, kompakťáčích parametrů (tlak, rychlost otáčení válců a velikost ok síta) na vybrané vlastnosti tabletoviny jako je tokovost směsi nebo distribuce velikosti částic. U tablet připravených z těchto směsí byly sledovány parametry, jako je pevnost, oděr, rozpad nebo hmotnostní stejnoměrnost. Na základě výsledků z laboratorního testování byly vybrány potencionálně nejvhodnější šarže, které byly dále testovány ve větším měřítku a nyní je zkoumána stabilita účinné látky v tabletách z nich vyrobených a možnost uplatnění ve výrobním procesu.

Sekce : Výroba léčiv

Výzkum rozpadových vlastností tablet s obsahem paracetamolu, polyvinylpyrrolidonu a kyseliny stearové

Autor: Kristýna Váňová
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: doc. Ing. Petr Zámotný Ph.D.

Cílem práce bylo ověření stability fyzikálních vlastností tablet s obsahem paracetamolu, polyvinylpyrrolidonu a kyseliny stearové. Konkrétně se jednalo o studium skutečnosti, že tablety po své přípravě výrazně mění své rozpadové charakteristiky v závislosti na svém stáří.

Pro experimenty byly připraveny modelové formulace, skládající se z 3 výše uvedených látek. Nejprve byl vlhkou granulací připraven granulát s obsahem paracetamolu a polyvinylpyrrolidonu. Ten byl následně vysušen na požadovanou vlhkost a smíchán s kyselinou stearovou, čímž byla získána požadovaná tabletovina.

U tablet vyrobených lisováním tabletoviny byla stanovena doba rozpadu v závislosti na jejich stáří. Tím bylo zjištěno, že doba rozpadu se prodlužuje s rostoucím stářím tablet. Na základě výsledků DSC se předpokládá, že za toto chování je zodpovědná interakce kyseliny stearové a polyvinylpyrrolidonu, která tvoří skelnou fázi.

Tablety byly dále podrobeny analýze XRD, která vyloučila změnu krystalické struktury paracetamolu. Zároveň byl zaznamenán náznak vymizení difrakčních pásů kyseliny stearové, což potvrzuje předpoklad vzniku skelné fáze. Dále budou zkoumány souvislosti mezi lisováním, vznikem skelné fáze a mechanismem jejího působení na prodloužení doby rozpadu.

Sekce : Výroba léčiv

Vývoj nanokoloidních lipidových nosičů pro potenciální terapii atopické dermatitidy

Autor: Barbora Vondrášková
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Mgr. Jarmila Zbytovská, Dr. rer. nat.

Atopická dermatitida a další kožní onemocnění jsou spojena se sníženou hladinou lipidů, především ceramidů, ve stratum corneum. Ve většině případů je zahájena lokální léčba kortikoidy. Ty však mají řadu nežádoucích účinků a nemohou se užívat dlouhodobě. Vhodnou terapií by tedy mohla být topická aplikace ceramidů. Ovšem zde je problémem špatná dostupnost ceramidů do stratum corneum. Možným řešením této překážky je formulace ceramidů do nanokoloidních nosičů. Cílem této práce tedy byl vývoj stabilní mikroemulze obsahující ceramid VI a srovnání této metody s lipozomálními formulacemi. Pro tuto práci bylo připraveno několik různých formulací mikroemulzí z nichž pouze několik vykazovalo vlastnosti charakteristické pro nanoformy jako je velikost částic a index polydisperzity. Jednalo se o formulace obsahující PGCL4 jako základní surfaktant, 1,2-pentandiol a zastoupení ceramidu VI nejvýše 0,7%. Závěrem lze říci, že mikroemulze jsou snáze připravitelné a jejich příprava méně časově náročná, avšak nedokážou pojmout takové množství ceramidu VI, jako se podařilo inkorporovat do lipozomů. V současné době je náplní práce optimalizace formulace těchto nanokoloidních nosičů.

Sekce : Výroba léčiv

Příprava zrněného prášku pro speciální aplikátor doplňků stravy

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

Cílem této práce je připravit vhodný zrněný prášek s obsahem účinné látky, použitelný pro plnění aplikátorů zajišťujících uvolnění roztoku či suspenze účinné látky do konzumovaného nápoje. Vhodný zrněný prášek by měl vykazovat nízký oděr, rychlý rozpad a uvolnění účinné látky, a nízkou tlakovou ztrátu pro jím protékající kapalinu. Jako modelová látka pro formulaci byl využit kofein. Byly porovnány zrněné prášky získané dvěma základními metodami: suchou granulací a vlhkou granulací typu „low shear“. V případě suché granulace byl kofein postupně smíchán s dalšími pomocnými látkami v 3D mísiči, poté byla provedena kompaktace pomocí ručního hydraulického lisu a vzniklé kompakty byly rozdrčeny a síťovány. Při low shear granulaci byl kofein postupně smíchán s dalšími pomocnými látkami v mísiči Turbula, poté byl přidán vodný roztok pojiva nebo voda a směs byla mísená za vysokých otáček až do vzniku granulátu. U výsledných produktů byl hodnocen oděr, rozpad, pevnost a distribuce částic. Produkty připravené metodou suché granulace měly rychlý rozpad, nízký oděr a vhodnou pevnost, ale distribuce částic byla nevyhovující. Metodou vlhké granulace vznikly produkty s lepšími mechanickými vlastnostmi, avšak s pomalejším rozpadem, kvůli obtížím s použitím rozvolňovadel.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Porovnání prostupnosti nativní a tetované kůže vybranými léčivy

Autor: Dominik Čapkovič
Ročník: B2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Mgr. Jarmila Zbytovská, Dr. rer. nat.

Tetování je velmi populární trend, dle statistik je v dnešní době téměř 29 % lidí tetováno. S tím jsou spojena i možná rizika narušení nativní kůže. Cílem práce bylo porovnat prostupnost nativní a tetované kůže pro modelové léčivé látky – indomethacin a theofylin. Permeace vybraných látek byly zkoumány ve Franzových difúzních celách. Franzova cela má definovanou permeační plochu a skládá se z donorové a akceptorové části. Mezi ně byla vložena kůže z prasečích uší simulující kůži lidskou. Pro každou léčivou látku bylo připraveno 6 Franzových cel, 4 s tetovanou kůží a 2 s nativní kůží, vše bylo temperováno na teplotu povrchu lidského těla. Jako donorové vzorky byly připraveny 2,5% suspenze indomethacinu a 5% suspenze theofylinu v 60% vodném roztoku propylengykolů (v/v). Akceptorová část byla naplněna fosfátovým pufrem. Permeace byla zahájena nanesením donorového vzorku na kůži, experimenty trvaly 48 hodin, přičemž odběry akceptorové fáze byly prováděny ve stanovených časových intervalech. Tyto vzorky byly analyzovány metodou HPLC. Před samotným experimentem jsme provedli měření impedance připravených kůží. U tetovaných kůží byl naměřen vyšší odpor, což značí horší prostupnost pro léčiva.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Nové Ru(II) katalyzátory pro asymetrickou transfer hydrogenaci 3,4-dihydroisochinolinů

Autor: Radka Hrdličková
Ročník: B3
Ústav: Organické technologie
Školitel: Bc. Ondřej Matuška; doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

V současné době představuje syntéza opticky čistých chirálních sloučenin velice frekventovanou oblast chemického průmyslu zabývajícího se přípravou biologicky aktivních látek, především pak v oblasti průmyslu farmaceutického. Předkládaná práce je zaměřena na studium molekulárních strukturních vlivů při asymetrické transfer hydrogenaci (ATH) na Noyoriho rutheniových katalyzátorech typu $[\text{RuCl}(\eta^6\text{-}p\text{-cymen})\text{TsDPEN}]$, kde TsDPEN = *N*-tosyl-1,2-difenylethylen-1,2-diamin. V projektu byla vyvinuta metoda pro obměňování sulfonylové části katalyzátoru a následně byly syntetizovány nové katalyzátory, jenž byly porovnány s původním Noyoriho katalyzátorem a testovány v ATH dvou prochirálních substrátů: 1-methyl-3,4-dihydrosichinolinu a 6,7-dimethoxy-1-methyl-3,4-dihydroisichinolinu, kde jako zdroj vodíku sloužila azeotropní směs triethylaminu a kyseliny mravenčí (v molárním poměru 2:5). Výsledky kinetických měření, kterými jsou reakční rychlosti a enantiomerní přebytek (ee), byly získány s využitím plynové chromatografie s achirální kolonou. Struktura všech připravených ligandů, resp. katalyzátorů byla ověřena pomocí standardních analytických metod, jako jsou FT-MS nebo NMR.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Vývoj prototypu nového typu generátoru par peroxidu vodíku

Autor: Jakub Pekárek
Ročník: B1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Jiří Kovářík; doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Pro efektivní VPHP (Vapour Phase Hydrogen Peroxide) dekontaminační cyklus je nutné zajistit převod roztoků peroxidu vodíku do plynné fáze tzn. 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. V současnosti se kapalný peroxid vodíku odpařuje rozstřikováním horkou tryskou do proudu horkého vzduchu nebo nástřikem na rozžhavenou kovovou plotnu. Obě tyto metody zahrnují použití teplot přesahujících 150 °C, což má za následek vysokou intenzitu rozkladu peroxidu vodíku. Principem nově vyvíjeného přístroje je proudění suchého vzduchu o běžné teplotě s možným předehřevem a odpařování na inertním materiálu s velkým povrchem. Pro konstrukci byly testovány a následně zvoleny vhodné materiály, na jejichž povrchu se peroxid vodíku nerozkládá, a tudíž dochází k odpařování s vysokou účinností. Zkonstruovaný a experimentálně otestovaný prototyp nového typu generátoru par peroxidu vodíku byl následně inkorporován do průmyslového zařízení a byla prokázána jeho vyšší účinnost v reálných podmínkách, která vedla k zavedení do sériové výroby.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Katalytická dekompozícia pár peroxidu vodíku

Autor: Tomáš Skačányi
Ročník: B2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Jiří Kovařík; doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Na dekompozíciu pár peroxidu vodíku po VPHP dekontaminačnom procese sa v súčasnosti využívajú dva spôsoby - odvod pár pomocou vzduchotechniky, kde sa VPHP samovoľne rozkladá, na čo treba veľa čistého a sterilného vzduchu a taký cyklus vyžaduje veľmi výkonný ventilačný systém. Druhý spôsob - katalytická dekompozícia - je efektívnejšia pre zredukovaný čas cyklu, zredukovanú spotrebu energie a zníženú spotrebu vzduchu, avšak katalyzátory vhodné pre rozklad VPHP nie sú dostatočne rozšírené. Cieľom tejto práce bolo otestovať efektivitu dostupných katalyzátorov na bázy vzácnych kovov (Pt, Pd) ale aj vyvinúť nové riadovo menej nákladné na bázy MnO_2 , pripravované dvoma rôznymi spôsobmi, a efektivitu týchto katalyzátorov následne otestovať a porovnať s už existujúcimi. Ďalej boli testované aj samotné nosiče (Al_2O_3 , $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$) kvôli overeniu katalytickej účinnosti samotného veľkého aktívneho povrchu týchto nosičov. Experimenty boli realizované pomocou stĺpca obsahujúceho katalyzátor pripojeného na zdroj VPHP, kde bol porovnávaný čas potrebný na dekompozíciu určeného množstva VPHP. Bolo zistené, že samotné nosiče majú pomerne slušnú katalytickú účinnosť, nie je teda nutné zavádzať veľmi nákladné vzácne kovy do štruktúry katalyzátorov. Naopak, vyvinutý burelový katalyzátor má až 30x vyššiu účinnosť ako ostatné testované katalyzátory.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Vývoj nanočásticové formulace indometacinu pro transdermální aplikaci

Autor: Aneta Vovesná
Ročník: B3
Ústav: Organické technologie
Školitel: Mgr. Jarmila Zbytovská, Dr. rer. nat.

