

Seznam sekcí a složení komisí

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

Komise:
Předseda: prof. Dr. Ing. David Sedmidubský
Členové: Ing. Přemysl Beran, Ph.D.
prom. chem. Ivan Jirka, CSc.
Ing. Šárka Lipnická, Ph.D.
Ing. David Petrýdes, Ph.D.
Ing. Aleš Strejc, Ph.D.
Ing. Pavlína Třešňáková, Ph.D.

Sekce: **Anorganická technologie**
posluchárna A32, 9:00 hod

Komise:
Předseda: doc. Ing. Martin Paidar, Ph.D.
Členové: Ing. Ivona Sedlářová, Ph.D.
Ing. Martin Zlámal, Ph.D.
Ing. Roman Kodým, Ph.D.
Ing. Miloslav Lhotka, Ph.D. (organizační tajemník)

Sekce: **Kovové materiály - restaurování**
hlavní chodba ústavu 106, 9:00 hod

Komise:
Předseda: prof. Ing. Pavel Novák, CSc.
Členové: Ing. Jiří Děd, CSc.
PhDr. Světlana Spiwoková

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

Komise:
Předseda: prof. Ing. Pavel Lejček, Dr.Sc.
Členové: Ing. Jan Stoulil, Ph.D.
Ing. Hong Vu, Ph.D.

Sekce: **Kovové materiály II.**
posluchárna A50, 10:15 hod

Komise:
Předseda: doc. Ing. Luděk Joska, CSc.
Členové: Ing. Alena Michalcová, Ph.D.
Ing. Petr Dvořák, 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, 8:00 hod

Komise:

Předseda: prof. Ing. František Kovanda, CSc.

Členové: doc. Ing. Barbora Doušová, CSc.
doc. Dr. Ing. Michal Hušák
RNDr. Alexandr Jegorov, CSc.
Ing. Iva Koupilová

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

Komise:

Předseda: doc. Ing. Igor Linhart, CSc.

Členové: prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.
doc. Ing. Jan Kotek, Ph.D. (PřF UK)
Ing. Eva Svobodová, Ph.D.
Ing. Radek Jurok, Ph.D. (organizační tajemník)
Ing. Jan Velík (Cayman Pharma)
Ing. Marie Dymičová (Apigenex)
Ing. Jiří Vokál, Ph.D. (Lach-Ner)

Sekce: **Organická chemie M2 - magisterská**
posluchárna A11, 9:15 hod

Komise:

Předseda: doc. Dr. Ing. Jana Hodačová

Členové: prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.
Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.
Ing. Tomáš Martinů, Ph.D.
doc. Ing. Jan Budka, Ph.D. (organizační tajemník)
Ing. Ivan Veselý, CSc. (CaymanPharma)
Mgr. Martin Švec (Vitrum VWR)
Ing. Martin Skalický, Ph.D. (Lonza)

Sekce: **Organická chemie M3 - magisterská
místnost A278e, 9:15 hod**

Komise:

Předseda: doc. Ing. František Hampl, CSc.

Členové: doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.
prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.
Ing. Václav Kozmík, CSc.
Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D. (organizační tajemník)
Ing. Petr Michálek (NeoTec)
Ing. Hanuš Slavík (Momentive)
Ing. Miroslav Dudič, Ph.D. (Medicem)

Sekce: **Organická chemie B - bakalářská
místnost A278c, 9:15 hod**

Komise:

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

Členové: doc. Ing. Stanislav Rádl, CSc. (Zentiva)
doc. Ing. Radek Cibulka, Ph.D.
Ing. Petra Cuřínová, Ph.D. (ÚCHP)
Ing. Michal Himl, Ph.D. (organizační tajemník)
Ing. Jan Kočí, Ph.D. (Interpharma)
Ing. Jan Kroupa, Ph.D. (Proxim)

Sekce: **Technologie organických látek a chemických specialit
učebna AS31a, 8:30 hod**

Komise:

Předseda: doc. Ing. Bohumír Dvořák, CSc.

Členové: Ing. Jiří Krupka, Ph.D., (tajemník)
doc. Ing. Vratislav Tukač, CSc.
doc. Ing. Josef Koubek, CSc.
Ing. Martin Hrádel, (CB&I Brno)

Sekce: **Syntéza a výroba léčiv
posluchárna A01, 8:30 hod**

Komise:

Předseda: prof. Ing. Jiří Hanika, DrSc.

Členové: Ing. Jan Patera, Ph.D., (tajemník)
doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.
Ing. Petr Durdil, CSc. (Zentiva)
Ing. Zdeněk Cakl, Ph.D., (Lonza Biotec)
Ing. Vojtěch Fajt, Ph.D., MBA, (GlaxoSmithKline)

Sekce: **Výroba léčiv**
učebna A081a, 8:30 hod

Komise:

Předseda: prof. Ing. Libor Červený, DrSc.

Členové: Ing. Eliška Vyskočilová, Ph.D., (tajemník)
Mgr. Jarmila Zbytovská, Dr.rer.nat.
Ing. Kamila Syslová
PharmDr. Michal Beneš (Zentiva)
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. Alena Kadeřábková

Sekce: **Materiálové inženýrství**
posluchárna B360, 9:00 hod

Komise:

Předseda: prof. Ing. Jindřich Leitner, DrSc.

Členové: doc. Ing. Petr Slepíčka, Ph.D.
doc. Ing. Petr Macháček, CSc.
Ing. Nikola Slepíčková Kasálková, Ph.D.
Ing. Kateřina Kolářová, Ph.D.
Ing. Zuzana Strnadová, MEDICEM Institute s.r.o.
Ing. Jiří Podzemský, ABB s.r.o.

Sekce: **Chemická informatika a bioinformatika**
posluchárna BS2, 14:00 hod

Komise:

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

Členové: Jan Pačes, Ph.D., ÚMG AV ČR v.v.i.
Filip Lankaš Ph.D., ÚOCHB AV ČR, v.v.i.
RNDr. David Hoksza, Ph.D.
Ing. Jiří Jirát, Ph.D.

Sekce: **Restaurování a konzervování skla a keramiky**
Chodba G, 8:30-10:00 hod

Komise:

Předseda: doc. Ing. Jaroslav Kloužek, CSc.

Členové: Ing. Zuzana Zlámalová Cílová, Ph.D.
Ing. Alexandra Kloužková, CSc.
Dr. Ing. Dana Rohanová
Zita Brožková, licencovaný restaurátor
Aranka Součková Daňková, licencovaný restaurátor
Ljuba Svobodová, licencovaný restaurátor

Sekce: **Restaurování a konzervování textilu**
Prostor před laboratoří A64-63, 8:30 hod

Komise:

Předseda: doc. Ing. Petr Hron CSc.

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

Sekce: **Technologie restaurování anorganických nekovových materiálů**
Prostor před laboratoří A65, 8:30 hod

Komise:

Předseda: doc. Ing. Petr Kotlík, CSc.

Členové: Ing. Monika Slavíková
Bc. Michaela Knížová

Sekce: **Technologie restaurování organických materiálů**
Prostor před laboratoří A65, 8:30 hod

Komise:

Předseda: doc. Dr. Ing. Michal Ďurovič

Členové: Ing. Irena Kučerová, Ph.D.
Ing. Alena Otmarová
Ing. Vítězslav Knotek
Ing. Benjamin Bartl

Sekce : Anorganická chemie

Příprava prášků BaTiO₃ pro použití v MRI diagnostice

Autor: Bc. Petra Bačová
Ročník: M2
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: Ing. Kateřina Rubešová, Ph.D.

Práce byla zaměřena na přípravu prášků BaTiO₃ metodou sol-gel (alkoxidová metoda nebo Pechiniho polyesterifikace) nebo precipitační metodou směsných citrátů. Byl také sledován vliv použití různých výchozích látek jednotlivých kationtů. Cílem bylo připravit prášek BaTiO₃ s vhodnou velikostí částic (maximalizace permitivity) a zároveň neobsahující uhličitánové fáze. Z tohoto důvodu byl u každé metody (a výchozích látek) optimalizován teplotní režim rozkladu gelu nebo precipitátu. Byly také připraveny vzorky se substitucí stroncia za barium, kde byla sledována zejména změna relativní permitivity s touto substitucí. Připravené prášky byly charakterizovány RTG difrakční analýzou, analýzou velikosti částic a měřením relativní permitivity. Prášky s vhodnými vlastnostmi budou v budoucnu použity ve formě suspenze ke zlepšení kvality obrazu při diagnostice pacientů pomocí magnetické rezonance.

Sekce : Anorganická chemie

Sledovanie interakcie kovů s viacvázbovými ligandmi v roztoku

Autor: Miroslava Guricová
Ročník: M1
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: Ing. Irena Hoskovicová, CSc.

Metódou kontinuálních variací (Jobova metoda) UV-Vis spektier sme sledovali interakciu iónov vybraných kovů s ligandmi typu Schiffových bází, vzniknutých kondenzáciou pyridoxalhydrochloridu (PL·HCl) s aminokyselinami alanín (Ala) a fenylalanín (Phe). Vybrané kovy (Fe, Co, Ni, Cu, Zn) patria medzi stopové prvky v ľudskom organizme, viazané v enzýmoch a bielkovinách. Hlavnou úlohou kovů je katalytické pôsobenie v enzýmoch. Železo je obsiahnuté v transportných metaloproteínoch ako prenášač kyslíku. Kobalt je súčasťou jedného z najdôležitejších vitamínů skupiny B, kobalamínu, vitamínu B12. Nikel sa nachádza v mnohých enzýmoch potrebných pri cykloch dusíka, kyslíka a uhlíka. Med' je súčasťou oxidoreduktáz a, podobne ako železo, v redukovanom stave katalyzuje Fentonov cyklus v prítomnosti H₂O₂. Zinok obsiahnutý v enzýmoch s katalytickou a štruktúrnou funkciou, je dôležitý aj pri syntéze DNA.

Jobovou metódou určíme stechiometriu pripraveného komplexu v roztoku, pričom porovnáme prípravu komplexů templátovým spôsobom (napr. PL+Ala+Kov) s prípravou komplexů z izolovaných ligandů (napr. PL-Phe+kov). Pozorovali sme aj vplyv prítomnosti molekúl vody v roztoku na reakciu iónů s ligandom.