Transdermální aplikace léčiv nabízí řadu výhod, jako je stabilní hladina léčiva v plazmě, nižší výskyt vedlejších efektů či snadnější dávkování. 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. K přípravě nanočástic byla použita technika PIT (teplota fázové inverze). Ta je založena na opakovaném dosažení teploty, kdy o/v emulze přejde na emulzi v/o. Prudkým zchlazením směsi dojde k uzavření léčiva do lipidových nanokapsul. Prvním krokem této práce byla optimalizace složení směsi pro tvorbu emulze s cílem dosažení maximální koncentrace indometacinu v částicích. Výsledná nanoemulze byla následně permeována přes prasečí kůži za účelem stanovení její prostupnosti kožní bariérou. Permeační experiment byl realizován ve Franzových difúzních celách a koncentrace prošlého léčiva byla stanovena metodou vysokoúčinné kapalinové chromatografie (HPLC). Pro srovnání byla provedena permeace indometacinu v suspenzní formě. Výsledky experimentu ukázaly, že nanoformulace léčiva prokazuje účinnější prostupnost kožní bariérou.

Příprava (nano)kompozitů grafen oxid/polyamid 6

Autor: Bc. Dominika Harabišová
 Ročník: M2
 Ústav: Polymerů
 Školitel: Ing. Lenka Malinová, Ph.D.; Ing. Jaroslav Minář

Grafen oxid je vrstevnaté plnivo, kterému je v posledních letech věnována značná pozornost. Očekává se, že jeho zavedením do polymerní matrice dojde ke zlepšení především mechanických a v omezené míře termických vlastností polymeru, a tím se rozšíří jeho další využití.

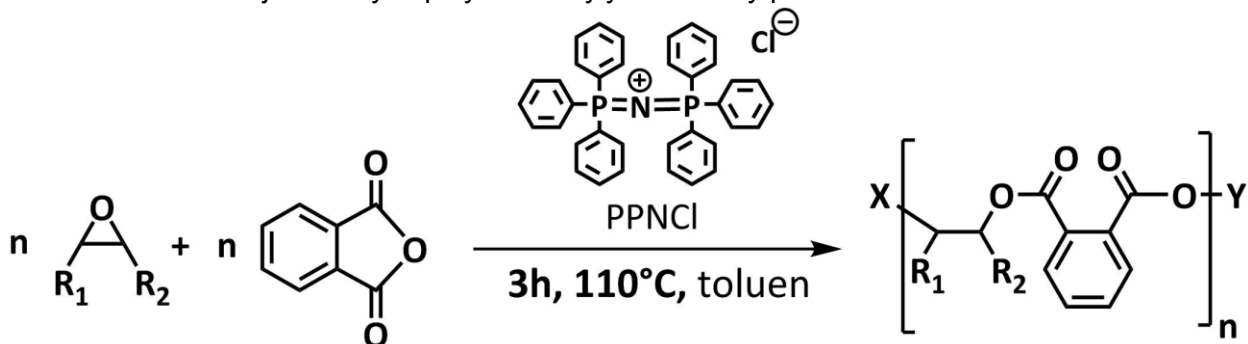
(Nano)kompozity ve formě fólií byly získány odpařením těkavého rozpouštědla (kyselina mravenčí, 2,2,2-trifluorethanol) z disperze grafen oxidu v roztoku polyamidu 6. Tyto fólie však obsahovaly defekty. Celistvé folie bez defektů byly získány přidáním chloridu vápenatého do disperze grafen oxidu v roztoku polyamidu 6. Dále byl zkoumán i vliv modifikace polyamidu 6 obsahujícího 20 % ϵ -kaprolaktonových strukturních jednotek. Připravené fólie byly charakterizovány z hlediska mechanických vlastností (modul, mez pevnosti, tažnost) a termického chování. Pro přípravu (nano)kompozitů grafen oxid/polyamid 6 byla vyzkoušena i metoda míšení v tavenině.

Příprava polyesterů kopolymerizací ftalanhydridu s epoxidy

Autor: Barbora Charvátová
 Ročník: B3
 Ústav: Polymerů
 Školitel: Ing. Zdeněk Hošťálek; Ing. Jan Merna, Ph.D.

Kopolymerizace epoxidů s anhydridy je jednou z metod umožňující řízenou přípravu polyesterů s širokým spektrem vlastností.

Cílem této práce bylo připravit (ko)polyestery kopolymerizací ftalanhydridu s epoxidy iniciovanou organickými bázemi, zejména bis(trifenylfosfiniminium) chloridem (PPNCI). Jako monomery byly použity ftalanhydrid (PA) v kombinaci s propylenoxidem (PO), cyklohexenoxidem (CHO) nebo styrenoxidem (SO), ke kterým byl dávkován iniciátor PPNCI v různých molárních poměrech. Molární hmotnost vzniklého polymeru byla určena SEC a konverze PA byla stanovena jednak gravimetricky a jednak pomocí ^1H NMR spektroskopie. Termické vlastnosti jednotlivých polyesterů byly stanoveny pomocí DSC.



Sekce : Chemie a technologie polymerů

Materiálová recyklace pneumatik

Autor: Hana Kohoutová
Ročník: M1
Ústav: Polymerů
Školitel: doc. Ing. Antonín Kuta, CSc.

Materiálová recyklace opotřebovaných pneumatik dnes bezproblémově probíhá do stadia získání pryžové drtě očištěné od kovu a textilu. Nabídka této drtě ale převyšuje poptávku, neboť možnosti jejího využití jsou v současné době omezené. Např. v gumárenském průmyslu jisté uplatnění nachází pouze velice jemné frakce, které se aplikují například do určitých částí některých nových pneumatik.

Při běžné technologii mletí je však obsah jemných frakcí poměrně nízký. Firma Lavaris vyvinula zařízení, které vstupní hrubou drť rozemele na jemnou drť o zrnitosti menší než 0,8 mm. Vhodným nastavením podmínek mletí lze upravit i charakter povrchu částic drtě. Předpokládáme, že takto modifikovaná drť může nalézt širší uplatnění v gumárenských aplikacích. Předmětem této práce bylo srovnání vlastností vulkanizátů získaných z jemné pryžové drtě s minimálním přídavkem aditiv. Výsledky ukázaly, že v této aplikaci je modifikovaná drť lepší.



Sekce : Chemie a technologie polymerů

Stabilita izolací automobilových vodičů

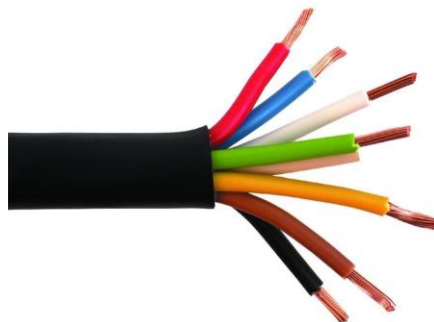
Autor: Adéla Kotková
Ročník: B3
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Radka Kalousková, CSc.

Výroba automobilů vyžaduje aplikaci vysoce kvalitních materiálů. Velmi významnou roli v produkci lehčích, levnějších, energeticky účinnějších a bezpečnějších vozidel hrají i plasty. V dnešní době, průměrný evropský vůz obsahuje kolem 16 kilogramů komponent z PVC, např. nátěry podvozku, tmely a podlahové moduly, kabelové provazce (izolace kabelů a průchodky), sedadla, přístrojové desky, výplně atd.

Tato práce je zaměřena na tepelnou stabilitu směsí PVC používaných pro výrobu autovodičů.

Tepelná stabilita izolační směsi je důležitou vlastností výrobku, je ovlivňována mnoha faktory, zejména použitým stabilizátorem. V laboratoři se pro měření tepelné stability využívá metoda potenciometrického stanovení úbytku HCl, v průmyslu našla široké uplatnění Congo red metoda, založená na změně pH. Dalším ukazatelem může být i barevná změna tepelně namáhané směsi.

Předmětem práce bylo stanovení tepelné stability izolační směsi PVC, s ohledem na množství a typ stabilizátoru ve směsi, různými metodami a vzájemné porovnání těchto metod.



Sekce : Chemie a technologie polymerů

Amfifilní kopolymery jako nosiče látek s biologickou aktivitou

Autor: Tomáš Kroupa
Ročník: B3
Ústav: Polymerů
Školitel: Mgr. Soňa Hermanová, Ph.D.

Amfifilní blokové polymery mají ve vodném prostředí schopnost spontánního uspořádání a tvorby polymerních micel. V případě resorbovatelných a biokompatibilních blokových polymerů mohou být tyto micely využity jako nosiče látek s biologickou aktivitou.

Tato práce je zaměřena na přípravu polymerů typu A-B-A, kde B je hydrofilní poly(ethylenoxid) a A je hydrofobní poly(trimethylenkarbonát-co-valerolakton). Změnou poměru komonomerů (TMC:VL) v hydrofobní části a podílu hydrofobních a hydrofilních bloků v kopolymery lze ovlivnit jak morfologii matrice, tak i charakter interakcí mezi polymerem a zabudovávanou látkou. Kopolymery byly připraveny polymerací za otevření kruhu katalyzovanou organickou bází, 1,5,7-triazabicyklo[4.4.0]dec-5-enem.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Poly(imid-siloxany) obsahující aditiva

Autor: Bc. Anna Patrova
Ročník: M2
Ústav: Polymerů
Školitel: prof. Ing. Petr Sysel, CSc.

Lineární polyimidy patří mezi materiály uplatňující se jako polymerní membrány pro dělení plyných směsí. Uspořádání řetězců vysoce větvených polymerů, které jsou za laboratorní teploty ve skelném stavu (tj. i polyimidů), ovlivňuje morfologii produktů s dopadem na jejich transportní vlastnosti pro plyny. Další cestou vedoucí k řízení transportu plynů membránami je kombinace polymerní matrice s vhodnými aditivami. Průvodním jevem kombinace polymeru ve skelném stavu a částicového aditiva je však často nekvalitní mezifázové rozhraní. Tento jev lze potlačit použitím kaučukovitého polymeru, např. poly(dimethylsiloxanu). Proto byla v této práci studována příprava a vlastnosti v literatuře dosud nepopsaného (vysoce) větveného poly(imid-siloxanu) připraveného z 4,4'-oxydifthalanhydridu, 4,4',4''-triaminotrifenylmethanu a 1,3-aminopropyltetramethyldisiloxanu (10 nebo 50% aminového podílu) a provedeno porovnání s vysoce větveným polyimidem na bázi 4,4'-oxydifthalanhydridu a 4,4',4''-triaminotrifenylmethanu. Vlastnosti těchto materiálů a těch s přídavkem 10 hm% aditiva se strukturou zeolitu (ZIF 8) nebo magnetitu ve formě částic byly charakterizovány IČ, SEM a dynamicko-mechanickou analýzou, termogravimetrií, pomocí trhačského stroje Instron a integrálního permeamtru (vodík, oxid uhličitý a methan).

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Hodnocení heterogenity dodávek přírodního kaučuku

Autor: Bc. Jan Šimek

Ročník: M2

Ústav: Polymerů

Školitel: doc. Ing. Antonín Kuta, CSc.

Konzultant: Ing. Jiří Brejcha (Mitas a.s.); Ing. Drahomír Čadek; Ing. Lucie Herzigová (Mitas a.s.)

Výroba přírodního kaučuku se u jednotlivých producentů často liší v mnoha faktorech. Od použitého klonu stromů, přes podmínky pěstování a zpracování latexu až po skladování. Všechny tyto faktory ovlivňují kvalitu a homogenitu výsledného materiálu. Hodnoty měřených veličin se z důvodu heterogenity v jednotlivých dodávkách mohou lišit. Z uvedeného důvodu mohou být závislé na místě odebrání vzorku.

Jedním z běžně užívaných ukazatelů pro kontrolu kvality kaučuku je viskozita Mooney. V této práci byl studován vliv místa odebrání vzorku na viskozitu Mooney a výsledky srovnány mezi čtyřmi producenty z Pobřeží Slonoviny, Libérie a Kamerunu.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Využití epoxidových pryskyřic v medicíně

Autor: Roman Šnajdar

Ročník: B3

Ústav: Polymerů

Školitel: Ing. Radka Kalousková, CSc.

Většina populace zná epoxidové pryskyřice jako výborná dvousložková lepidla a nátěrové hmoty. V těchto aplikacích se uplatní jejich hydrofobní vlastnosti. Předmětem naší práce je příprava epoxidových pryskyřic, které by mohly nalézt využití v medicíně.

V první fázi předkládané práce byly připraveny základní typy vytvrzených epoxidových pryskyřic ve formě fólií, na kterých byly testovány vybrané vlastnosti. Uvažujeme-li o aplikacích v tělním prostředí, jednou z nejdůležitějších vlastností je hydrofilita. Vedle sorpce vody byly dále studovány mechanické vlastnosti a tvorba gelu.

Cílem práce je určení optimálního složení epoxidové pryskyřice s dobrými mechanickými vlastnostmi a odpovídající hydrofilitou.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Hodnocení produktů tepelného namáhání gumárenských surovin a směsí pomocí GC/MS

Autor: Milada Teubnerová
Ročník: B3
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Zdeněk Hrdlička Ph.D.; Ing. Jiří Brejcha

V průběhu míchání gumárenských surovin a směsí se do ovzduší uvolňují plynné látky. Vzhledem k možnému riziku plynoucím z jejich účinku na lidské zdraví a životní prostředí, je třeba složení směsi definovat a provést hodnocení bezpečnosti. Pro případná další opatření nelze opomenout určení zdroje, zda je to již samotná surovina nebo látka vzniká v procesu. Tato práce navazuje na práci z minulého roku, kdy jsem určila hlavní produkty tepelného namáhání surovin. Letos jsem se zaměřila na zjednodušené směsi a s využitím poznatků z minulého roku jsem se snažila určit původ látek uvolňujících se ze směsí a následně je klasifikovat podle obdobných kritérií jako sloučeniny ze surovin. Látky, které se uvolňují, se dají rozdělit do několika skupin podle jejich původu. Jedná se o sloučeniny, které se v nezměněné podobě vyskytují v surovinách i ve směších a jejich zdroj se dá poměrně dobře určit, a sloučeniny, které tepelným namáháním vznikají (v surovinách se nevyskytují, ale ve směších ano) nebo zanikají tzn. rozkládají se na jiné produkty (v surovinách se vyskytují, ale ve směších již ne). K měření jsem využila metodu GC/MS, umožňující zahřát vzorky na teplotu, která je obvyklá při míchání směsí v provozu a měřit s dostatečnou citlivostí.

Sekce : Materiálové inženýrství I – Materiály pro elektroniku

Příprava grafenových vrstev metodou CVD

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

Grafen, jeden z alotropů uhlíku, je tenká šesterečná 2D síť uhlíkových atomů. Vykazuje unikátní fyzikální a chemické vlastnosti, díky kterým má široké využití v mikroelektronice, například v unipolárních tranzistorech a řadě jiných struktur (solární panely, senzory, Li-ion baterie atd). Grafen je považován za možného kandidáta v post-křemíkové elektronice.

Cílem práce je příprava grafenových vrstev metodou CVD (depozice z plynné fáze). Tato metoda je založena na rozkladu směsi plynů CH_4/H_2 za vysokých teplot ($900 - 1000\text{ }^\circ\text{C}$), kde CH_4 je zdrojem uhlíku. Pro povrchově katalyzovaný růst grafenu, využívající malou rozpustnost uhlíku v kovu, byla použita jako substrát měděná folie o tloušťce $25\text{ }\mu\text{m}$. Po procesu byly připravené vrstvy přeneseny pomocí PMMA na izolační substrát SiO_2/Si . K charakterizaci vrstev byla využita Ramanova spektroskopie.

Sekce : Materiálové inženýrství I – Materiály pro elektroniku

Příprava SERS prvků a měření reprodukovatelnosti jejich odezvy

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

Cílem práce je příprava senzorových prvků, které umožní řádově zvýšit citlivost odezvy standardních komerčně vyráběných ramanových analytických zařízení a vyhodnocení opakovatelnosti SERS odezvy změřené pomocí připravených prvků. Jako polymerní materiál substrátu byl vybrán polystyren (PS) a pro statistické vyhodnocení se měřily tři série, každá o deseti vzorcích. Opracování polymerní PS vrstvy a vytvoření optické mřížky bylo prováděno pulzním excimerovým KrF laserem při vlnové délce 248 nm s určitou energií, úhlem dopadu laserového svazku a počtem pulzů. Takto připravené vzorky umožní povrchové zesílení ramanovy analýzy. K následné depozici kovové vrstvy stříbra na povrch polymeru bylo využito vakuové naprašování. Vyrobené aktivní senzorové prvky budou ověřeny UV-Vis spektroskopií a z hlediska citlivosti ramanovy odezvy. Ta byla statisticky vyhodnocována opakovaně na každém vzorku.

Sekce : Materiálové inženýrství I – Materiály pro elektroniku

Periodické povrchové struktury pro fotoniku

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

Práce se zabývá přípravou periodicky strukturovaných povrchů s pozitivní plazmonovou aktivitou v UV oblasti pro použití v fotonice a při výzkumu biologických objektů. Důležitou roli v podobných výzkumech hraje metoda SERS (Surface Enhanced Raman Spectroscopy), jež je schopná detekovat stopová množství zkoumaných látek (celniční kontroly, markery onemocnění apod.), případně kombinovaná metoda SERS s AFM mikroskopií (tzv. TERS). Pro výzkum biologických látek (především medicínské aplikace) je vhodnější použít vlnovou délku zdroje v UV oblasti, kde absorbují např. DNA molekuly či bílkoviny. Tradiční kovy zlato nebo stříbro zde selhávají, neboť nemají plazmonový pík. Připravené substráty se strukturovaným povrchem jsou v této práci potaženy vrstvou kovu pro vybuzení plazmonu na povrchu, a dosažení tak větší odezvy SERS. Pro UV oblast jsou zkoumány kovy Pt, Pd, In a Al. Na rozdíl od použití nanočástic kovů v tekuté formě jakožto substrátů se pevné substráty vyznačují dobrou reprodukovatelností výsledků. Ty jsou diskutovány v rámci spolupráce s ČVUT Praha, kde probíhají teoretické simulace připravených uspořádaných struktur.

Sekce : Materiálové inženýrství I – Materiály pro elektroniku

Růst grafénu na povrchu struktury kov/SiC

Autor: Tomáš Hřebíček
Ročník: M2
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: doc. Ing. Petr Macháč, CSc.

Cílem práce je růst grafénových vrstev na povrchu kovu za pomoci segregace uhlíku z karbidu křemíku. Metoda je založena na reakci vhodného kovu se SiC ve struktuře kov/SiC. V procesu vysokoteplotního žhání kov vytvoří rozkladem SiC silicid, uhlík difunduje do metalizace. V periodě chlazení atomy uhlíku segregují na povrchu metalizace v podobě grafénu. Rozpustností uhlíku v metalizaci lze řídit tloušťku vytvořeného grafénu.

Při přípravě grafenu se nejprve napaří kov na povrch SiC při tlaku $3 \cdot 10^{-6}$ mbar v různých poměrech nanášeného kovu při snaze zachovat jednotnou tloušťku 200 nm napařovaného kovu. Napařované kovy byly nikl, kobalt a kombinace Ni/Ge a Co/Ge v molárních poměrech 95/5, 90/10, 80/20. Následuje žhání při teplotách 700 °C, 800 °C, 900 °C, 1000 °C při různých časových intervalech 10 sec, 60 sec, 300 sec a tlaku $3 \cdot 10^{-6}$ mbar. Ramanovou spektroskopií se ověřuje přítomnost grafénových vrstev na povrchu kovu. Grafén se identifikuje v Ramanově spektru třemi píky D,G a 2D. Tyto píky vypovídají o množství grafénových vrstev a poruchovosti vrstev.

Sekce : Materiálové inženýrství I – Materiály pro elektroniku

Pokročilá diagnostika vad vzorků vrstev při měření metodou van der Pauw a posuzování lokální citlivosti vzorků k poruchám souvislosti

Autor: Bc. Jan Pajtai
Ročník: M1
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Josef Náhlík, CSc.

Úkolem práce je pomocí vybraných sad vzorků se simulovanými vadami o různých velikostech a umístění, stanovit rezistivitu tenkých vrstev vzorků (Cu 35 μ m) metodou van der Pauw. Dále posoudit vliv lokalizace a tvaru defektu na správnosti výsledku měření a porovnat experimentálně získaná data s výsledky teoretických matematických simulací.

Sekce : Materiálové inženýrství I – Materiály pro elektroniku

Tepelné namáhání kovových vrstev na polymeru

Autor: Matěj Příbyl
Ročník: M1
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: doc. Ing. Petr Slepíčka, Ph.D.

Práce je zaměřena především na studium tenkých kovových vrstev (Au, Ag) na polymerních substrátech, fluorovaném ethylen-propylen kopolymeru (FEP) a polyetherimidu (PEI). Studovány byly původní polymerní fólie a kovové vrstvy naprášené v různých tloušťkách na polymerech, nezahřáté i tepelně namáhané.

Pomocí mikroskopie atomárních sil byla měřena povrchová morfologie kovových vrstev na těchto polymerech. Dále byly zjišťovány elektrické vlastnosti měřením plošné rezistance. Tloušťka vrstvy byla stanovena gravimetricky. Pro studium optických vlastností byla použita UV-VIS spektrometrie.

Sekce : Materiálové inženýrství II – Materiály pro bioaplikace

Povrchová modifikace PVDF a PFA a jejich vlastnosti

Autor: Bc. Andrea Cepková
Ročník: M1
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: doc. Ing. Petr Slepíčka, Ph.D.

Tato práce se zabývá studiem povrchových vlastností dvou polymerních materiálů, konkrétně polyvinylidenfluoridu (PVDF) a tetrafluoroethylene-perfluoro(alkoxy vinyl etheru) (PFA). V práci je studován vliv modifikace Ar plazmatem na polaritu a průběh stárnutí modifikovaných substrátů. Je také sledován vliv modifikace Ar plazmatem na morfologii povrchu a povrchovou drsnost.

Byl sledován vliv expozice a výkon plazmatického výboje na polaritu a morfologii substrátu. Smáčivost povrchu byla studována goniometricky pomocí měření kontaktního úhlu a vyhodnocení povrchové energie. Tloušťka ablatované vrstvy byla stanovena gravimetricky a metodou AFM byla studována morfologie povrchu polymerů.