Sekce : Anorganická chemie

Zkoumání vlivu vody při přípravě oxidu grafitu chlorečnanovými metodami

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

Grafen a jeho deriváty představují jedny z nejintenzivněji studovaných látek v posledním desetiletí. Oxid grafitu, neboli oxidovaný grafit, je výchozí látkou pro syntézy grafenu takzvanými top-down metodami. Oxid grafitu byl připravován několika postupy založenými na oxidaci vysoce čistého grafitu silnými oxidačními činidly v prostředí koncentrovaných kyselin. V průběhu oxidace grafitu dochází ke vzniku funkčních skupin kovalentně vázaných na jednotlivé grafitové roviny. Jedná se především o hydroxidové, epoxidové a karbonylové skupiny. Při oxidaci grafitu dochází k velmi výraznému nárůstu meziovinové vzdálenosti ve směru krystalové osy *c*. Pro oxidaci byly použity směsi na bázi kyseliny dusičné a kyseliny sírové s chlorečnanem draselným. V této směsi byl studován vliv koncentrace kyseliny dusičné na vlastnosti a složení připraveného oxidu grafitu. Byla syntetizována řada s měnící se koncentrací kyseliny dusičné v rozsahu 50 – 100 %. Připravené vzorky byly vhodně upraveny a charakterizovány širokým spektrem analytických metod. Jednalo se o metody molekulové vibrační spektroskopie, dále elementární spalovací analýzu, fotoelektronovou spektroskopii, teplotní stabilita byla zkoumána pomocí DSC-TGA. Morfologie byla studována pomocí AFM, SEM a STEM mikroskopie.

Sekce : Anorganická chemie

Příprava směsných fluoridů vzácných zemin použitím mikrovlnné radiace

Autor: Jan Pinc
Ročník: B3
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: Ing. Vilém Bartůněk, Ph.D.

Směsné fluoridy vzácných zemin jsou v současnosti předmětem studia pro své nelineárně optické vlastnosti. Nepatrná rozpustnost předurčuje jejich nanoformy také pro medicínální použití, například jako kontrastní látky nebo pro fotodynamickou terapii při léčbě nádorů. NaYF₄:YbEr je asi nejstudovanějším příkladem. Jeho hexagonální forma, která má nejvyšší kvantový výtěžek up-converze je těžko připravitelná jako čistá fáze.

V naší laboratoři se nám podařilo připravit čistou hexagonální fázi, dopovanou gadoliniem jako dalším základním lanthanoidem kromě yttria, mikrovlnnou syntézou v domácí mikrovlnné troubě v relativně velkém množství. Navíc bylo možné ovlivňovat velikosti připravených nanokrystalů přidávkou různých surfaktantů. Vhodná polymerní obálka může navíc, kromě jiného, také sloužit jako nosič účinných látek pro cílenou léčbu.

Sekce : Anorganická chemie

Syntézy komplexů iontů železa s ligandy odvozenými od vitaminu B6

Autor: Martin Pižl
Ročník: M1
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: Ing. Irena Hoskovicová, CSc.

Železo se nejčastěji vyskytuje ve formě Fe^{II} či Fe^{III} a hraje důležitou roli v živých organismech. Příkladem může být metabolismus aminokyselin, jehož se účastní vitamin B6. Tento vitamin obsahuje pyridoxal (PL) a pyridoxal-5-fosfát (PLP). Ligandy použité v této práci byly Schiffovy báze (iminy) připravené kondenzační reakcí PL či PLP s aminokyselinami - alaninem (Ala) a tyrosinem (Tyr). V této práci jsme se zaměřili na vliv rozdílných oxidačních stavů Fe a vliv struktury ligandů při syntézách komplexů.

Byly syntetizovány tyto ligandy: pyridoxal-alanin (PL-Ala); pyridoxal-tyrosin (PL-Tyr); pyridoxalfosfát-alanin (PLP-Ala) a pyridoxalfosfát-tyrosin (PLP-Tyr). Z těchto ligandů se podařilo izolovat tyto komplexy: $[\text{Fe}^{\text{III}}(\text{PL-Ala})(\text{HPL-Ala})]$ (**1**); $[\text{Fe}^{\text{III}}(\text{PLP-Ala})(\text{HPLP-Ala})]$ (**2**); $[\text{Fe}^{\text{III}}(\text{PL-Tyr})(\text{HPL-Tyr})]$ (**3**); $[\text{Fe}^{\text{III}}(\text{PLP-Tyr})(\text{HPLP-Tyr})]$ (**4**). Komplexy s Fe^{II} se podařilo izolovat pouze od ligandů obsahujících PLP, ale ne v dostatečné kvalitě. Při syntézách komplexů Fe^{III} se vycházelo z tris(acetylacetonátu)železitého, $[\text{Fe}(\text{acac})_3]$, aby se zabránilo hydrolyze Fe^{3+} . K syntéze Fe^{II} komplexů byla použita jednoduchá sůl – chloristan železnatý, $\text{Fe}(\text{ClO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$. Připravené látky byly charakterizovány pomocí IR, ^1H NMR, elementární analýzy, práškové RTG difrakce, MS a UV-Vis spektroskopie. Obsah Fe byl stanoven kolorimetricky.

Sekce : Anorganická chemie

Příprava a charakteristika tenkých vrstev granátů

Autor: Bc. Vojtěch Polák
Ročník: B1
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 vlnodů. Jako dopanty se nejčastěji používají ionty přechodných kovů anebo ionty kovů vzácných zemin. V naší laboratoři připravujeme roztoky pro nanášení tenkých vrstev metodou sol-gel. Vlastní depozice se pak provádí metodou dip-coating nebo spin-coating; parametry finální krystalizace (teplota a doba) se liší v závislosti na dopovaném prvku a složení roztoku použitého při depozici. Pro fázovou analýzu takto připravených tenkých vrstev se využívá RTG difrakční analýza a pro vizuální zhodnocení kvality vrstev skenovací elektronová mikroskopie. Pro měření optických vlastností vrstev se využívá měření luminiscence.

V přednášce bude podán stručný přehled možností přípravy roztoků pro nanášení vrstev granátu a vliv dopování na výsledné vlastnosti tohoto materiálu.

Fázové rovnováhy v systému Sr-Co-O

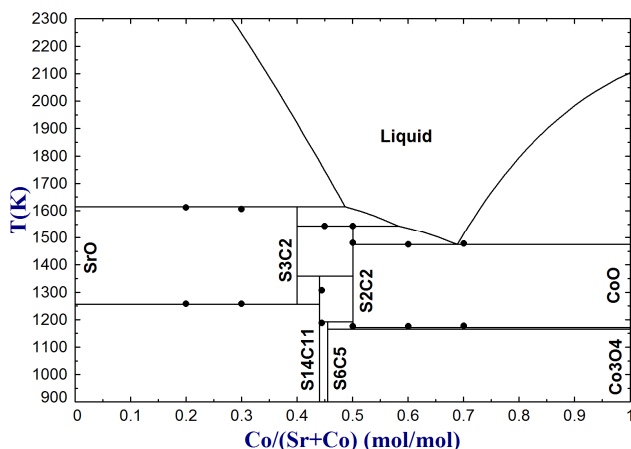
Autor: Jindřich Vítek

Ročník: M2

Ústav: Anorganické chemie

Školitel: prof. Dr. Ing. David Sedmidubský, Ing. Ondřej Jankovský

V systému Sr-Co-O byla připravena řada vzorků o různém poměru Sr:Co. Připraveny byly standardním způsobem reakcí v pevné fázi (2×kalcinace, slisování, finální výpal) a jako výchozí látky byly použity SrCO_3 a Co_2O_3 . Fázové složení jednotlivých vzorků bylo určeno pomocí rentgenové difrakční analýzy (XRD) a byly identifikovány dvě nízkoteplotní fáze ($\text{Sr}_6\text{Co}_5\text{O}_{15}$, $\text{Sr}_{14}\text{Co}_{11}\text{O}_{33-\delta}$), pro které byly Rietveldovou analýzou upřesněny jejich mřížové parametry. Pro jednofázové vzorky byly rovněž pomocí různých kalorimetrických měření (PPMS, DSC, DROP) stanoveny jejich termodynamické vlastnosti. Dále byly provedeny zakalovací experimenty potvrzující vysokoteplotní fázové složení v tomto systému ($\text{Sr}_3\text{Co}_2\text{O}_{6-\delta}$, $\text{Sr}_2\text{Co}_2\text{O}_5$). Pro vybrané vzorky se dále provedla DTA analýza, která potvrdila v systému přítomné fázové přechody. Redukcí ve vodíkové atmosféře byla určena kyslíková stechiometrie a následně termogravimetrická analýza (TGA) určila kyslíkovou nestechiomterii. Získaná experimentální data byla dále použita pro konstrukci kvazibinárního fázového diagramu Sr-Co-O pomocí programu FactSage.



Sekce: Anorganická technologie

Studium elektrochemického chování oxokyselin fosforu na Pt elektrodě.

Autor: Alena Anikina

Ročník: B1

Ústav: Anorganické technologie

Školitel: Ing. Tomáš Bystroň

Palivový článek je zařízení, které umožňuje převést energii chemickou na energii elektrickou. V poslední době jsou intenzivně studovány vysokoteplotní palivové články s protonově vodivou membránou (HT PEM FC), protože vykazují zvýšenou odolnost proti otravě katalyzátoru. Tento typ článku je obvykle provozován při teplotě 150 °C až 200 °C. Nejběžněji používaná membrána Nafion při těchto teplotách vysychá a stává se nevodivou. HT PEM FC proto obsahuje kyselinou fosforečnou dopovanou polybenzimidazolovou membránu, jež si zachovává vodivost i při teplotách nad 200 °C. Kyselina fosforečná však při provozní teplotě článku podléhá v přítomnosti vodíku redukci na kyselinu fosforitou a fosfor. V literatuře nejsou informace o elektrochemickém chování těchto látek dostupné. Cílem této práce bylo prostudovat elektrochemické chování kyseliny fosforité na Pt elektrodě. Zároveň bylo studováno chování kyseliny fosforečné, která se svou reaktivitou i strukturou kyselině fosforité podobá. Při práci byla použita metoda cyklické voltametrie. Bylo zjištěno, že kyselina fosforečná i fosforitá podléhají anodické oxidaci na kyselinu fosforečnou a adsorbují se na povrch Pt elektrody.

Sekce : Anorganická technologie

Vliv parametrů elektrodového roztoku na výkon a distribuci proudu v pilotní elektrodialýzní jednotce

Autor: Bc. Petr Bubeníček
Ročník: M1
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Ing. Roman Kodým, Ph.D.

Elektrodialýza (ED) je elektromembránový separační proces, při němž dochází k separaci iontů z roztoku působením elektrického pole na základě rozdílné permselektivity použitých membrán. ED nachází uplatnění ve výrobě pitné vody z brakických či mořských vod ale také v úpravě a regeneraci průmyslových odpadních vod. Význam ED v současnosti roste také v oblastech farmaceutického a potravinářského průmyslu.

ED jednotka je typickým představitelem zařízení typu rám-a-deska. Současný vývoj ED je spjatý se zvyšováním objemového a odsolovacího výkonu jednotky, např. zvyšováním počtu membránových párů či aktivní plochy membrán. To může vést k závažným problémům s rovnoměrností distribuce hmoty a náboje v zařízení vedoucí ke snížení účinnosti a životnosti ED. Pro optimalizaci stávajících a návrhu nových aplikací ED je důležité pochopení souvislostí mezi provozními parametry a lokálními vlastnostmi uvnitř systému. Za tímto účelem byla navržena pilotní ED jednotka s elektrodami rozdělenými na 6 segmentů umožňující stanovení distribuce proudu podél elektrod. V rámci této práce je pak studován vliv parametrů elektrodových roztoků (koncentrace a objemový průtok) na výkon a rovnoměrnost distribuce proudu v ED v pilotním měřítku.