Sekce : Materiálové inženýrství II – Materiály pro bioaplikace

Vliv povrchové modifikace na vlastnosti PC

Autor: Blanka Forejtová
Ročník: B3
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: doc. Ing. Petr Slepíčka, Ph.D.

Cílem práce bylo studium změn vlastností povrchu polykarbonátové folie (PC) po plazmatické modifikaci. Hlavními použitými analytickými metodami bylo měření kontaktního úhlu smáčení a povrchové energie a studium morfologických změn povrchu polymeru pomocí mikroskopie atomárních sil (AFM). Modifikace probíhala při výkonech 3W a 8W, doba expozice v argonovém plazmatu se pohybovala v rozmezí 20-240s. Výsledky goniometrického měření ukazují, že s rostoucí dobou modifikace Ar^+ ionty dochází k růstu kontaktního úhlu a poklesu povrchové energie. Dále bylo studováno stárnutí polymeru, jež ukázalo pokles hodnot kontaktních úhlů u zestárých vzorků (nárůst hodnot povrchové energie). Úbytky polymeru byly stanoveny gravimetricky, tloušťka ablatované vrstvy po modifikaci v plazmatu byla stanovena výpočtem. Z výsledků gravimetrického měření i výpočtu tloušťky vrstvy vyplývá, že s narůstající dobou expozice v plazmatu dochází k nárůstu ablace. Výsledky měření budou dále použity ke studiu adheze a proliferace buněk na vhodně vybraných vzorcích.

Sekce : Materiálové inženýrství II – Materiály pro bioaplikace

Studium plazmaticky modifikovaného HDPE

Autor: Adéla Kvapilová
Ročník: B3
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Nikola Slepíčková Kasálková, Ph.D.

V této práci se budu zabývat vlivem modifikace inertním plazmatem na povrch polymerního materiálu. Měřeným polymerem je HDPE („high density“ polyetylen) a studovaným parametrem je změna kontaktního úhlu od doby modifikace. Měření je povrch pouze po modifikaci plazmatem a po leptání HCl. Plazmatická modifikace se provádí při výkonu 8W a době trvání 240s a 120s. Průběh stárnutí byl měřen goniometricky. Výsledky měření odpovídají předpokladu, že hodnoty kontaktních úhlů se výrazně mění po modifikaci plazmatem i po leptání.

Oxidovaná celulóza – vliv skladování na materiálové vlastnosti

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

Táto práca je zameraná na výskum oxidovanej celulózy a jej fyzikálno – chemických a materiálových vlastností a ďalej sa venuje výskumu oxidovanej celulózy, ktorá bola uskladňovaná v nevyhovujúcich podmienkach po dobu 2 rokov a 72 hodín.

Bol skúmaný vplyv skladovania na nasiakavosť pomocou gravimetrie, rýchlosť rozpustnosti a pH hodnoty oxycelulózy v rozdielnych roztokoch prostredníctvom potenciometrie. Povrchová morfológia bola študovaná za pomoci konfokálnej mikroskopie a skenovacej elektrónovej mikroskopie. Chemické zloženie povrchu oxycelulózy bolo získané pomocou röntgenovej fotoelektrónovej spektroskopie. Jej antibakteriálny účinok bol pozorovaný na gram negatívnych a gram pozitívnych baktériách a na zistenie tepelnej stability bola využitá termogravimetrická metóda.

V závere tejto práce bolo zistené, že oxycelulóza skladovaná podľa noriem má rozdielne vlastnosti ako oxycelulóza, ktorá bola skladovaná v nevyhovujúcich podmienkach. Zistilo sa, že oxycelulóza, ktorá bola po dobu 72 hodín vystavená nepriaznivým podmienkam, má podobné vlastnosti ako oxycelulóza uskladnená v nevyhovujúcich podmienkach po dobu 2 rokov.

Inteligentní antimikrobiální povlaky na bázi pH a teplotně senzitivního kopolymeru

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

Tato práce se zabývá studiem inteligentních antimikrobiálních povlaků na bázi pH a teplotně senzitivního kopolymeru nanášených metodou spin-coating. Má jít o tzv. aktivní povlaky, tzn. povlaky, do jejichž struktury je zakomponována látka s antimikrobiálním účinkem. Inteligentní kopolymer má zajistit odezvu na změnu vnějších podmínek, v tomto případě pH a teplotu.

Aby bylo zajištěno uvolnění antimikrobiální látky, muselo dojít ke stanovení teploty fázového přechodu kopolymeru v závislosti na teplotě, pH, substrátu a tloušťce povlaku.

Následně byla sledována kinetika uvolňování antimikrobiální látky, kdy byl povlak nanesen na skleněný substrát a sledovalo se uvolňování látky ve vodných roztocích za různých teplot, pH a tloušťek povlaku.

Cílem této práce je vyhodnocení vlastností takto připravených povlaků, které musí být stálé, mít silné antimikrobiální vlastnosti a v neposlední řadě reagovat na vnější podnět.

Sekce : Materiálové inženýrství II – Materiály pro bioaplikace

Příprava kovových nanočástic a jejich aplikace v biologických systémech

Autor: Jan Smolka
Ročník: M1
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: doc. Ing. Jakub Siegel, Ph.D.

Tato práce se zabývá přípravou kovových nanočástic platiny a paladia a studiem jejich cytotoxických vlastností. Nanočástice byly připraveny metodou přímého katodového naprašování do kapalného substrátu, v této práci do glycerolu, který je vhodný díky své nízké tenzi par. Po samotném naprašování byl naředěn vodou pro iontovou chromatografii na isotonický roztok, jehož složení bylo vypočteno na základě experimentálních dat a bylo potvrzeno měřením vzorku, který obsahoval nanočástice. Velikost takto připravených nanočástic byla vypočtena obrazovou analýzou snímků z transmisní elektronové mikroskopie a pomocí dynamického rozptylu světla. Reprodukovatelnost metody byla ověřena spektrometrií ve viditelné a blízké ultrafialové oblasti a metodou dynamického rozptylu světla. Koncentrace nanočástic v roztoku byla určena pomocí atomové absorpční spektrometrie. Takto připravené nanočástice v roztoku byly podrobeny cytotoxickému testu WST-1 na buněčné kultury L929, RAW 264.7, HEK 293T, Hep G2, A549 a byla vypočtena inhibiční koncentrace IC50. Z výsledků cytotoxického testu vyplývá, že nanočástice obou kovů působí toxický proti všem použitým buněčným kulturám.

Sekce : Materiálové inženýrství II – Materiály pro bioaplikace

Vliv podmínek modifikace na povrchové vlastnosti polymerního substrátu

Autor: Mariia Vereshchaka
Ročník: B3
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Nikola Slepíková Kasálková, Ph.D.

Práce je zaměřena na modifikaci a následně na charakterizaci polymerního povrchu pro použití v biomateriálovém inženýrství.

V rámci této práce byl argonovým plazmatem exponován vysokohustotní polyethylen (HDPE). Na takto aktivovaný vzorek byl za proměnných podmínek (teplota, čas) navazován PEG (2% vodný roztok). Pomocí goniometrického stanovení kontaktního úhlu byl stanoven vliv podmínek roubování na smáčivost polymerního substrátu.

Bylo zjištěno, že vlivem plazmatu a následného navazování PEG dochází k výrazným změnám v povrchové struktuře HDPE, které ovlivňují smáčivost a dobu nutnou ke stabilizaci povrchu. Dále bylo zjištěno, že zvýšení teploty při modifikaci nemá výrazný vliv na množství PEG navázaného na HDPE.

Sekce : Chemická informatika a bioinformatika

Mutation and substitution rates in sexual and asexual forms: a clue to the persistence of sex in a model group of Cobitis?

Autor: Jan Röslein
Ročník: B1
Ústav: Ústav živočišné fyziologie a genetiky
Školitel: Mgr. Karel Janko, Ph.D.

The primary objectives of this project are bound with evolution of sexual reproduction in the study of the complex cobitis hybrid, gynogenetic fish still forming viable offspring. The project can be categorized into three interrelated levels.

Firstly, we propose hypotheses for explaining the accumulation of deleterious mutations in the genome with respect to the substitution rate and the effective population size - effect Muller ratchet with clonally reproducing very old hybrid lines. To answer this question, we use data single nucleotide substitution gained from RNA sequencing and genome sequencing data using the "uptake" of DNA hybridization to probes made from transcriptome.

Secondly, we focus on quantifying the transcriptome - the comparison between sexual and asexual individuals to elucidate the causes of functional differences fertilization and the formation of unreduced oocyte; still keeping in mind the effects of inter-species variation and the polyploidy hybrid genomes it selves.

In the last major section of the project, we ask the question of how does alleles coexist in the newly arisen genome. Is there transcriptional silencing of one of the parental genomes, or even the whole genome imprinting to preserve the integrity transcriptome? What is the significance does the tissue origin have, developmental stage, sex of the individual, the effect of gene dosage due to a combination of different parental genomes? Is there correlation among global expression, physiology and behavior of hybrid individuals?

Sekce : Chemická informatika a bioinformatika

Predictions on random protein sequences

Autor: Vjačeslav Tretjačenko
Ročník: M2
Ústav: Institute of organic chemistry and biochemistry AS CR; Department of Biochemistry, Faculty of Science, Charles University in Prague
Školitel: Mgr. Klára Hlouchová, Ph.D.

In order to investigate the occurrence of secondary structure in random protein space we generated libraries of 10^6 random sequences of 100 residues from (i) the canonical amino acid alphabet. (ii) hypothetical early amino acid alphabet (Gly, Ala, Asp, Glu, Val, Ile, Leu, Pro, Thr, Ser), (iii) randomly selected 10 amino acids that best represent the repertoire of physicochemical properties of the canonical alphabet (Leu, Cys, Ala, Gly, Ser, Pro, Phe, Glu, Lys, His), and (iv) 10 amino acids from the canonical alphabet. Two control libraries were constructed from 100 residues protein fragments from PDB-deposited proteins and Disprot database of protein disorder. In addition to bioinformatical analyses, several peptides were selected from the random libraries for experimental characterization and verification of prediction accuracy.

Surprisingly, the occurrence of secondary structure within our random libraries from canonical amino acid alphabet is only slightly smaller (~40 %) than within the control library of structurally characterized proteins (~50 %). Additionally experimental characterization of 15 sequences from library (i) with highest predicted secondary structure content show broad range of different secondary structural motifs and stable protein structures.

Sekce : Chemická informatika a bioinformatika

miRNA-like effect: An issue of siRNA silencing

Autor: Miroslav Příbyl

Ročník: M1

Ústav: Laboratory of RNA biochemistry, Department of genetics and microbiology, Charles University in Prague

Školitel: Mgr. Václav Vopálenský, Ph.D.

Silencing of certain mRNAs using siRNA is a common method nowadays, which helped to clarify many cellular processes and to elucidate functions of various proteins. Application of the method itself can face many challenges. Trans-acting and miRNA-like effect are the most notable ones. Both of these problems are related to mRNAs with high sequence identities. In certain cases, the trans-acting or miRNA-like effect may cause a phenotype, that can be interpreted in a wrong way as an effect of silencing of the primary target. Both of these problems, trans-acting and miRNA-like effect, are partially preventable using bioinformatical analysis. Here we show an example of this process including laboratory experiments. In this work, we discuss the issue of ERK1 / 2 silencing. ERK1 and ERK2 proteins are the most important components of MAPK/ERK signaling pathway, which is one of the major cascades required for cell growth, proliferation and differentiation. The sequence identity of ERK1 and ERK2 mRNA is 65.5 %. Silencing both, ERK1 and ERK2 mRNA together, usually leads to cell cycle arrest, in prolonged silencing, can lead to apoptosis. If siRNA that targets one of the isoforms is also targeting the other isoform via trans-acting or miRNA-like effect, the observed phenotype could be subsequently misinterpreted.

Sekce : Chemická informatika a bioinformatika

Naive Bayes classifier for the biological activity prediction

Autor: Jiří Novotný

Ročník: M1

Ústav: Laboratory of Informatics and Chemistry

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

The Naïve Bayes (NB) classifier is commonly used in chemoinformatics for the prediction of the biological activity of small organic ligands. The attractive feature of the NB classifier is its probability interpretation when the result of the classification is a score indicating the probability if the ligand is active at the given molecular target. This score is also commonly interpreted as ligand potency, i.e. the higher the score, the more potent (active) the ligand. The aim of the work is to verify the correlation of the Bayes score with the biological activity of ligands for estrogen receptors alpha and beta.

Sekce : Chemická informatika a bioinformatika

Comparison of QSAR Models, an Analysis of Androgen Receptor Ligand Activity

Autor: Brent Rees
Ročník: M2
Ústav: Laboratory of Informatics and Chemistry
Školitel: doc. Ing. Daniel Svozil, Ph.D.

In this analysis, the dependence of androgen receptor ligand binding affinities and inhibition concentrations were modeled against a set of molecular descriptors. Raw data in the form of inhibitory constants (K_i) and half-maximal inhibitory concentrations (IC_{50}) were collected from the ChEMBL database representing two respective sets of ligands which have been experimentally screened for androgen receptor activity. Molecular descriptors of these ligands such as drug-like features and structural characteristics were calculated and tabulated. After pre-processing the data for analysis, a subset of the table was used to train a quantitative-structure activity relationship (QSAR) cross-validated regression model relating the descriptors of the ligands to K_i and IC_{50} values. The remainder of the data was used to test the accuracy with which the model is able to predict the androgen receptor activity of ligands as drug candidates and possible toxins.

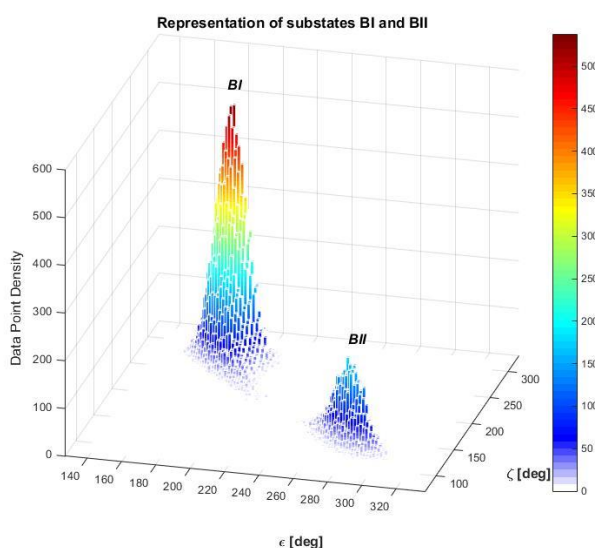
Sekce : Chemická informatika a bioinformatika

Analysis of conformational substates in DNA backbone

Autor: Hana Dohnalová
Ročník: M1
Ústav: Laboratory of Informatics and Chemistry
Školitel: Dr. Filip Lankaš

DNA sugar-phosphate backbone affects the interaction of DNA with proteins, therefore it is important to understand its conformational dynamics. Crystal structures are the most valuable experimental source of data, but the crystals are static and may be biased by DNA deformation. Here we use atomic-resolution molecular dynamics simulations with explicit inclusion of water and ions to generate time series of torsion angles describing the backbone conformation. Subsequently these data are processed using different statistical and clustering methods to obtain populations of various conformational substates and transition probabilities between them.

Our goal is to get the most accurate description of the DNA backbone conformation provided by molecular dynamics. We will then compare that with the available crystal data to get better insight into the DNA backbone conformational properties.



Sekce : Chemická informatika a bioinformatika

Computational characterization and properties of chimeric proteins

Autor: Lucie Pfeiferová

Ročník: M1

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

Školitel: RNDr. Jiří Vondrášek, CSc.

Synthetic fusion proteins of two or multiple domains using recombinant DNA technology are recently emerging in the field of protein engineering. The functional properties of the designed proteins were already researching using biological tools. However, there is no much information about the stability and other properties of two domain constructs of structurally and functionally different proteins by using computational chemistry. In order to understand the stability and super-molecular properties, we have performed all-atom explicit solvent molecular dynamics simulations in the isobaric-isothermal ensemble. We have selected the well characterized PDZ3 and SH3 domains along with other 5 artificial domains, 1 rigid and 1 flexible linker, and created chimeric constructs of PDZ3 or SH3 domain with artificial domains using direct and reverse combination and connection with and without linker. We used IEM methodology to describe effect and influence of artificial domain in the chimeric construct on the natural PDZ or SH3 domain.

Sekce : Chemická informatika a bioinformatika

Interaction energy fingerprints of protein – DNA complexes

Autor: Mgr. Dávid Jakubec

Ročník: M1

Ústav: Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, AS CR

Školitel: RNDr. Jiří Vondrášek, CSc.

Detailed description of the process of specific nucleic acid sequence recognition by transcription factor proteins remains one of elusive goals of structural biology and related biophysical or computational fields. Analyses of the several hundreds available crystal structures of protein – DNA complexes have ruled out a simple code in which a given DNA base sequence would be uniquely recognized by complementary amino acids of its protein partner *via* a set of hydrogen bridges. van der Waals' interactions, hydrophobic effect, and involvement of the molecules of the solvent are but few of the other effects which have been shown to be equally, or sometimes even more important for the process of nucleic acid sequence recognition. The need to account for these effects greatly complicates our efforts at developing a universal recognition code.

Yet, a unifying factor of many of the various modes of recognition exists in the form of a similar binding free energy. It would seem desirable to be able to effectively express this fundamental thermodynamic quantity as a function of the potential energy of interaction. We explored this possibility by using a molecular dynamics simulation-derived function to scale the electrostatic interactions between the residues of the interacting partners. The resulting interaction energy fingerprints of the complexes allow further analysis *via* pattern-searching methods.

Sekce : Restaurování a konzervování anorganických materiálů

Restaurování kameniny z jímky theatinů na Malé Straně v Praze

Autor: Pavla Glauningerová
Ročník: B4
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Alexandra Kloužková, CSc.; Ljuba Svobodová, restaurátorka s licencií MK;
Ing. Petra Zemenová

V této práci bylo provedeno restaurování kameninových nádob z archeologického výzkumu týkající se jímky theatinů na Malé Straně v Praze. V rámci průzkumu bylo stanoveno chemické (XRF) a mineralogické (XRD) složení i pórovitost a nasákavost střepových hmot. Tvar předmětu a orientace střepové hmoty svědčí o technologii vytváření na hrnčířském kruhu. Na základě průzkumu byl navržen restaurátorský záměr, který byl schválen zadavatelem (čištění, lepení, doplnění a barevná retuš dopňků). Adhezivo bylo zvoleno na základě stanovení pórovitosti (Ponal SUPER, Paraloid B72). Ztráty byly doplněny modelářskou sádkou opatřené barevnou retuší (bílý latex + minerální pigmenty Kremer). Během restaurování byla provedena fotodokumentace. Závěrem byly navrženy vhodné podmínky uložení.

Sekce : Restaurování a konzervování anorganických materiálů

Způsoby doplňování ztrát při restaurování porcelánové vázy (Míšeň, 18. století)

Autor: Margarita Gorelikova
Ročník: B3
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Alexandra Kloužková, CSc.; Ljuba Svobodová, restaurátorka s licencií MK

Při restaurování porcelánu, zejména zdobeného plastickými dekory, je jedním z prováděných úkonů doplnění ztrát. Cílem této práce je ukázat, jakými způsoby se lze doplnit ulomené okvětní lístečky, popř. celé květy včetně chybějících postav andílků a dalších částí při restaurování porcelánového předmětu. Jsou zde uvedeny různé metody provádění náhrad původní hmoty v závislosti na vybraných materiálech a typech poškození. Materiály pro vytvoření doplňků byly zvolené s ohledem jak na vhodné mechanické vlastnosti a barvu výchozího restaurovaného předmětu – porcelánu, tak i na dobré možnosti jejich zpracování. Restaurátorský zásah je předveden na jedné z bohatě dekorovaných párových váz vyrobených v Míšni v 18. století.

Sekce : Restaurování a konzervování anorganických materiálů

Restaurování novověké keramiky z domu „U Mecenáše“

Autor: Doubravka Hajmanová

Ročník: B4

Ústav: Skla a keramiky

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

Předmětem restaurování byly novověké užité nádoby – mísa na nožce, nádoba pro boční ohřev a hrnec se dvěma uchy. Nádoby byly nalezeny v jímce během archeologického výzkumu suterénu malostranského domu „U mecenáše“ v roce 2014. V době fungování této jímky byl majitelem domu Diviš Miseroni, známý rudolfínský brusič drahokamů. Restaurátorský průzkum charakterizoval keramický nálezkový materiál z hlediska stavu povrchových dekorů, parametrů střeptových hmot a jejich složení. Jednotlivé předměty byly nejprve vyhledány z velkého množství keramických fragmentů, dále byla provedena hmotná rekonstrukce nádob a na závěr doplnění ztrát včetně barevné retuše. Veškeré zákroky byly provedeny v souladu s etikou restaurování za použití reverzibilních materiálů.

Sekce : Restaurování a konzervování anorganických materiálů

Rekonzervace keramické pánvičky ze Schwarzenberského paláce v Praze

Autor: Petra Kádřová, DiS.

Ročník: B3

Ústav: Skla a keramiky

Školitel: Ing. Alexandra Kloužková, CSc.; Ljuba Svobodová, restaurátorka s licencií MK;
Mgr. Gabriela Blažková, Ph.D.

Cílem předložené práce byla rekonzervace keramické pánvičky ze Schwarzenberského paláce v Praze. Výzkumný záměr vycházel z požadavků grantu na zpracování novověké keramiky Mgr. Magdaleny Blažkové, Ph.D. Při restaurátorském průzkumu byly provedeny chemické (XRF) a mineralogické (XRD) analýzy složení střeptové hmoty a glazury. Restaurátorským záměrem schváleným zadavatelem bylo očistit nádobu, vyhledat střepty, následně provést lepení reverzibilním pojivem, doplnit chybějící části sádrou a u sádrových doplňků provést barevnou retuš. Veškeré použité materiály – pojivo Duvilax LS-50, sádra a temperové barvy jsou reverzibilní. Během celého procesu restaurování byla prováděna fotodokumentace a na závěr byl navržen ochranný režim předmětu.



Sekce : Restaurování a konzervování anorganických materiálů

Sochy cirkusových koní ze skelných vláken z Keravy

Autor: Bc. Martina Kmoníčková
Ročník: M1
Ústav: Metropolia University of Applied Sciences, Helsinki;
Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Mgr. Heikki Häyhä

Projekt se týkal venkovních soch ze 70. let minulého století patřících Muzeu umění v Keravě. Jednalo se o sochy cirkusových koní ze skelných vláken od finského umělce Heikki Haivaoja, zhotoveny byly tvůrcem kulis Antero Poppiusem. V rámci projektu bylo vyhodnoceno poškození soch, byl proveden materiálový průzkum (vnitřní konstrukce soch, analýza barevných vrstev), následovaly restaurátorské práce. Projekt byl jedinečný kvůli širokému záběru od materiálového průzkumu po otázku uplatnění umění ve veřejném prostoru a identifikace veřejnosti s uměleckým dílem. Proto byl projekt s veřejností v několika fázích diskutován, následovala edukační část projektu zaměřená na děti navštěvující první stupeň místních základních škol.