Sekce : Anorganická technologie

Vývoj jednotky pro alkalickou elektrolýzu vody

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

Alkalická elektrolýza je historicky důležitým zdrojem vodíku pro průmysl. Tato technologie je již dlouho používána v průmyslovém měřítku, avšak rovněž nabízí řešení perspektivní oblasti pro skladování energie. Za tímto účelem je však třeba nových optimalizovaných jednotek vhodných pro přerušovaný provoz.

Pro návrh bipolární jednotky složené z pěti cel o předpokládané kapacitě 21 litrů vodíku za hodinu, byla provedena základní analýza parazitních proudů. Pro tuto analýzu byl sestaven tzv. ekvivalentní obvod. Následně bylo využito experimentálně získaných dat při využití jedné cely s porézními niklovými elektrodami a aniontově selektivní membránou. Díky tomu bylo možno zavést soustavu lineárních rovnic jako adekvátní matematický model. Při dostatečném zjednodušení byla stanovena základní geometrie cely, která ovlivňuje velikost parazitních proudů.

I přestože v navržené geometrii nepřekračují parazitní proudy 2%, je třeba zlepšit provozní parametry alkalické elektrolýzy pro zvýšení intenzity procesu.

Sekce : Anorganická technologie

Vývoj nových typů membrán na bázi ZIF materiálů

Autor: David Dlouhý
Ročník: B3
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Dr. Ing. Vlastimil Fíla

Většina průmyslově realizovaných procesů separace plynů v současné době používá fyzikálně chemických principů, jako je např. adsorpce plynu na porézních materiálech, absorpce plynů do vhodné kapaliny nebo chemická reakce daného plynu s vhodnou reakční komponentou za vzniku pevné látky. Separace plynů s využitím membrán různých typů je další, v současnosti významně se rozvíjející, metodou používanou k odstraňování CO_2 ze zemního plynu a bioplynu, popř. k separaci vodíku.

Cílem práce byla příprava nových materiálů na bázi ZIF (Zeolitic Imidazole Framework), které by mohly sloužit jako adsorbenty, popř. k syntéze membrán pro separaci plynů. Dnešní struktury ZIFů jsou založeny na bázi různě substituovaného imidazolu, sloužícího jako tzv. „linker“ a kovech, schopných tvořit koordinační komplexy v tetraedrickém uspořádání. Jedná se zejména o Zn^{2+} , Co^{2+} a v menší míře také o Cu^{2+} a Fe^{2+} . V této práci byly zkoumány materiály vycházející ze Zn^{2+} a 2-ethylimidazolu a Ni^{2+} a 2-methylimidazolu. Jako rozpouštědlo byla použita deionizovaná voda nebo methanol.

Sekce : Anorganická technologie

Nové typy membrán pro alkalickou elektrolýzu vody

Autor: Martin Ďurovič
Ročník: B3
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Ing. Jaromír Hnát

Vodík se v dnešní době dostává do popředí zájmu především jako zdroj nebo jako médium při skladování energie. Vyrábět jej lze několika způsoby. V praxi se nejčastěji používá parní reforming a parciální oxidace. Ekologičtější postup je vyrábět vodík elektrolýzou přímo z vody při využití obnovitelných zdrojů energie. V průmyslu je nejrozšířenější alkalická elektrolýza vody. Její hlavní předností je možnost použití jiného než platinového katalyzátoru. Ve srovnání s kyselou elektrolýzou je však nevýhodou nižší proudová hustota v elektrolyzáru. Výběr elektrod, elektrolytu nebo druh anion-selektivní membrány může výrazně ovlivnit velikost protékajícího proudu a napětí na cele. V naší práci jsme vyzkoušeli dva typy membrán. Membránu na bázi trimethyl aminu a na bázi triethylen diaminu. Pomocí impedanční spektroskopie jsme změřili jejich vodivosti za různých teplot. Dále jsme testovali stabilitu při dlouhodobém zatížení v elektrolyzáru, iontově výměnnou kapacitu před a po zátěžovém testu. Z naměřených a vypočtených hodnot jsme vyhodnotili aplikovatelnost studovaných membrán v procesu průmyslové elektrolýzy vody.

Sekce : Anorganická technologie

Alginátová granulace

Autor: Bc. Vojtěch Galek
Ročník: M2
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Ing. Miloslav Lhotka, Ph.D.

Granulace látek má v chemickém průmyslu značné využití. Existuje mnoho granulačních postupů např. vlhká granulace, fluidní granulace, extrudace, tabletizace, peletizace a další. Předložená práce je zaměřena na použití sprejových granulačních metod, především mokré alginátové granulace. Technologie spočívá v dávkování suspenze alginátu s granulovanou látkou do granulačního média za vzniku nerozpustných gelových částic. Po propláchnutí a vysušení těchto gelových meziproduktů vznikly sférické částice, které pak byly podrobeny měření velikosti částic. Jako modelové látky pro granulaci byly zvoleny anorganické oxidy a kryolit (Na_3AlF_6). Postupným upravováním parametrů alginátové granulace (jako např. volba promývacího média, složení vstupní suspenze) byly zjištěny optimální podmínky pro tento proces. Na základě těchto výsledků byla navržena a sestrojena laboratorní granulovací aparatura, která spojuje granulační a promývací část.

Sekce : Anorganická technologie

Vliv provozních podmínek na vysokeplotní membránové palivové články

Autor: Bc. Adam Giurg
Ročník: M2
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: doc. Ing. Martin Paidar, Ph.D.

Membránové palivové články vyžadují použití platinových katalyzátorů a ty jsou citlivé na katalytické jedy. Jedním z možných způsobů zabránění otravě katalyzátoru oxidem uhelnatým je zvýšení provozní teploty nad 160°C . Zvýšení teploty však vyžaduje použití nových druhů membrán na bázi PBI (polybenzimidazol).

Do palivových článků jsem používal systém MEA (membrane electrode assembly) od firmy Danish Power Systems. Palivové články jsem provozoval po dobu minimálně 1600 hodin při konstantní proudové hustotě $0,2 \text{ A/cm}^2$ s vodíkem jako palivem a s kyslíkem nebo se vzduchem jako oxidantem a měřil jsem průběh napětí. Každý týden jsem měřil zátěžové křivky a impedanční spektra za použití obou druhů oxidačních činidel. Po dlouhodobém testování jsem systém MEA nechal analyzovat pomocí RTG difrakční analýzy, abych zjistil velikost částic platinového katalyzátoru. Z těchto měření jsem vyhodnotil průběh degradace palivových článků.

Výkon palivového článku byl po celou dobu provozu téměř konstantní pro oba oxidanty. Docházelo pouze ke zvětšování částic platiny a ke zvětšování polarizačního odporu anody a katody, ale na druhou stranu také k poklesu odporu membrány což může být způsobeno snížením tloušťky membrány.

Sekce : Anorganická technologie

Elektrochemická charakterizace iontových kapalin pro sekundární lithiové články

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

Lithiové články jsou běžně využívány ve spotřebitelské elektronice, jako jsou např. mobilní telefony, notebooky či fotoaparáty. Výhodami lithiových baterií oproti jiným akumulátorům jsou vysoké napětí, dlouhá životnost, malé samovybití a zanedbatelný paměťový efekt. Ústřední součástí lithiových akumulátorů jsou anoda, katoda a elektrolyt, na který jsou kladeny vysoké nároky z hlediska viskozity, vodivosti, tepelné a elektrochemické stability. V současnosti jsou jako elektrolyt nejčastěji používány roztoky solí Li^+ v organických rozpouštědlech, které vykazují řadu nedostatků. Mezi nejvýznamnější patří omezená tepelná a elektrochemická stabilita, které vedou k poklesu kapacity baterie. Řešením může být nahrazení původního elektrolytu za iontovou kapalinu (IL).

Cílem mé práce bylo zvolenými elektrochemickými postupy charakterizovat vybrané IL a posoudit jejich vhodnost pro použití v lithiových článcích. V první fázi bylo u vybraných IL stanoveno elektrochemické okno a vodivost. Závislost proudové hustoty na napětí byla měřena ve tří-elektrodovém uspořádání. Vodivost byla stanovena pomocí RLC můstku ve čtyř-elektrodovém uspořádání. Na základě provedených experimentů byly posouzeny a následně porovnány elektrochemické vlastnosti vybraných iontových kapalin.

Sekce : Anorganická technologie

Příprava elektrolytu pro vysokoteplotní palivové články a elektrolyzéry

Autor: Jiří Lieberzeit
Ročník: B3
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: doc. Ing. Martin Paidar Ph.D.

Nalezení efektivního způsobu skladování energie a alternativ za fosilní paliva jsou pro energetickou budoucnost klíčové úkoly. Vodíkové technologie jsou v tomto směru zajímavou možností. Vysokoteplotní elektrolyzér (SOEC) umožňuje využít snadno dostupné odpadní teplo pro snížení spotřeby elektrické energie, a tím pádem zlevnit výrobu vodíku elektrolýzou vody. Takto lze účinně ukládat aktuálně přebytečnou elektrickou energii, která je generována zpět palivovým článkem. Vysokoteplotní palivový článek (SOFC) má oproti jeho nízkoteplotním variantám řadu výhod – rychlou kinetiku, odolnost proti nečistotám a nevyžaduje drahé katalyzátory či údržbu elektrolytu.

Cílem této práce je nalézt optimální metodu přípravy elektrolytu na bázi ZrO_2 , použitelného pro obě zmíněná zařízení. Požadovanými vlastnostmi jsou zejména plynotěsnost a vysoká vodivost pro ionty O^{2-} . Příprava vzorků elektrolytu spočívá ve vylisování tablet z YSZ prášku a jejich následné slinutí výpalem. Zkoumanými faktory pro dosažení optimálních vlastností jsou především teplota výpalu a lisovací tlak. Při teplotách nižších než 1350°C nedochází k dostatečně plynotěsnému slinutí.

Sekce : Anorganická technologie

Fotokatalytická oxidace nízkých koncentrací toluenu v plynné fázi v ISO reaktoru

Autor: Bc. Libor Obal
Ročník: M1
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: prof. Dr. Ing. Josef Krýsa

Toluen patří mezi těkavé organické látky (VOC), což je skupina polutantů snižující kvalitu ovzduší jak ve venkovních, tak ve vnitřních prostorech již při nízkých koncentracích. Cílem této práce bylo stanovit míru ovlivnění fotokatalytické oxidace toluenu transportem hmoty při podmínkách daných normou ISO 22197-3. Nanesením komerčního TiO_2 (P90, Degussa) na skleněné destičky o rozměrech 5×10 cm byly připraveny vrstvy s různým obsahem TiO_2 (0,25; 0,6; 1,5 a 3 mg TiO_2/cm^2). Degradace toluenu byla prováděna v průtočné aparatuře při vstupní koncentraci 5 ppm toluenu v technickém vzduchu v rozmezí průtoků $0,3\text{--}8$ l min^{-1} a za konstantní relativní vlhkosti 50 % při 25 °C. Koncentrace toluenu byla analyzována plynovým chromatografem Varian CP-3800 vybaveným plamenově-ionizačním detektorem. Bylo zjištěno, že střední rychlost fotokatalytické oxidace toluenu roste s průtokem do dosažení limitní hodnoty u všech testovaných vrstev, což prokazuje vliv transportu hmoty na rychlost fotokatalytické oxidace toluenu (při průtocích $0,3\text{--}4$ l min^{-1}). Podmínky uvedené v normě byly diskutovány v souvislosti s fotokatalytickou aktivitou testovaných povrchů a chybou jejího stanovení.

Sekce : Anorganická technologie

Optimalizace kyslíkové elektrody pro vysokoteplotní elektrolýzu vody

Autor: Bc. Petr Průša
Ročník: M2
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Ing. Filip Karas

Vysokoteplotní elektrolýza vody je jedna z možných technologií pro výrobu vodíku a kyslíku, která je nyní ve fázi intenzivního vývoje. Proces probíhá při teplotách 800 až 1000°C. Vysoká teplota snižuje množství elektrické energie potřebné na rozklad vodní páry a zároveň se zvyšuje účinnost celého procesu.

Jako elektrolyt se nejčastěji používá keramický ZrO_2 stabilizovaný Y_2O_3 (YSZ), který je vodivý pro O^{2-} ionty, a na který těsně přiléhají elektrody. Materiál pro přípravu kyslíkové elektrody je buď čisté LSM ($\text{La}_{0,8}\text{Sr}_{0,2}\text{MnO}_3$) nebo lépe směs LSM a YSZ. Čisté LSM je převážně elektronově vodivé a oxidace O^{2-} iontů tak probíhá zejména na rozhraní YSZ/LSM. Přídavkem YSZ do vrstvy elektrody se významně zvýší mezifázové rozhraní. Oxidace O^{2-} iontů tak může probíhat i v objemu anody. Cílem mé práce proto bylo nalézt optimální složení kyslíkové elektrody. Pro zjištění optimálního složení elektrody byla použita metoda cyklické voltametrie. Pracovní elektroda byla polarizována v rozsahu potenciálu od -1V do +1V. Z naměřených výsledků vyplývá, že optimální složení elektrody se pohybuje kolem 50 % hm. LSM. Výsledky rovněž ukazují, že optimální složení elektrody se s pracovní teplotou mírně liší.

Sekce : Kovové materiály - restaurování

Čistenie historického olova s využitím elektrochémie

Autor: Zuzana Bodíková
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Milan Kouřil, Ph.D.

Historické olovo uložené v depozitářích a archívech je často vystavené nepříznivým podmínkám, které způsobují jeho korózi. Když je tento proces autokatalitický, je důležité odstranit korozní produkty z povrchu. Odstránění korozních produktů olovených předmětů je možné několika způsoby. Jednotlivé metody se liší hlavně použitím rozdílných elektrolytů - nejčastěji elektrolyt je **kyselina sírová** a **síran sodný**. Cílem této práce bylo popsat děje, ke kterým dochází při redukci korozních produktů na bázi uhličitánů olova pomocí **potenciostatické** a **galvanostatické redukce** a posoudit využití těchto postupů na odstránění vrstvy korozních produktů olova. Dominantní efekt při odstraňování korozních produktů na olovených předmětech je čistě jejich chemické rozpouštění v kyselé prostředí a ne elektrochemický účinek vedoucí k redukci korozních produktů na kovové olovo. Súčasná katodická polarizácia chráni olovený predmet pred vznikom novej vrstvy. Pri galvanostatickej redukcii sa dokázalo, že kyselina sírová redukuje olovené kationy cez síran olovnatý na kovové olovo, na konci redukcie vzniká vodík.

Sekce : Kovové materiály - restaurování

Srovnání vlivu vybraných detergentů na stav povrchu stříbrných historických předmětů

Autor: Anežka Černá
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Šárka Msallamová

Práce se zabývá vlivem detergentů a teploty sušení na barevnou změnu povrchu stříbrných liturgických předmětů, které jsou ve vlastnictví Židovského muzea v Praze. Práce dále hodnotí odmašťovací schopnost používaných detergentů v porovnání s ostatními odmašťovacími prostředky používanými při jejich čištění (aceton, NH_3). Z výsledků práce vyplývá, že výrazný vliv na barevnou změnu povrchu stříbrných předmětů má vysoká teplota jejich sušení. Samotné detergenty se s teplotou nerozkládají a způsobují barevnou změnu povrchu stříbra pouze při jejich nedokonalém oplachu. Z výsledků měření odmašťovací schopnosti detergentů v porovnání s acetonem a roztokem NH_3 vyplývá, že jejich odmašťovací schopnost je nízká a k odmašťování stříbrných liturgických předmětů nejsou vhodné.

Sekce : Kovové materiály - restaurování

Vliv kyseliny mravenčí a thiomočoviny na mosazné ozdobné prvky historických textilií

Autor: Martina Kmoníčková
Ročník: B3
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Šárka Msallamová

Na historických textilních předmětech se často nachází kovové součásti z měděných slitin jako dracouny, filtry, knoflíky a spony. Protože dracouny a někdy ani jiné ozdoby nelze z textilií demontovat, je nutné najít způsob odstraňování korozních produktů dostatečně účinný, ale šetrný k oběma materiálům. V literatuře bývá pro slitiny mědi doporučován 3% roztok kyseliny mravenčí popř. s přídavkem 2% thiomočoviny. Cílem práce bylo posouzení vlivu kyseliny mravenčí na korozní rychlost a vizuální změnu povrchu mosazi a pozorování inhibičních vlastností thiomočoviny obsažené v roztoku. Několik způsobů aplikace představovalo možnou míru odstranění roztoků z povrchu mosazných lamel. Výsledky byly hodnoceny vizuálně světelným mikroskopem, složení korozních produktů bylo určeno RTG difrakční analýzou a upřesněno infračervenou mikrospektroskopií. Korozní rychlost mosazných vzorků byla vyhodnocena metodou hmotnostních úbytků. Z výsledků plyne, že thiomočovina v roztoku kyseliny mravenčí má výrazné inhibiční vlastnosti, ale jejím vlivem dochází ke značným barevným změnám mosazných vzorků. Použití samotné kyseliny mravenčí vede k vyšší korozní rychlosti mosazi a rovněž k barevným změnám povrchu vzorků. Využití kyseliny mravenčí bez i s přídavkem thiomočoviny k odstraňování korozních produktů měděných slitin dracounových textilií, tak jak to doporučují někteří autoři, není zcela vhodné.

Sekce : Kovové materiály - restaurování

Průzkum a restaurování bronzového kruhu z doby železné s využitím 3D technologií

Autor: Jiří Kmošek
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Šárka Msallamová, Jaroslav Prášil restaurátor s licencií

Práce se zabývá materiálovým průzkumem a restaurováním archeologického předmětu – bronzového kruhu s využitím moderních 3D technologií rekonstrukčních zásahů. Předmět byl nalezen jako součást hrobové výbavy z přelomu starší a mladší doby železné na lokalitě Červený Hrádek v západních Čechách. Kombinace mechanického namáhání a korozního poškození (nemoc bronz) vedla k rozpadu předmětu na množství fragmentů. Průzkum předmětu byl zaměřen na určení korozního poškození, chemického a fázového složení kovového materiálu, technologických aspektů výroby předmětu a identifikaci předchozích konzervátorských zásahů. Při tvarové rekonstrukci fragmentů předmětu byly využity moderní 3D technologie. Jednotlivé fragmenty byly prostřednictvím technologie optického 3D skenování s vysokým rozlišením převedeny do digitální podoby a virtuálně rekonstruovány do původního tvaru. Vzniklý 3D model předmětu posloužil jako předloha pro vytvoření pomocné šablony prostřednictvím technologie 3D tisku do poloprůhledného polymerního materiálu. Na vytištěnou šablonu byly jednotlivé kovové fragmenty hmotně rekonstruovány. Tato práce přibližuje dostupné 3D technologie, které jsou běžně využívány v zahraničních institucích za účelem kvalitnější dokumentace, prezentace a restaurování různých historických památek.

Sekce : Kovové materiály - restaurování

Materiálový průzkum 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 licenci

Práce se zabývá materiálovým průzkumem 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 z postříbřené mosazi, rám s řetízkem jsou z alpaky a ozdobné kuličky jsou ze stříbra s malým obsahem mědi. Při analýze mosazných kroužků byla ve vrstvě stříbření identifikována rtuť, jedná se tedy o žárové stříbření. Rám kabelky je také postříbřený, ale zde se rtuť neobjevila, takže nemůžeme s jistotou potvrdit způsob stříbření. Použité materiály byly identifikovány elektronovým rastrovacím mikroskopem TESCAN VEGA3 S EDS analyzátozem Oxford Instruments INCA 350. Z nepohledové strany rámu byla metodou infračervené spektroskopie identifikována původní laková povrchová úprava. Z mosazného kroužku byl připraven metalografický výbrus. Struktura materiálu byla zvýrazněna leptáním pomocí Ratinova činidla a odpovídá jednofázové tvářené mosazi se závěrečným rekrystalizačním žiháním. V místě porušení povrchové vrstvy stříbřením je dobře patrné odzinkování mosazi. Dle výsledků materiálového průzkumu bude vypracován restaurátorský záměr, na jehož základě bude předmět restaurován.

Sekce : Kovové materiály - restaurování

Kovaný stojan na svíce

Autor: Tomáš Mori

Ročník: B3

Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství

Školitel: Ing. Jiří Děd, CSc., Jaroslav Prášil, restaurátor s licenci

Předmětem restaurování byl kovaný stojan na svíce z roku 1694. Je vyrobený ze svářkového železa a skládá se ze dvou hlavních částí: tyčového stojanu a tří spojených kruhů s hroty na svíce. Některé části svícnu jsou zdobeny tordováním a rýhováním. Na spodním kruhu svícnu je vyražen letopočet 1694 a značka MP. Předmět nebyl mechanicky poškozen, chybělo pouze několik trnů a celý povrch byl pokryt tenkou vrstvou korozních produktů železa. Na povrchu se místy nalézaly zbytky degradovaného nátěru. Metalografickou analýzou z odebraných vzorků bylo zjištěno, že restaurovaný svícen byl celý vyroben ze svářkového železa s četnými struskovými vměstky. Analýzy složení byly provedeny pomocí rastrovacího elektronového mikroskopu TESCAN VEGA 3 s EDS analyzátozem OXFORD Instruments INCA 350. Během restaurování byly mechanicky odstraněny korozní produkty a zbytky degradovaného nátěru. Po doplnění chybějících trnů byly zbylé korozní produkty na povrchu předmětu stabilizovány roztokem 10% kyseliny fosforečné v ethanolu s taninem a nakonec byl povrch předmětu zakonzervován roztokem Paraloidu B72 v toluenu a byl navržen ochranný režim s ohledem na umístění a další využití předmětu.