Sekce : Restaurování a konzervování anorganických materiálů

Průzkum a restaurování železné fibule

Autor: Bc. Jiří Kmošek
Ročník: M1
Ústav: Centre de recherche et de restauration des musées de France;
Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Maneul Lerux, MSc.

Příspěvek shrnuje výsledky průzkumu a restaurování železného šperku - fibule, které byly získány v rámci studijní stáže autora v Centre de recherche et de restauration des musées de France v letním semestru roku 2015. Železná fibule je součástí rozsáhlé sbírky archeologických artefaktů, pocházejících z etruské nekropole v okolí Etrurie v Itálii, datované do 6. století př. n. l. a spravované v současné době muzeem Louvre. Mezi těmito pozoruhodnými železnými artefakty je fibule výjimečná pro její specifický tvar, velikost, precizní uměleckořemeslné provedení a zachovalé dekorování povrchu ve formě bronzových inkrustací. Příspěvek prezentuje nové poznatky o dříve neznámých technologických, korozních a výzdobných aspektech této fibule, které byly získány při materiálovém průzkumu, využívajícího metody rentgenové radiografie, elektronové skenovací mikroskopie, rentgenové difrakční analýzy, metalografické analýzy a protony indukované rentgenové emisní spektrometrie. Restaurátorský zásah byl realizován s cílem zvýšení čitelnosti zachovalých výzdobných prvků na povrchu předmětu a zpomalení jeho degradace.



Sekce : Restaurování a konzervování anorganických materiálů

Restaurování kroužkové kabelky (charlestonky) **z poč. 20. stol.**

Autor: Adéla Malinová
Ročník: B2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Šárka Msallamová; Jaroslav Prášil, restaurátor s licencií MK

Práce se zabývá restaurováním kroužkové kabelky (charlestonky). Kabelka pochází z 10. až 20. let 20. století a byla vyrobena metodou svěšování kroužků. Při materiálovém průzkumu bylo zjištěno, že kroužky jsou ze žárově postříbřené mosazi, rám s řetízkem jsou z alpaky a ozdobné kuličky jsou ze stříbra s malým obsahem mědi. Použité materiály byly identifikovány elektronovým rastrovacím mikroskopem TESCAN VEGA3 S EDS analyzátozem Oxford Instruments INCA 350. Z mosazného kroužku byl připraven metalografický výbrus. Struktura materiálu byla zvýrazněna leptáním pomocí Ratinova činidla a odpovídá jednofázové tvářené mosazi se závěrečným rekrytalizačním žíháním. V místě porušení povrchové vrstvy stříbřením je dobře patrné odzinkování mosazi. Na rámu kabelky bylo nalezeno korozní napadení povrchové úpravy působením pevného kontaminantu KCl. Při restaurování byly nejprve doplněny chybějící kroužky a stříbrná zdobná kulička stejnými technikami podle originálu. Dále byly odstraněny prachové a korozní produkty z povrchu kabelky pomocí destilované vody, etanolu a následně 5% roztoku H_2SO_4 s přídavkem thiomocoviny. Po restaurování byl majiteli navrhnut vhodný doporučený režim uložení kabelky v interiérových podmínkách.

Sekce : Restaurování a konzervování anorganických materiálů

Petrolejová lampa - průzkum lomu podstavce ze slitiny zinku

Autor: Tomáš Mori
Ročník: B4
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Šárka Msallamová; Jaroslav Prášil, restaurátor s licencií MK

Předmětem restaurování byla petrolejová lampa z 19. století. Skládá se z podstavce ze slitiny zinku, skleněné nádrže na petrolej, mosazného hořáku s knotem, skleněného stínítka a skleněného cylindru. Předmět má na hořáku značku R. DITMAR WIEN METEORBRENNER. Zinkový podstavec lampy byl zlomený, místy byla setřena povrchová úprava niklování a skleněný cylindr byl prasklý. Pozornost byla věnována hlavně lomu podstavce. Jedná se o křehký lom, který vznikl v minulosti vlivem mechanického nárazu. Dolomení podstavce proběhlo nedávno. Metalografickou analýzou z odebraných vzorků lomových ploch byla zjištěna přítomnost přetoku a četných trhlin. Tyto skutečnosti, spolu se špatnou konstrukcí stěny podstavce, mohly přispět k lomu podstavce, navíc zinek je velice křehký materiál. Analýzy složení byly provedeny pomocí rastrovacího elektronového mikroskopu TESCAN VEGA 3 s EDS analyzátozem OXFORD Instruments INCA 350. Během restaurování byly odstraněny korozní produkty z mosazného hořáku pomocí 5% roztoku H_2SO_4 s přídavkem peroxidu vodíku. Poté byly pomocí trubičky z alpaky, která byla vložena do podstavce a dvousložkového epoxidového lepidla přilepeny zlomené části podstavce a zaretušována místa odběru. Nakonec byl určen ochranný režim předmětu.

Sekce : Restaurování a konzervování textilu

Restaurování dámské blůzy

Autor: Bc. Helena Bradáčová

Ročník: M1

Ústav: Chemické technologie restaurování památek

Školitel: Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.; Barbora Štěpničková, restaurátorka s licencií MK

Dámská blůza z Národního muzea – Historického muzea byla restaurována v rámci bakalářské práce na VŠCHT Praha. Na základě umělecko-historického průzkumu a zjištěných analogií byla upřesněna datace blůzy na přelom 19. a 20. století.

Jedná se o černou blůzu do pasu s dlouhými rukávy rozšířenými v horní části a stojatým límcem. Blůza je podšitá šedou podšívkou. Zdobená je flitrovou aplikací s korálky, řasenou stužkou a na ramenou strojovou krajkou. V rámci textilně technologického rozboru byla odlišena materiálová rozdílnost pasového kraje oproti zbytku svrchní černé tkaniny. Materiál svrchní tkaniny bylo obtížné identifikovat. Na základě zkoušek rozpustnosti porovnaných s rozpustností standardů vláken byl určen jako divoké hedvábí, pravděpodobně tussah.

Vzhledem k rozpustnosti flitrů ve vodě bylo zvoleno čištění blůzy suchou cestou, pro čištění mastných skvrn stírání vatovými tamponky navlhčenými perchloretylenem.

Perforace tkanin a ozdobných prvků byly lokálně podloženy materiálem nabarveným na odpovídající odstín a restaurovány technikou šité skeletáže. Háčky a očka pokryté korozními produkty byly demontovány pro snadnější důkladné vyčištění, díky kterému nehrozí další znečištění tkanin od korozních produktů. Na závěr proběhla zpětná montáž kovových prvků.

Sekce : Restaurování a konzervování textilu

Restaurování hasičského praporu

Autor: Aneta Dušková

Ročník: B3

Ústav: Chemické technologie restaurování památek

Školitel: Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.; Bc. Veronika Šulcová, restaurátorka s licencií MK;
Ing. Klára Drábková

Hasičský prapor z fondu „Svaz Čechů z Volyně, Žatec“, který je ve správě Národního archivu v Praze, byl restaurován v rámci Semestrální práce. Byl proveden textilně-technologický a umělecko-historický průzkum. Od praporu byla demontována žerd' a stuhy, tyto součásti byly samostatně čištěny. Díky demontáži mohly být některé součásti vyprány v lázni s detergentem. Samotný prapor byl čištěn od prachu suchou cestou pomocí houby Wallmaster. Dírky a trhliny v praporu byly podloženy novým materiálem a zajištěny pomocí stehů. Kovové části byly konzervovány. Prapor byl vhodně uložen do krabice z nekyselého kartonu.

Sekce : Restaurování a konzervování textilu

Konzervování archeologických textilií

Autor: Kateřina Kouřilová

Ročník: B2

Ústav: Chemické technologie restaurování památek

Školitel: Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.; MgA. Adéla Plátková, restaurátorka s licencií MK

Konzervování fragmentů z archeologického výzkumu v Kanovnické ulici č. p. 73 na Hradčanech, který proběhl mezi lety 1983-1985, bylo provedeno v rámci předmětu Semestrální práce I. v Restaurátorských dílnách Pražského hradu na přání majitele (Archeologický ústav AV ČR). Jedná se o soubor malých, převážně hedvábných a vlněných tkanin. Tyto fragmenty byly po vyzvednutí z místa nálezů (r. 1985) základně očištěny suchou cestou a byl proveden jejich mikrobiologický průzkum a následná dezinfekce. Poté byly fragmenty uloženy mezi dvě skleněné desky a uloženy do depozitáře. Prvním krokem práce bylo jejich mechanické očištění a následné vyrovnání studenou parou pomocí ultrazvukového zvlhčovače. Po vyrovnání byly fragmenty sušeny ve vodorovné poloze pod skleněnými destičkami. Součástí konzervování bylo také provedení textilně-technologického průzkumu, fotografické dokumentace a vypracování restaurátorské zprávy. Fragmenty byly následně uloženy do pasparty z nekyselého kartonu a byly doporučeny vhodné podmínky pro jejich uložení a expozici.

Sekce : Restaurování a konzervování textilu

Konzervování archeologických textilií z Kanovnické ulice

Autor: Nela Kýrová

Ročník: B2

Ústav: Chemické technologie restaurování památek

Školitel: Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.; MgA. Adéla Plátková, restaurátorka s licencií MK

V rámci předmětu Semestrální práce I byly v Restaurátorských dílnách Správy Pražského hradu konzervovány archeologické fragmenty textilií z Kanovnické ulice č. p. 73 na Hradčanech. Fragmenty byly vyzvednuty roku 1985, následně zbaveny nečistot a uloženy mezi dvěma skly. Tkaniny jsou převážně z vláken živočišného původu s keprovou nebo plátěnou vazbou. Dodatečná konzervace fragmentů spočívala v provedení kontrolního mikrobiologického průzkumu, podrobné fotodokumentace a textilně - technologického průzkumu. Dále následovalo mechanické dočištění a vyrovnání osnov a útků pomocí ultrazvukového zvlhčovače. Na závěr byly fragmenty vhodně adjustovány a byly doporučeny podmínky pro vhodné uložení a expozici.

Sekce : Restaurování a konzervování textilu

Restaurování trojdílného kompletu oděvů pro Jezulátko

Autor: Andrea Malinovská
Ročník: B4
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Bc. Veronika Šulcová, DiS., restaurátorka s licencií MK

Trojdielný komplet byl restaurován v rámci Semestrální práce IV v restaurátorských dílnách VOŠTŘ, Praha 1, U Půjčovny 9. Všechny tři oděvy jsou šité, z části strojově a z části ručně. Světle růžové šaty a plášť jsou ušity z hedvábné vzorované tkaniny brošované kovovými útky a podšity tmavě růžovou bavlněnou tkaninou. Zapínají se na kovový háček a textilní očko, zdobené jsou kovovou ručně paličkovanou krajkou a skleněnými perličkami s voskovou výplní. Košile je ušita ze vzorované viskóзовé tkaniny, podšita hedvábnou tkaninou krémové barvy a zdobena bílou bavlněnou krajkou.