Sekce : Kovové materiály - restaurování

Studium nekorozních vlivů na odezvuolověného rezistometrického čidla

Autor: Kristýna Strachotová
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Milan Kouřil, Ph.D.

Pro monitorování vzdušných polutantů a těkavých organických sloučenin (VOC) v depozitářích archivů a muzeí bývají používány metody založené na korozním chování kovů. Agresivita atmosféry je dána rychlostí vzniku korozních produktů na indikačních kovových kupónech. Příkladem takové metody je tzv. Oddyo test (metoda rychlého korozního testu agresivity určité látky v uzavřeném prostoru), který využívá kupóny 3 kovů – olovo, měď a stříbro. Olovo je využíváno pro jeho vysokou citlivost na organické sloučeniny. Rezistometrie je levnou, citlivou, nedestruktivní metodou přímo monitorující korozní úbytek kovu (korozní rychlost kovu) díky přesnému měření změn elektrického odporu kovu. Rezistometrie je metoda výrazně citlivá i na malé změny dějů probíhajících v krystalické mřížce kovu, proto bývá použita k nepřímému studiu mikrostruktury kovu a jejich změn. Tyto nekorozní vlivy mohou být příčinou obtížné reprodukovatelnosti dat získaných metodou rezistometrie při sledování korozní rychlosti olova v uzavřené atmosféře a za konstantní teploty. Pro eliminování nekorozních vlivů při sledování korozní rychlosti olova metodou rezistometrie byla navržena změna čištění olověného povrchu - moření.

Sekce : Kovové materiály - restaurování

Archeometalurgická studie římských artefaktů z jižního Portugalska

Autor: Bc. Eva Voráčová
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Pedro Valério, Ph.D.

Cílem této práce byl archeometalurgický průzkum souboru kovových artefaktů a vzorků kelímkové strusky pocházejících z 2. století př. n. l. Tyto předměty byly objeveny na jihu Portugalska ve městě Monte Moliao. U artefaktů byla provedena metalografická analýza a bylo zjištěno jejich chemické složení pomocí mikro-XRF a pomocí elektronové mikroskopie. Výsledky studie ukázali, že místní obyvatelstvo používalo levnější materiál a to čistou měď pro výrobu hřebíků, kdežto na výrobu dekorativních předmětů jako fibuly používali bronz či olovnatý bronz. Struktura kovových artefaktů byla rozdílná. Většina však vykazovala stav po rekrystalizačním žhání. Kromě toho byla pozorována také lící struktura u dekorativních předmětů. Analýzou kelímkové strusky bylo zjištěno, že se odlité artefakty vyráběly přetavováním přímo na místě nálezu ve městě Monte Moliao.

Sekce : Kovové materiály I.

Korozní chování beta slitin titanu legovaných zirkoniem

Autor: Adriana Bernatíková
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jaroslav Fojt, Ph.D.

Beta slitiny titanu legované biotolerantními prvky jsou v současné době uvažovány jako náhrady stávajících materiálů, například slitiny Ti-6Al-4V, pro implantáty. Jejich korozní odolnost by měla být na srovnatelné úrovni s dosud používanými slitinami. Navíc, konstrukční řešení některých moderních implantátů vede ke vzniku stíněných prostor, kde může docházet k lokalizaci korozního napadení. Cílem této práce bylo zhodnotit korozní chování a náchylnost nově vyvíjených beta slitin titanu na bázi Ti-Nb-Zr(Ta) k lokalizaci korozního napadení. Hodnocení bylo realizováno na základě elektrochemických měření a expozičních zkoušek. Měřeno bylo v modelových tělních prostředích a to i v přítomnosti fluoridových iontů. Korozní odolnost beta slitin byla na srovnatelné úrovni s Ti-6Al-4V, v prostředí fluoridových iontů vyšší. Z hlediska náchylnosti k lokálnímu koroznímu poškození jsou nové slitiny odolnější než standardně používaná slitiny Ti-6Al-4V.

Sekce : Kovové materiály I.

Štruktúra a vlastnosti nanokryštalického niklu pripraveného redukciou z roztokov nikelnatých solí

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

V této práci byla popsána příprava nanokryštalického Ni redukcí z roztoku nikelnatých solí. K přípravě nanočástic byly použity alkalické a kyselé lázně na bezproudové niklování. Vzniklé nanočástice proto obsahovaly přibližně 10% fosforu. Nebyl prokázán vliv složení lázně na fázové složení produktu. Naproti tomu byl prokázán vliv složení lázně na velikost vznikajících částic.

Částice Ni-P byly následně kompaktizovány pomocí plazmového slinování. Byl prokázán značný rozdíl ve fázovém složení kompaktního produktu a nanočástic Ni-P tepelně zpracovaných za podmínek kompaktizace. Tento výsledek ukazuje na značně nerovnovážné podmínky během kompaktizace. Kromě přípravy nových materiálů slouží výsledky této práce také k popisu perspektivní technologie práškové metalurgie.

Sekce : Kovové materiály I.

Struktura a vlastnosti slitin železa s ušlechtilými kovy pro biodegradovatelné implantáty

Autor: Bc. Iva Fialová
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Alena Michalcová, Ph.D.

Železo je slibným materiálem pro výrobu biodegradovatelných implantátů. Jeho nevýhodou je poněkud paradoxně nízká korozní rychlost. V této práci bylo zkoumáno, zda je možné tento problém řešit legováním železa ušlechtilými kovy. Množství legúr musí být dostatečně malé, aby nedošlo k nadměrnému zvýšení ceny i hmotnosti implantátu a proto bylo v této práci zvoleno ve výši 2 hm.%.

Práškovou metalurgií byly připraveny vzorky Fe, Fe-Ag, Fe-Pd, Fe-C a Fe-Mn (v tomto případě 30 hm.%). U vzorků byla zkoumána struktura pomocí světelné a elektronové mikroskopie. Dále byly vzorky podrobeny expozičním zkouškám a korozní rychlost byla vyhodnocena z hmotnostních úbytků a z obsahu iontů ve výluhu. Výsledky expozičních zkoušek byly porovnány s potenciodynamickým měřením.

Sekce : Kovové materiály I.

Korozní vlastnosti slitiny titanu s molybdenem

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

V současnosti jsou intenzivně studovány slitiny titanu se stabilní beta strukturou. Příznivých mechanických vlastností a výborné korozní odolnosti lze využít v medicínských aplikacích. Mezi komerčně dostupné materiály tohoto typu patří slitina titanu legovaná molybdenem.

Studováno bylo korozní chování slitiny Ti15Mo v modelových elektrolytech. Naměřené chování bylo porovnáno s vlastnostmi čistých kovů - titanem a molybdenem. Jako testovací modelové elektrolyty sloužily fyziologický roztok, fyziologický roztok s pH 4,2, fosfáty pufrovaný roztok a fyziologický roztok s pH 4,2 a 200 ppm fluoridových iontů. Korozní odolnost slitiny v prostředí, které neobsahovalo fluoridy, odpovídá čistému titanu, ve fluoridovém prostředí je slitina, na rozdíl od titanu, pasivní. Druhá část práce zahrnovala testování rozsáhlého souboru podmínek s cílem vytvořit nanostruktur na povrchu slitiny. Nanostrukturou ve formě trubiček se podařilo pokrýt cca 40 % povrchu slitiny.

Sekce : Kovové materiály I.

Interakce lidských osteoblastů s modifikovaným povrchem slitiny TiAlV

Autor: Kateřina Chotová

Ročník: M2

Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství

Školitel: doc. Ing. Luděk Joska, CSc., RNDr. Marta Vandrovcová, Ph.D.

Titanové implantáty jsou tkání plně akceptovány a přímo se vážou s kostí. V praxi se však můžeme setkat s řadou nepříznivých efektů, které limitují životnost implantovaného materiálu, např. infekce nebo nedostatečné vhojení. Elektrochemickým způsobem lze na povrchu titanových slitin vytvořit vrstvu trubek do průměru 100 nm. Vlastnosti této vrstvy lze dále využít a modifikovat za účelem zvýšení její bioaktivity.

Cílem práce bylo aplikovat různé chemické a tepelné úpravy na vytvořenou nanostrukturu a sledovat biologickou odezvu buněk na vzorcích s upraveným povrchem. Biologické testy probíhaly s buňkami Saos-2 (buněčná linie odvozená z lidského osteosarkomu). Jejich chování bylo sledováno 1. 3. a 7. den po nasazení.

Počet buněk od nasazení rovnoměrně stoupal na všech typech modifikovaných povrchů. U chemicky ošetřených vzorků byl počet větší než na polystyrenu, který byl zvolen jako pozitivní kontrola. Po 24 hodinách kultivace byla plocha rozprostření buněk u polystyrenu. Životaschopnost buněk 7. den po nasazení na všech modifikovaných podkladech činila téměř 100%. Změna chemického složení nanostruktur zvýšila biologickou odezvu povrchů, tepelným zpracováním se nepodařilo bioaktivitu slitiny zvýšit.

Sekce : Kovové materiály I.

Vliv tepelného zpracování na vlastnosti hliníkových slitin

Autor: Martin Libich

Ročník: M2

Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství

Školitel: Ing. Jan Šerák, Ph.D.

Práce se zadáním z průmyslu. Cílem bylo zjistit vliv tepelného zpracování hliníkových slitin A380 a ČSN 424331 na jejich mechanické a korozní vlastnosti. Dále byl vyhodnocen vliv nesprávně provedeného tepelného zpracování, při příliš krátké a příliš dlouhé době precipitačního vytvrzování. Obě slitiny byly zkoušeny při dvou různých teplotách. Dle očekávání byl potvrzen vliv tepelného zpracování na mechanické vlastnosti, ty dosáhly nejvyšších hodnot při tepelném zpracování provedeném dle doporučení. Práce ukázala i vliv tepelného zpracování na korozní odolnost obou slitin, byl prokázán negativní vliv přestárnutí na korozní odolnost obou slitin.

Sekce : Kovové materiály I.