Všechny tři oděvy byly nejprve čištěny pomocí vysavače s jemným odtahem. Šaty a plášť byly dále čištěny houbou Wallmaster a dočištěny stíráním vatovými tamponky navlhčenými v destilované vodě. Korozní produkty na košili byly čištěny 5% roztokem kyseliny šťavelové s následným praním. Uvolněné kovové nitě a lamely na šatech a plášti byly zataženy a fixovány bodovým šitím. Trhlina na šatech a rozvolněná tkanina na rukávech košile byly podloženy plombou z hedvábné tkaniny a nasketovány. Párající se límec košile byl zajištěn skrytým stehem. Kovové háčky byly demontovány a konzervovány. Demontované perličky byly konsolidovány dvěma nátěry vodné emulze disperzního lepidla Lascaux.

Sekce : Restaurování a konzervování textilu

Restaurování dámských šatů z pozůstalosti rodiny Zöllnerovy

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

Restaurované šaty pravděpodobně patřily Elišce Zöllnerové, která se jako vdova po Filipovi Zöllnerovi stala principálkou herecké společnosti Zöllnerové. Zadavatelem restaurování bylo Národní muzeum. Šaty jsou datovány do let 1850-1860. Vrchní bavlněná tkanina je po celé ploše potištěná. Rukávy a spodní část sukně zdobí lemy a límec strojová krajka a paspulky. Šaty byly celoplošně vysáty vysavačem s regulovaným odtahem. Na sukni se nacházely inkoustové skvrny, které byly odstraněny roztokem dymethylformamidu v destilované vodě. Následovalo čištění ve vodné lázni detergentem Syntapon L a sušení ve vodorovné poloze, příp. na figuríně. K dočištění skvrn neznámého původu byl vyzkoušen 5% roztok Chelatonu III, což se ukázalo jako nevhodné (z důvodu rozpouštění potisku). Další přípravky nebyly použity. Krajka byla vyrovnána a chybějící části vyplněny bavlněnou nití. Rozvlákněná místa paspulek byla obšita nití taženou z krepelíny kroužkovacím stehem. Perforace v sukni byly podloženy plombami a přichyceny skeletovacím stehem a po obvodu přišity kroužkovacím stehem k vrchnímu materiálu šatů. Za účelem expozice byla vyrobena krinolína a spodnička. Šaty byly zavěšeny na tvarované ramínko do ochranného obalu z neběleného bavlněného plátna. Doporučené podmínky uložení a vystavení splňují obecné požadavky pro textilní materiál.

Sekce : Restaurování a konzervování textilu

Restaurování pánské vesty

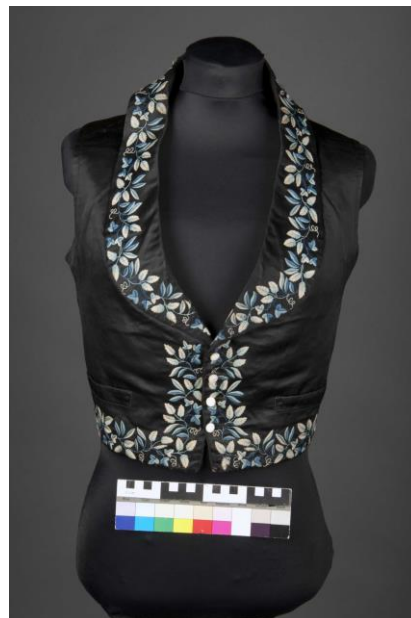
Autor: Tereza Obalová

Ročník: B4

Ústav: Chemické technologie restaurování památek

Školitel: Bc. Veronika Šulcová, DiS., restaurátorka s licencií MK; Ing. Klára Drábková

Restaurování vesty proběhlo v akademickém roce 2014/2015 v rámci předmětu Semestrální práce. Vesta je zhotovena z černého hedvábného saténu a kepru, podšívka je z bavlněného plátna. Vesta byla v minulosti značně druhotně upravována, tyto úpravy bylo nutné odstranit a vrátit vestu do co nejpůvodnějšího stavu. Proběhlo doplnění materiálu v zadním díle, a to v kepru i v podšívce. Vesta byla mírně znečištěná prachovými částicemi a užíváním. Čištění probíhalo pouze suchou cestou z důvodu zapouštění černé barvy z hedvábí. Celá vesta byla stírána jemně vlhčenými tamponky ve směsi etanolu a vody v poměru 9:1, tak aby se tkanina nepromočila. Největší poškození bylo možné pozorovat na zadním díle v průramcích, kde byla díra vzniklá nošením a skvrny pravděpodobně od potu. Díry a trhliny byly podloženy tkaninou obarvenou na stejný odstín a skeletovány. Obšití kapsy na pravé straně bylo prodřené užíváním a výplňový provázek byl uvolněn. Po celou dobu restaurování byla prováděna podrobnou fotodokumentaci.



Sekce : Restaurování a konzervování textilu

Restaurování dámské šněrovačky

Autor: Bc. Kateřina Pavlasová

Ročník: B4

Ústav: Chemické technologie restaurování památek

Školitel: Bc. Veronika Šulcová, restaurátorka s licencií MK; Ing. Klára Drábková

Dámská plně vyztužená a prošíváná šněrovačka z hedvábné brošované tkaniny, s hedvábnými stuhami, s podšívkou a šusky z bílé usně, z majetku Historického muzea – Národního muzea byla restaurována v rámci semestrální práce.

Před restaurováním byla provedena fotodokumentace, historický průzkum, textilně technologický průzkum, včetně rentgenografie k identifikaci vnitřní stavby šněrovačky.

Šněrovačka byla čištěna odsátím prachových částic, čištěním houbičkou Wallmaster a stíráním tamponky s destilovanou vodou. Useň šušků byla čištěna stíráním tamponky s vodným roztokem isopropylalkoholu a podšívka tamponky s vodným roztokem ethanolu. Demontované stuhy byly čištěny ve vodném roztoku detergentu firmy DETA na hedvábí: betain + laurylsulfát. Následovala konsolidace poškozených lemů překrytím podehnutým šikmým proužkem z obarvené krepelíny, a stuh vložení do tunýlku z krepelíny. Šněrovačka byla doplněna vyrobeným šněrovadlem z dutinky ze zátažné pleteniny z bavlněné příze.

Předmět byl adjustován na výztuhu z kartonu Klug, vatelínu z PES vláken a plátna z nebělené bavlny, a uložen nastojato do krabice s výklopným předním čelem a snímatelným čelem. Na závěr byly navrženy doporučené podmínky uložení a expozice.

Sekce : Restaurování a konzervování textilu

Restaurování pánského kabátce

Autor: Markéta Riegerová
Ročník: B4
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.

Práce se věnuje restaurování pánského rokokového kabátce pocházejícího ze sbírek Severočeského muzea v Liberci. V rámci restaurování byl proveden textilně technologický průzkum, který blíže dokumentuje stříh kabátce a vzor výšivky na svrchním materiálu. Dále popisuje materiálovou skladbu kabátce a to včetně vazebného rozboru. Na základě tohoto průzkumu byl vypracován restaurátorský postup, který sestával z demontáže, čištění, zajištění perforací a vytvoření adekvátní adjustace. V průběhu práce bylo nutné kombinovat několik postupů pro dosažení optimálního výsledku. Z kabátce byly odsáty prachové částice a podšívka byla stírána vatovými tampony. Demontáž krajky z rukávů umožnila její čištění mokrou cestou. Ozdobné prvky na svrchním materiálu byly přichyceny nití taženou z krepelíny. Rozsáhlejší perforace podšívky byly překryty novými záplatami, menší lokální perforace byly podloženy a zajištěny technikou šité skeletáže. Podšívka byla následně celoplošně překryta krepelínou, tak aby byly dostatečně zajištěny i drobné perforace vzniklé v důsledku dřívějšího prošíání. Kabátec byl adjustován na ramínko tvarované vatelínem zašité do hadicové pleteniny.

Sekce : Restaurování a konzervování textilu

Krajka k albě

Autor: Veronika Tománková
Ročník: B3
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: MgA. Adéla Plátková, restaurátorka s licencií MK; Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.;
Ing. Klára Drábková

Krajka k albě byla restaurována v rámci Semestrální práce v Restaurátorských dílnách Pražského hradu. Součástí práce bylo také restaurování červené podkladové tkaniny.

Krajka je datována do poloviny 19. století.

Byl proveden umělecko-historický průzkum a textilně-technologický rozbor.

Alba je dlouhé spodní liturgické roucho z jemného bílého plátna, bohatě řasené a s přiléhavými rukávy. Bývá zdobena nejčastěji bílou výšivkou nebo dlouhými pásy krajky na dolních okrajích a rukávech. Krajky byly později pro zvýraznění podkládány červenou látkou.

Nejprve byly čištěny skvrny, lokálně v roztoku kyseliny šťavelové a poté byla krajka čištěna ve vodní lázni s přídavkem detergentu. Krajka byla vyrovnána a poté byly podloženy větší trhliny, aby se zamezilo dalšímu poškození. Červená hedvábná tkanina byla čištěna stíráním pomocí vatových tampónků a perchloethylenu.

Adjustace byla provedena na tubus z alkalické lepenky obalený hedvábným papírem. Takto navinutá krajka byla obalena bavlněným plátnem. Červená tkanina byla uložena stejným způsobem na zvláštní tubus.

Sekce : Restaurování a konzervování textilu

Restaurování pokrývky s paličkovanou krajkou

Autor: Anna Triščová
Ročník: B3
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: MgA. Adéla Plátková, restaurátorka s licencií MK; Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.

Předmětem restaurátorského zásahu je bílá pokrývka lemovaná pozlacenou paličkovanou krajkou z kaple sv. Kříže na Pražském hradě a je ve vlastnictví Správy Pražského hradu.

Před samotným restaurátorským zásahem byl proveden umělecko-historický průzkum, který měl pomoci porozumět předmětu a jeho historii a textilně technologický průzkum zaměřený na vazebný rozbor, identifikaci použitých vláken, technickou dokumentaci a na technologii paličkované krajky.

Během restaurátorského zásahu byly nejprve provedeny zkoušky stálobarevnosti, po kterých následovalo postupné čištění roztokem Hostaponu T. Následně byla vyrovnána lemovací krajka a zajištěny trhliny na rubové straně pokrývky.

Během dokončovacích prací byla lokálně zajištěna vytržená lemovací krajka a bylo dovyrovnáno pomačkání na pokrývce.

Na závěr byla pokrývka adjustována a byly doporučeny vhodné podmínky pro její uložení a expozici.

Sekce : Technologie restaurování památek

Použití sulfátové buničiny při restaurování papíru

Autor: Bc. Kateřina Dvořáčková
Ročník: M1
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: doc. Dr. Ing. Michal Ďurovič; Ing. Benjamin Bartl

Při procesu restaurování archiválií je mnohdy potřeba doplnit jejich chybějící části pro zajištění celistvého vzhledu a omezení dalšího poškození při jejich další manipulaci. Pro doplňování je nutné vybrat vhodný materiál, který musí vyhovovat z hlediska funkčnosti, dlouhodobé stability a také z hlediska estetického. Jako alternativní materiál pro doplňování strojních papírů vyrobených po polovině 19. století se nabízí sulfátová buničina.

Cílem této práce bylo porovnání doposud nejčastěji používané metody přípravy doplňků obarvených azobarvivou a metody používající směsi bělené a nebělené sulfátové buničiny. Sledována byla barevná shoda doplňků se vzorkem historického papíru po různých typech umělého stárnutí. V případě nebělených buničin byl testován vliv přítomných oxidovatelných látek na vlastnosti vlákniny po stárnutí. Výsledkem je zhodnocení předností a nedostatků metod a vymezení aplikační oblasti použití směsí buničin.