Příprava a vlastnosti nanostrukturovaných povrchů titanových slitin

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

Titan a jeho slitiny se v lékařství využívají na výrobu ortopedických a dentálních implantátů. Důvodem je jejich vysoká korozní odolnost a bioinertnost. V současné době je výzkum zaměřen na bioaktivaci povrchu, to jest jeho modifikaci, vedoucí ke zvýšení osseointegrace. Jedna z možností, jak upravit povrch implantátů, je elektrochemická oxidace. Po vhodném nastavení podmínek se na povrchu vytvoří uspořádaná struktura nanotrubelek TiO_2 . Cílem této práce bylo upravit touto technikou povrch slitiny Ti-6Al-4V a testovat nový způsob řízení anodické oxidace pomocí napěťového režimu. Dále byl prozkoumán vliv geometrie uspořádání vzorek – protielektroda. Posledním bodem práce bylo upravit povrch na reálném implantátu, kterým byla jamka kyčelního kloubu.

Sekce : Kovové materiály I.

Vlastnosti rychle ztuhlé a extrudované slitiny Zn-Mg

Autor: Bc. Markéta Machová
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Alena Michalcová, Ph.D.

Slitiny Zn-Mg jsou tvořeny biodegradovatelnými prvky a proto by bylo možné uvažovat o nich jako o vhodných materiálech pro biodegradovatelné implantáty. Limitujícím faktorem pro jejich použití mohou být nedostatečné mechanické vlastnosti. Cestou jak tento problém řešit se jeví zpracování slitin metodou melt spinning, tedy rychlým tuhnutím.

V práci byla připravena slitina Zn-Mg1,6 a následně zpracována metodou melt spinning při různých rychlostech ochlazovacího kotouče. Vzniklé rychle ztuhlé pásy byly kompaktizovány extruzí za tepla. Vlastnosti materiálů připravených práškovou metalurgií byly porovnány s litým materiálem a s materiálem litým a následně extrudovaným.

U všech materiálů byla popsána struktura, naměřena tvrdost a byly naměřeny mechanické vlastnosti v tlaku.

Sekce : Kovové materiály I.

Antibakteriální úprava nanostrukturovaného povrchu slitiny Ti6Al4V

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

Osídlování implantovaného biomateriálu kostními buňkami může být ovlivněno nežádoucími bakteriálními procesy. Přítomnost patogenů má za následek vznik infekce, která je jednou z možných komplikací vedoucí k selhání implantátu.

Cílem práce bylo nalezení vhodné antimikrobiální modifikace nanostruktury na slitině Ti6Al4V. Jednalo se o různé metody nanášení stříbra, které je známé svými dobrými baktericidními účinky. Různými technikami (naprašování, elektrochemie, sol-gel) byla vytvořena série vzorků s povrchem modifikovaným stříbrem a testována antibakteriální aktivita. Testy proběhly s využitím indikátorových kmenů bakterií Escherichia coli a Staphylococcus aureus.

Výsledky této práce ukázaly, že i nemodifikovaná nanostruktura na Ti6Al4V působí na bakterie v malé míře letálně. Antibakteriální testy na indikátorovém kmeni E. coli prokázaly, že všechny dále modifikované nanostruktury vykazovaly vynikající antibakteriální účinnost. Testy na kmeni S. aureus potvrdily, že tento druh je agresivnější, avšak i zde byly účinky antibakteriálních povrchových úprav zcela vyhovující.

Sekce : Kovové materiály I.

Vyhodnocení vlivu plastické deformace na strukturu a vlastnosti ocelového plechu

Autor: Boris Severa
Ročník: B3
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Alena Michalcová, Ph.D.

Během autohavárií dochází k intenzivní plastické deformaci ocelových plechů, které jsou následně přetvářeny za studena do původního tvaru. Otázkou je, zda takto provedenou opravou nedojde ke snížení mechanických vlastností materiálu a tím i ke snížení celkové bezpečnosti automobilu. Tato práce je zaměřena na popis rozdílu struktury a mechanických vlastností nedeformovaných a opětovně vyrovnaných plechů. V práci byla popsána mikrostruktura pomocí mikroskopie a testovány mechanické vlastnosti v tahu.

Sekce : Kovové materiály I.

Struktura a vlastnosti biodegradovatelných slitin železa

Autor: Květa Stehlíková
Ročník: B3
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Alena Michalcová, Ph.D.

Železo a jeho slitiny jsou slibnými materiály pro výrobu biodegradovatelných implantátů. Vzhledem k nízké korozní rychlosti železa je nutné testovat jeho slitiny s příměsemi, které by mohly korozní rychlost zvýšit.

Práškovou metalurgií byly připraveny vzorky Fe, Fe-Ag, Fe-Pd, Fe-C (2 hm.%) a Fe-Mn (v tomto případě 30 hm.%). Slitina Fe-Mn byla podrobena tepelnému zpracování s cílem získat jednofázovou strukturu. U vzorků byly měřeny mechanické vlastnosti zkouškou tlakem. Dále byly vzorky podrobeny dlouhodobé expoziční zkoušce ve fyziologickém roztoku. Korozní rychlost byla vyhodnocena z hmotnostních úbytků a z obsahu iontů ve výluhu. Byla pozorována struktura vzorku po expozici. Z mikrostruktury příčného řezu byla vyhodnocena rovnoměrnost koroze vzorků slitin.

Sekce : Kovové materiály I.

Příprava intermetalických fází Fe-Al mechanickým legováním

Autor: Milan Valalik
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Ing. Pavel Novák, Ph.D.

Intermetalické fáze Fe-Al se jeví jako vhodný materiál pro průmyslové využití za vysokých teplot. Vzhledem ke svým specifickým vlastnostem, jako jsou relativně vysoké teploty tání, nízká houževnatost za pokojových teplot a špatné slévárenské vlastnosti, je vyžadováno zkoumání různých možností jejich výroby. Vyhovující alternativou řešení problémů při výrobě takových fází je prášková metalurgie. V poslední době byla usilovně zkoumána možnost přípravy těchto materiálů z prášků železa a hliníku technologií reaktivní sintrace. Další možností se jeví metoda mechanického legování a následná kompaktizace metodou SPS (Spark Plasma Sintering).

Cílem této práce byl popis mechanismu vzniku intermetalických fází Fe-Al v průběhu mechanického legování a optimalizace parametrů tohoto procesu. Byly také porovnány výsledky tohoto výzkumu s výsledky předchozího popisu průběhu reaktivní sintrace v tomto systému.

Sekce : Kovové materiály I.

Struktura a vlastnosti niklu připraveného metodou práškové metalurgie a kompaktizovaného plazmovým slinováním

Autor: Tomáš Vanka
Ročník: B3
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Alena Michalcová, Ph.D.

Prášková metalurgie ve spojení s plazmovým sintrováním je slibnou technologií pro výrobu kompaktních nanokrystalických materiálů. V této práci byl zkoumán vliv metody přípravy práškového prekursoru na vlastnosti kompaktních materiálů. Jako modelový systém byl použit komerční niklový prášek, který byl kompaktizován v komerční čistotě a se stopovým množstvím NaOH a KOH. Tyto nečistoty byly zvoleny tak, aby simulovali znečištění nanokrystalického niklu vyrobeného metodou selektivního loužení.

Plazmovým sintrováním byly též kompaktizované vzorky nanokrystalického niklu připravených metodou selektivního loužení, které spočívá v přípravě binární slitiny AlNi a následném rozpuštění Al matrice v NaOH či KOH.

U všech připravených vzorků byla zkoumána mikrostruktura a měřeny mechanické vlastnosti.

Sekce : Kovové materiály II.

Vliv postupu přípravy na vlastnosti kompozitních materiálů Mg-HA

Autor: Drahomír Dvorský
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jiří Kubásek

Hořčíkové materiály mohou nalézt uplatnění v oblasti biodegradovatelných implantátů, které jsou v organismu postupně odbourávány, aniž by došlo ke vzniku pro organismus toxických produktů. Za vhodné kandidáty lze v tomto ohledu považovat i kompozitní materiály s hořčíkovou maticí. Volbou výztuže a jejích parametrů lze ovlivňovat výsledné mechanické i korozní vlastnosti kompozitu. Jednou z běžně uvažovaných výztuží je hydroxyapatit (HA), který je rovněž součástí kostí a jeho přítomnost v kompozitu urychluje proces osteointegrace. Výsledné vlastnosti Mg-HA kompozitů se významně odvíjí od množství a velikosti částic HA i samotného postupu přípravy kompozitu. Tato práce se zabývá optimalizací přípravy kompozitních materiálů Mg-HA s rozdílnými obsahy částic výztuže vhodnou kombinací metod práškové metalurgie (mletí, lisování, extruze a spékání v plazmatu). Připravené kompozitní materiály se vyznačovaly rovnoměrnou distribucí částic ve struktuře a zlepšenými mechanickými vlastnostmi.

Sekce : Kovové materiály II.

Možnosti odstranění Cr z odpadů po výrobě Ni oxidačním spékáním s NaOH nebo Na₂CO₃

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

Odpady produkované při zpracování niklových lateritických rud obsahují hlavně železo ale jejich využití jako vsázka do vysokých pecí ve větším měřítku je znemožněno relativně vysokým obsahem Cr. Cílem práce je zjistit možnost snížení obsahu chromu v těchto materiálech oxidačním pražením s NaOH nebo Na₂CO₃ a následně vyluhováním získaných spečenců ve vodě.

Sekce : Kovové materiály II.

Hydrometalurgické zpracování vypotřebovaných Li-iontových baterií

Autor: Tomáš Havlík
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Ng. Hong Vu, Ph.D.

Rostoucí poptávka po Li-iontových bateriích používaných v přenosné elektronice, elektrických nebo hybridních automobilech vede ke vzniku velkého množství vypotřebovaných baterií. Recyklaci těchto baterií se přispěje nejen ke zlepšení životního prostředí, ale získávají se i cenné kovy jako Li, Co, Ni a Cu. Cílem práce je navržení a ověření hydrometalurgického postupu zpětného získávání těchto kovů.

Sekce : Kovové materiály II.

Příprava a korozní chování slitinových fází Zn-Fe tvořících povlak žárového zinku na oceli

Autor: Daniela Hotmarová
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Milan Kouřil Ph.D.

Fáze Fe₃Zn₁₀, tvořící zinkový povlak, je vzhledem k nejvyššímu obsahu Fe ze všech intermetalických fází systému Fe-Zn považována za korozně nejodolnější v alkalickém prostředí betonu. Práce se zabývá problematikou samotného vytvoření dostatečně reprezentativních vzorků intermetalické fáze tvořící zinkovaný povrch a následným měřením jejich korozních vlastností.

Vzorky intermetalických fází byly vytvořeny práškovou metalurgií s následným slinováním v křemenné evakuované ampuli a následně technikou "Spark Plasma Sintering". Korozní vlastnosti intermetalické fáze Fe₃Zn₁₀ byly měřeny v prostředí modelového pórového roztoku o třech rozdílných hodnotách pH a to 12,6; 13 a 13,5.

Bylo zjištěno, že vznikající vodík negativně ovlivňuje pórovitost přiléhajícího cementového tmelu, což může snížit soudržnost výztuže s vrchní fází tohoto složení s betonem. Přítomnost vápenatých iontů v roztoku má negativní vliv na přechod fáze Fe₃Zn₁₀ do pasivního stavu.

Sekce : Kovové materiály II.

Vývoj porézního kovového biomateriálu na bázi titanu

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

Porézní kovové materiály jsou velmi perspektivní biomateriály pro implantáty z důvodu nižší hustoty, snazšího zakotvení kostní tkáně a rovněž možnosti úpravy mechanických vlastností implantátu podílem pórů na hodnoty blízké lidské kosti. V této práci je prezentován komplexní přístup k vývoji porézního biomateriálu, zahrnující návrh materiálu, technologie výroby a zpracování i následných povrchových úprav, pro zajištění požadovaných mechanických vlastností, osseointegrace i bioaktivity povrchu. Příspěvek se zaměřuje především na fázi optimalizace technologie výroby a zpracování s ohledem na průmyslovou realizovatelnost.

Sekce : Kovové materiály II.

Kompozitní materiály NiTi-Ti₂Ni

Autor: Eva Kristianová
Ročník: B3
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Ing. Pavel Novák, Ph.D.

Slitina NiTi řadící se mezi slitiny s tvarovou pamětí je perspektivním materiálem pro rozmanité medicínské i technické aplikace. Při přípravě materiálu pomocí práškové metalurgie s využitím reaktivní sintrace bylo zjištěno, že tento způsob výroby je vždy doprovázen vznikem fáze Ti₂Ni, která je vnímána jako nežádoucí. Přítomnost této tvrdé fáze má však vliv na tvrdost a další mechanické vlastnosti slitiny a může tak rozšířit použití těchto materiálů i do jiných průmyslových odvětví.

Cílem práce je testování možnosti přípravy kompozitních materiálů NiTi-Ti₂Ni reaktivní sintrací slisované směsi prášků niklu a titanu. Byla studována závislost struktury a mechanických vlastností těchto nově vyvinutých materiálů na složení směsi prášků a podmínkách reaktivní sintrace.

Sekce : Kovové materiály II.

Struktura a vlastnosti Fe-Mn slitin pro biodegradovatelné implantáty

Autor: Kateřina Nová
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jaroslav Čapek

Tato práce je zaměřena na studium mikrostruktury a vlastností slitin Fe-Mn, které jsou zvažovány jako vhodní kandidáti pro výrobu biodegradovatelných implantátů, zejména pak kardiovaskulárních stentů a ortopedických implantátů. Materiály na bázi železa mají oproti již používaným materiálům na bázi hořčíku několik výhod, především lepší mechanické vlastnosti, nižší korozní rychlost a to, že jejich koroze není doprovázena uvolňováním vodíku. U biodegradovatelných implantátů je důležité, aby kromě netoxicity samotných implantátů nebyly toxické ani produkty jejich degradace. Je tedy nutné zajistit takovou korozní rychlost, aby implantát nebránil v růstu nově vznikající tkáni, ale zároveň nebyla překročena maximální koncentrace látek, jež je tělem tolerována.

Indukčním tavením v ochranné argonové atmosféře byly připraveny slitiny Fe-Mn s různým obsahem manganu (0, 15, 30 hm %). U takto připravených slitin byla pozorována mikrostruktura a vliv následného tepelného zpracování na ní. Dále byly u vybraných materiálů studovány mechanické a korozní vlastnosti.

Sekce : Kovové materiály II.

Koroze uhlíkové oceli v okludovaném roztoku bentonitové vody za podmínek úložiště jaderného odpadu

Autor: Darya Novikova
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Milan Kouřil, Ph.D.

Do roku 2050 na území ČR by mělo být vybudováno hlubinné úložiště pro vyhořelé jaderné palivo a radioaktivní odpad. Palivové články budou umístěny do kovových kontejnerů, které budou v kontaktu s bentonitovým obalem. Jedním z kandidátních materiálů, ze kterého se budou skládat kovové kontejnery, je uhlíková ocel. Předpokládá se, že po cca 100 letech se prostředí v úložišti stane anoxickým a dojde k ustálení korozní rychlosti oceli. Je třeba předpovědět korozní chování uhlíkové oceli za těchto podmínek.

Korozní rychlost oceli v anoxickém prostředí při laboratorní teplotě a při 40 °C byla stanovena pomocí rezistometrické metody v uspořádání s korozní celou a vestavbou. Díky velkému poměru exponované plochy oceli k objemu roztoku elektrolytu rychle vzniká okludovaný roztok a dochází k ustálení korozní rychlosti. V roztocích bentonitové vody stanovené hodnoty korozní rychlosti byly v řádu desetin mikrometrů za rok, v suspenzi pevného bentonitu v řádu jednotek mikrometrů za rok. Porovnáním naměřených hodnot s hodnotami zjištěnými svítkovým testem bylo prokázáno, že svítkový test je vhodnější použít v případě suspenze pevného bentonitu. Rezistometrická metoda v uspořádání s korozní celou a vestavbou je dobrá ke stanovení ustálené dlouhodobé korozní rychlosti v modelovém prostředí bentonitové vody.

Sekce : Kovové materiály II.

Vliv střídavého napětí na korozi katodicky chráněných úložných zařízení

Autor: Matyáš Peterka
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Milan Kouřil, Ph.D.

Nedílnou součástí dnešní moderní civilizace je dodávka elektrické energie. Ta je distribuována pomocí vysokonapěťového vedení. Během rozvodu dochází ke vzniku mnoha nežádoucích jevů, které mohou ovlivnit jiné konstrukce a musí být určitým způsobem řešeny.

Různá úložná zařízení, jako jsou například vodovodní, ropovodní a plynovodní potrubí, se dostávají pod negativní vliv těchto elektrických rozvodů z důvodu indukce elektrického proudu. Často je elektrické vedení, z ekonomických důvodů, vedeno ve stejných koridorech jako rozvodné potrubí. V případě výskytu vady v izolaci bude docházet ke stimulaci koroze kovových částí bludnými proudy.

Cílem této práce bylo zjistit míru vlivu střídavých napětí na korozi katodicky chráněných úložných zařízení.

Sekce : Kovové materiály II.

Vliv legujících prvků na vlastnosti slitiny NiTi

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

Slitiny NiTi se vyznačují zajímavými vlastnostmi, jako jsou tvarová paměť a superelastická. Současně si zachovávají i dobré mechanické vlastnosti a korozní odolnost, která je případě slitiny obsahující nikl nutností pro biokompatibilitu. Jev tvarové paměti zajišťuje intermetalická fáze NiTi, zvaná nitinol, přechodem mezi nízkoteplotní martenzitickou a vysokoteplotní austenitickou fází. V současné době patří mezi nejvýznamnější materiály s tvarovou pamětí. Využití nacházejí v mnoha technických aplikacích, významně se také uplatňují v lékařství v podobě stentů, rovnátek nebo při fixaci zlomenin kostí. Tato práce je zaměřena na přípravu legovaných slitin NiTi metodou práškové metalurgie. Cílem je popsat vliv jednotlivých legujících prvků na mikrostrukturu, mechanické vlastnosti, fázové složení a posuny teplot fázových přeměn.

Sekce : Kovové materiály II.

Vliv podmínek ohřevu při reaktivní sintraci na strukturu a fázové složení slitiny Ni-Ti

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

Intermetalická fáze NiTi se vyznačuje unikátními vlastnostmi, mezi které patří superelastická a tvarová paměť. Tato slitina je dnes využívána v medicíně (jícnové stenty, rovnátka) i v technických aplikacích (např. tepelné spínače). Její výroba je obtížná z důvodu vysoké reaktivity titanu. Při výrobě postupy tavné metalurgie tak dochází ke kontaminaci, resp. k nehomogenitě vyrobených slitin.

V této práci byl testován alternativní postup výroby tohoto materiálu. Jedná se o reaktivní sintraci, při níž dochází k reakci práškového niklu a titanu za vysokých teplot. Předchozí práce ukázaly, že je pro syntézu intermetalik reaktivní sintraci nezbytná velmi vysoká rychlost ohřevu. To je však v provozních podmínkách velmi problematické. Cílem této práce bylo popsat, jak podmínky ohřevu při reaktivní sintraci ovlivňují mikrostrukturu a fázové složení slitiny NiTi. Byl testován ohřev v elektrické odporové peci (cca 20 K/min), v indukční peci (cca 100 K/min) a vložením do vyhřáté pece (cca 300 K/min). Rovněž bylo testováno využití metody Spark Plasma Sintering pro dosažení vysoké rychlosti ohřevu při reaktivní sintraci. Byla porovnána mikrostruktura a fázové složení vzorků připravených za různých podmínek ohřevu.

Sekce : Kovové materiály II.

Mechanismus a kinetika vzniku fází Ni-Ti při reaktivní sintraci

Autor: Vladimír Vojtěch
Ročník: B3
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Ing. Pavel Novák, Ph.D.

Předmětem práce byl popis mechanismu a kinetiky vzniku intermetalických fází v systému Ni-Ti. Vzhledem k tomu, že bylo termickou analýzou zjištěno, že intermetalické fáze v tomto systému vznikají již při teplotách výrazně pod fázovou přeměnou titanu, zaměřila se tato práce na teplotní interval 500 - 650 °C. Experimentální práce byly prováděny jak na reálných směsích prášků niklu a titanu, tak i na modelových vzorcích tvořených kompaktním titanem, povlakovaným niklem. Modelové vzorky byly použity především z důvodu snazšího experimentálního popisu kinetiky procesu. Bylo zjištěno, že již při 500 °C vzniká fáze Ti₂Ni, následovaná při zvýšení teploty fázemi NiTi a Ni₃Ti. Ve studovaném teplotním intervalu není možné připravit materiál, tvořený pouze intermetalickými fázemi. Intermetalické fáze vznikají difúzním mechanismem a následně působí jako difúzní bariéra, takže v materiálu zůstávají nezreagované výchozí kovy.

Příprava porézní spinelové keramiky a měření její vysokoteplotní tepelné vodivosti metodou laser flash

Autor: Bc. Jakub Černý
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: doc. Dr. Dipl.-Min. Willi Pabst, konzultant: Ing. Tereza Uhlířová

Spinel (MgAl_2O_4) se vyskytuje v přírodě jako minerální fáze metamorfních hornin a je součástí některých žárovzdorných materiálů, může ale tvořit i jednofázovou keramiku, např. pro optické aplikace. Znalost jeho termofyzikálních vlastností je proto důležitá jak pro geofyziku, tak pro keramiku. Tato práce se zabývá přípravou spinelové keramiky s různou pórovitostí a měřením její tepelné vodivosti. Spinelová keramika byla připravena z komerčního prášku (MG-202, AEE, hustota $3,58 \text{ g/cm}^3$, velikost částic $1\text{--}5 \text{ }\mu\text{m}$) uniaxiálním lisováním při tlaku 70 MPa. Pórovitost byla zavedena jednak částečným slinováním (na teploty $1400\text{--}1600 \text{ }^\circ\text{C}$; vyzkoušeny byly i nižší teploty), jednak použitím rýžového škrobu (velikost granulí cca. $5,0 \text{ }\mu\text{m}$) a následným výpalem na $1600 \text{ }^\circ\text{C}$ (rychlost ohřevu $2 \text{ }^\circ\text{C/min}$, výdrž 2 hodiny). Teplotní vodivost takto připravených a grafitem pokrytých vzorků (pórovitost v rozsahu $27\text{--}57 \text{ }\%$) byla naměřena metodou laser flash na přístroji LFA 1000 (Linseis) od pokojové teploty až do teploty $900 \text{ }^\circ\text{C}$, a na základě znalosti objemové hmotnosti a specifické tepelné kapacity přepočtena na tepelnou vodivost. Výsledné tepelné vodivosti jsou v rozmezí $0,5\text{--}8,3 \text{ W/mK}$ a vykazují nelineární pokles s rostoucí teplotou, který je typický pro krystalické látky při dostatečně vysokých teplotách. Efektivní tepelné vodivosti v závislosti na pórovitosti jsou o něco nižší než exponenciální předpověď.