Sekce : Technologie restaurování památek

Vliv umělého stárnutí na optické vlastnosti diazografického papíru

Autor: Bc. Ksieniiia Hapitsonova
Ročník: M1
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: doc. Dr. Ing. Michal Ďurovič

Diazotypie (diazografie, whiteprint) patří k nejstarším a v mnohém ohledu nejjednodušším technikám kopírování. Používá se i v dnešní době, především při výrobě velkoformátových kopií map, plánů, stavebních výkresů a jiné převážně technické dokumentace.

Cílem této práce je studium vlivu tří různých druhů umělého stárnutí na stabilitu vrstvy diazobarviva diazografického papíru (umělé stárnutí UV-zářením, suchým teplem (103 ± 2 °C) a vlhkým teplem (65% RV a 80 °C).

Z výsledků práce vyplývá, že největší vliv na barevnou stabilitu diazografického papíru má ultrafialové záření, ale také změny způsobené stárnutím suchým i vlhkým teplem jsou výrazné. Obecně lze konstatovat, že zásadní změny barevnosti při umělém stárnutí nastávají v prvních 7 dnech, následně se rychlost těchto změn snižuje, ale proces degradace barvy se úplně nezastaví.

Sekce : Technologie restaurování památek

Optické metody ve službách umění

Autor: Bc. Tereza Horáková
Ročník: M1
Ústav: National Institute of Optics, Florencie;
Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Jana Striová, Ph.D.; Raffaella Fontana, Ph.D.

Analytické metody využívající blízké infračervené spektrální oblasti se stále více používají jako předběžný diagnostický nástroj pro neinvazivní zkoumání uměleckých děl před konzervátorským zásahem. Modelové vzorky barevných vrstev s různými pojivy a přítomnými podkresbami byly zkoumány pomocí neinvazivních analytických metod Fibre Optics Reflectance Spectroscopy (FORS) a Multispectral VIS-NIR Reflectography. Dále byly metody aplikovány v případě dvou uměleckých děl, a to oltářního obrazu *Pala di San Marco* od Beata Angelica (klášter San Marco, Florencie) a nástěnné malby *Sant'Agostino in studio* od Sandra Botticelliho (kostel Ognisanti, Florencie). Výsledky této práce sloužily k rozšíření existující databáze spekter barevných vrstev, která je nezbytná při jejich identifikaci pomocí techniky FORS. Multispektrální obrazová technika se ukázala zajímavá pro vizualizaci skrytých znaků jako například přípravných kreseb či retuší.

Projekt byl realizován v laboratořích National Institute of Optics (CNR-INO) ve Florencii, umístěných v Opificio delle Pietre Dure; jedné z největších institucí v Evropě, která se věnuje restaurování uměleckých děl.

Sekce : Technologie restaurování památek

Vliv kyseliny mravenčí, thiomočoviny a BTA na korozní rychlost a vizuální změny mosazných lamel dracounových textilií

Autor: Bc. Martina Kmoníčková
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Šárka Msallamová

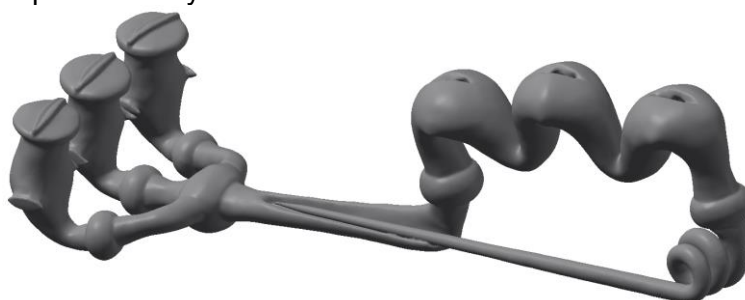
Cílem práce bylo posouzení vlivu roztoků HCOOH, HCOOH s přídavkem thiomočoviny, které jsou doporučovány pro odstraňování korozních produktů z mosazných dracounů a mosazných ozdob historických textilií, na korozní rychlost a změnu barevnosti mosazných vzorků. Dále byl zkoumán vliv korozního inhibitoru 1,2,3-benzotriazolu (BTA) na korozní rychlost a barevnou změnu vzorků v případě, že byl nanesen po aplikaci HCOOH popř. HCOOH s přídavkem thiomočoviny anebo byl přidán přímo do roztoku HCOOH. Rovněž byl posouzen vliv BTA na hedvábnou textilií (duši dracounu). Hodnocena byla změna viskozity a barevnosti hedvábí. Roztoky byly na povrch mosazi aplikovány třemi způsoby, které představovaly různou míru jejich oplachu. Vzorky byly exponovány v prostředí s relativní vlhkostí 52 a 75 % po dobu 8 týdnů. Korozní rychlost mosazných vzorků byla stanovena metodou hmotnostních úbytků a jejich barevná změna byla hodnocena kolorimetricky. Z výsledků plyne, že použití roztoku HCOOH vede k výraznému zvýšení korozní rychlosti mosazných vzorků a přídavek thiomočoviny je navíc příčinou jejich významné barevné změny. Nejlepších výsledků bylo naopak dosaženo při použití roztoku HCOOH s přídavkem BTA při RV = 52 %, kdy korozní rychlost mosazi byla nejnižší a zároveň barevná změna povrchu vzorků byla zanedbatelná.

Sekce : Technologie restaurování památek

3D technologie v restaurování - příkladová studie na archeologickém předmětu ze sbírek muzea Louvre

Autor: Bc. Jiří Kmošek
Ročník: M1
Ústav: Centre de recherche et de restauration des musées de France;
Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Maneul Lerux, MSc.

Příspěvek popisuje různé fáze komplexního výzkumného a restaurátorského projektu, využívajícího moderní vizualizační, modelovací a reprodukční 3D technologie, které byly navrženy a použity při řešení konkrétního restaurátorského projektu. Cílem tohoto projektu je najít nové možnosti, pomocí kterých lze zvýšit informační hodnotu restaurátorské dokumentace a prezentačních možností archeologických památek. Na příkladu železné fibule byly za tímto účelem použity technologie laserového skenování ve vysokém rozlišení, aplikované v různých fázích restaurátorského procesu. Velká pozornost byla věnována srovnání změn tvaru artefaktu v průběhu restaurátorských prací, 3D virtuální rekonstrukci původního tvaru artefaktu a tvorbě tištěných 3D modelů. Práce vznikla v rámci studijní stáže autora v Centre de recherche et de restauration des musées de France v letním semestru roku 2015.



Sekce : Technologie restaurování památek

Ochranné vlastnosti proteinových a polysacharidových pojiv v historických pseudozlatených iluminacích

Autor: Bc. Petra Korandová
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Milan Kouřil, Ph.D.; Ing. Jan Stoulil, Ph.D.

Barevná vrstva středověkých iluminovaných rukopisů se primárně skládá z pojiva a pigmentu, kde pojivo zaručuje přilnavost vrstvy k povrchu a její soudržnost. Nejčastějšími pojivy využívanými ve středověku byl vaječný bílek a arabská guma. Významnější rukopisy byly také zlateny. Ve Vyšehradském kodexu se shledáváme s netypickou metodou zlatení – pomocí mosazného prášku, tzv. pseudozlatení. Tato vrstva v kodexu tmavne a odlupuje se. Odolnost vrstvy vůči poškození je dána nejen chemickou reaktivitou zlatícího prášku, ale i vlastnostmi pojiva. Pojivo se může uplatnit jako fyzikální bariéra pro vstup agresivních složek z vnějšího prostředí k povrchu kovu.

Cílem této práce bylo stanovit vlastnosti proteinových a polysacharidových pojiv v podobě tenkých filmů a zhodnocení jejich ochranného účinku na mosaznou vrstvu. Byla stanovována permeabilita a navlhavost pomocí gravimetrie a elektrochemickou impedanční spektroskopií. Dále byla použita rezistometrická metoda pro sledování mosazné vrstvy pod vrstvou pojiva (vaječného bílku a arabské gumy).

Sekce : Technologie restaurování památek

Vlastnosti pružných tmelů určených do exteriéru

Autor: Bc. Martina Nováková, DiS.
Ročník: M2
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Vítězslav Knotek, Ph.D.

Spárovací tmely určené pro použití v exteriéru zabraňují pronikání korozivních složek prostředí do spáry nebo trhliny ve stavebním materiálu. Moderní polymerní pružné tmely používané ve stavebnictví se s úspěchem uplatní zejména tam, kde může z nejrůznějších příčin docházet k výraznějším změnám v poloze styčných ploch spoje.

V práci byly experimentálně zjišťovány vybrané fyzikální a chemické vlastnosti čtyř komerčně dostupných bílých pružných tmelů na bázi syntetických polymerů. Byl sledován vliv primerů jak na adhezi tmelů ke zkušebním tělískům připraveným z cementové malty, tak hydrofobizaci pórovitého podkladu. Stabilita vytvrzených tmelů byla zjišťována metodami umělého stárnutí: suchým teplem při teplotě 50 °C, vlhkým teplem při teplotě 50 °C za 95% relativní vlhkosti, ozařováním UV-A zářením a expozicí vzorků urychlenému povětrnostnímu stárnutí v QUV panelu.

Využití solí monokarboxylových kyselin pro ochranu olova v parách kyseliny octové

Autor: Lucie Prchalová
Ročník: B3
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. Obalové materiály, jako je lepenka či dřevo, uvolňují těkavé organické kyseliny, které působí na olovo degradačně. Reakcí s kyselinou octovou se tvoří 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. Čím má kyselina delší uhlíkatý řetězec a vyšší koncentraci, tím je v ochraně olova účinnější. Problémem však je, že s rostoucí délkou uhlíkatého řetězce klesá jejich rozpustnost ve vodě, a proto se pro lepší rozpustnost neutralizují roztokem hydroxidu sodného.

V této práci je hodnocena využitelnost sodných solí kyseliny dekanové, o koncentraci 0,01 mol/l a 0,05 mol/l, a kyseliny undekanové, o koncentraci 0,01 mol/l a 0,05 mol/l pro protikorozní ochranu olova. K posouzení účinnosti je použita rezistometrická metoda. Pomocí olověných rezistometrických čidel byl hodnocen vliv přítomnosti korozních produktů na olovo.

Materiálový průzkum depotu z mladší doby bronzové

Autor: Bc. Kateřina Šálková
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Šárka Msallamová

Práce se zabývá průzkumem depotu předmětů ze slitin mědi pocházejícího z mladší doby bronzové nalezeného u obce Křenovice (okr. Písek). Soubor obsahuje téměř 30 předmětů různého druhu (sekery, srpy, slitky kovu, zlomky plechu, jehlice, náramky atd.).

Odebrané vzorky korozních produktů byly analyzovány rentgenovou difrakcí. Pro identifikaci skrytých vad a stavu zachování kovového jádra byly pořízeny rentgenové snímky jednotlivých artefaktů. K metalografické analýze byly vybrány tři předměty (sekera, srp a slitek), jejichž struktura a chemické složení byly zároveň studovány pomocí skenovacího elektronového mikroskopu s EDS detektorem. Prvkové složení vzorků bylo také stanoveno metodou rentgenové fluorescence. Z vodného výluhu vybraných předmětů byl určen obsah chloridových iontů pomocí průtokové vstřikovací analýzy. Byla detailně zdokumentována rytá výzdoba náramku za účelem objasnění její výroby.

Základními korozními produkty jsou zásadité uhličitany mědi. Struktura vzorku sekery je tvářená, vzorek srpů má litou dendritickou strukturu. V obou případech se jedná o bronz obsahující cca 10,5 hm. % cínu. Slitek je měděný s obsahem příměsí (S, Fe, Ni). Vzhledem k velmi nízkému obsahu rozpustných chloridů nebude doporučeno odsolování předmětů.