Vliv tloušťky křemičitých sol-gel vrstev na chemickou odolnost skla

Autor: Bc. Miroslava Hujová
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: ing. Helena Hradecká, prof. Aleš Helebrant, CSc.

Sol-gel metody jsou hojně využívány pro jejich schopnost tvořit materiály, které jsou jinak jen obtížně připravitelné. Předložená práce se proto zabývá přípravou křemičitých sol-gel vrstev o různé tloušťce na skleněném substrátu a testováním jejich chemické odolnosti. Základní sol byl připraven z TEOSu a organických rozpouštědel za kyselé katalýzy (HCl) a po odležení byl nanášen na podložní substrát v 1 až 3 vrstvách technikou dip-coating. Různá tloušťka vrstev byla zajištěna změnou rychlosti vytahování vzorku ze solu. Vrstvy byly po nanesení vždy vysušeny a následně vypáleny v peci 1h při $t=550^\circ\text{C}$. Potažená i nepotažená skla byla loužena pomocí modelových testů do destilované vody (1-24h) při teplotě 80°C . Sledováno bylo množství Na^+ a SiO_2 přešlých do výluhu (Na^+ - AAS, SiO_2 - spektrofotometricky). Vzhledem k tomu, že samotný výpal v peci při teplotě blízké T_g může mít vliv na migraci iontů ve skle, a tím i na jejich případný prostup nanesenými vrstvami, byly měřeny koncentrační profily povrchu skla před a po výpalu v peci metodou ESCA. Výsledky ukázaly, že všechny typy vrstev výrazně zvyšují chemickou odolnost podložního substrátu. Nanesení více vrstev či větší tloušťka vrstev neměly významný vliv na další zvýšení chemické odolnosti. Loužicími testy i měřením koncentračních profilů byla potvrzena migrace Na^+ iontů směrem k povrchu skla vlivem výpalu.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Vliv typu nanoprášku na mikrotvrdost skla Float

Autor: Tereza Chomyšínová
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Miroslav Rada, CSc.

Cílem této práce bylo upravit povrch vzorků skla Float tlakovým vstřikováním suspenze nanoprášků TiO_2 , Al_2O_3 , ZrO_2 , ZnO , MgO a $\text{Mg}(\text{OH})_2$ a následně vyšetřit vliv takto připravených vrstev na mikrotvrdost skla. Dále byly zkoumány antibakteriální účinky vrstev TiO_2 .

Bylo zjištěno, že se snižující se zrnitostí použitých nanoprášků se zlepšují hodnoty mikrotvrdosti. Nejlepších výsledků bylo dosaženo při použití ZrO_2 , zatímco ostatní nanoprášky zlepšily mikrotvrdost vzorků méně. Pro necínovou stranu vzorků byly při všech experimentech získány vyšší hodnoty zlepšení mikrotvrdosti než pro stranu cínovou. Dále byl stanoven vliv zatížení indentoru v rozmezí 10 g – 100 g na výsledné zlepšení mikrotvrdosti. Na základě těchto měření bylo možné zjistit, do jaké hloubky daný typ nanoprášku pronikl.

Antibakteriální testy prokázaly, že titaničité vrstvy připravené tlakovým vstřikováním, stejně jako titaničité vrstvy připravené metodou sol-gel, vykazují antibakteriální účinky. Vrstvy připravené oběma metodami vykazují podobný trend snížení počtu přeživších bakterií, který je přímo úměrně závislý na koncentraci bakterií v roztoku.

Uvedené výsledky jsou nadějným předpokladem i pro zlepšení ostatních důležitých parametrů skla, a to např. pevnosti či chemické odolnosti.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Elastické vlastnosti vysoce porézní korundové keramiky naměřené impulzní excitací

Autor: Vojtěch Nečina
Ročník: B2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: doc. Dr. Dipl.-Min. Willi Pabst, konzultant: Ing. Tereza Uhlířová

Porézní keramika nachází široké uplatnění, od filtrů a nosičů katalyzátorů až k lehčným žárovzdorným materiálům pro vypalovací pomůcky, vyzdívky pecí a vysokoteplotní tepelné izolace. Znalost mechanických vlastností těchto materiálů je nezbytná pro posuzování jejich použitelnosti pro tyto účely. Proto je jedním z důležitých úkolů určení elastických vlastností, které jsou obvykle silně závislé na pórovitosti. Zvláště u vysoce porézní, celulární keramiky je však měření elastických konstant často netriviálním úkolem. Tato práce se zabývá měřením elastických konstant u vysoce porézní korundové keramiky připravené metodou biologického napěňování pomocí kvasnic. Po přípravě a mikrostrukturní charakterizaci této keramiky byly určeny metodou impulzní excitace nejen Youngův modul pružnosti (E), ale i smykový modul (G), modul stlačitelnosti (K) a Poissonův poměr (ν). Naměřené hodnoty byly následně srovnány s teoretickými předpověďmi (meze a modely). Pro vysoce porézní korundovou keramiku s pórovitostí v rozsahu 66,5–87,1 % byly naměřeny hodnoty v rozsahu 2–21 GPa pro E, 1–9 GPa pro G, 1–11 GPa pro K a 0,045–0,324 pro ν (s průměrem $0,199 \pm 0,070$). Relativní chyby jsou < 13 % (E), 19 % (G), 22 % (K) a 36 % (ν). Srovnání s teoretickými předpověďmi ukázalo, že naměřené elastické moduly se nachází mezi exponenciální a mocninovou předpovědí.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Príprava titaničitých sol-gel vrstiev s obsahom striebra a fosforečnanov vápenatých

Autor: Anna Oberleová
Ročník: B3
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Diana Horkavcová, Ph.D.

Metoda sol-gel môže byť využívaná na nanášanie tenkých vrstiev na substrát. Výhodou je jednoduchosť postupu a vysoká čistota dosiahnutých produktov. Vrstva môže byť nanášaná na kovový substrát rôznymi technikami: *dip-coating*, *spray-coating* a *spin-coating*.

Pre tento experiment bolo pripravených šesť druhov multifunkčných solov: titaničitý, titaničitý s obsahom striebra (ako nositeľa antibakteriálnych vlastností) a štyri titaničité soly obsahujúce striebro a práškové fosforečnany vápenaté: hydroxyapatit, trikalciumfosfát, brushit, monetit (ako nositele bioaktívnych vlastností). Jednotlivé typy solov boli nanášané na mechanicky upravené neporézne titanové substráty technikou *dip-coating* za stáleho miešania, pri laboratórnej teplote. Vrstvy boli sušené a vypálené pri teplote 400°C po dobu 2 hodín. Po výpale boli vrstvy vizuálne charakterizované.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Testování sklokeramického materiálu s modifikovaným SBF

Autor: Adam Stříbný
Ročník: M1
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Diana Horkavcová Ph.D.

Jednou ze sledovaných vlastností biomateriálu je jeho bioaktivita, neboli míra tvorby pevné vazby mezi materiálem a okolní tkání, například kostí. Daný jev lze testovat jak in vivo, tak in vitro. Pro in vitro testování bioaktivity byl navržen speciální roztok SBF (Simulated body fluid – Simulovaná tělní tekutina), který se svými iontovými koncentracemi blíží hodnotám, kterých dosahuje anorganická část krevní plazmy. Při interakci materiálu a SBF dochází na povrchu materiálu k precipitaci nových fází, bohatých na vápník a fosfor. To je zajímavé, neboť hlavní složkou kostní tkáně je hydroxyapatit $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ a právě ten byl detekován jako jedna z nově tvořených fází při in vitro testování.

V předchozích letech byly provedeny studie odhalující určité komplikace při používání SBF jako testovacího roztoku. Bylo zjištěno, že používané biologické pufovací činidlo (TRIS) může do určité míry zkreslovat výsledky. V našem experimentu proto byl testován jiný pufr – BES – a sledován jeho vliv na chování materiálu. Jako materiál byl zvolen sklokeramický scaffold. Experiment probíhal za staticko-dynamických podmínek. Na konci experimentu bylo pozorováno, k jakým změnám došlo na povrchu scaffoldu, a jak se změnila hodnota iontových koncentrací v SBF po interakci s materiálem.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Příprava barevných glazur

Autor: Bc. Iva Štampochová
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Alexandra Kloužková, CSc.

Cílem práce, která vznikla v průběhu studentské praxe ve firmě Lasselsberger s. r. o., byla příprava vzorníku barevných glazur a jejich charakterizace pomocí systému IRIDE.

Ze sedmnácti pigmentů od různých dodavatelů (Colorobbia, Torrecid) a dvou druhů základů pro glazury byly připraveny pomocí ztekucovačel glazurní suspenze. Ty byly následně nanášeny na nepálený střepek (hmota obkládaček) a vypáleny na konečnou teplotu v kontinuální, rolnové, plynové peci při teplotě 1150°C po dobu 42 až 47 min.

Jednotlivé pigmenty byly k základu přidávány v přesně definovaném množství (od 0,5 po 7,5 g), tak aby byla připravena kalibrační křivka pro následné měření barevnosti systémem IRIDE. Celkem bylo připraveno 238 vzorků glazovaných obkládaček a vytvořen kompletní vzorník barev a jejich odstínů, které se v současné době v závodu RAKO III používají.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Vliv vybraných technologických parametrů na chování sklářské tavicí pece

Autor: Bc. Jan Viduna
Ročník: M1
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Doc. Ing. Stanislav Kasa, CSc.

Cílem této práce bylo studovat chování sklářské tavicí pece při změnách předem zvolených technologických parametrů pomocí matematického modelování s využitím softwaru ANSYS Fluent. Zkoumanými technologickými parametry byly tavicí výkon, plocha pokrytá sklářským kmenem, hloubka tavicího bazénu a tepelné ztráty stěnami a dnem pece. Vyhodnocení vypočtených variant bylo provedeno pomocí vizuálních projekcí proudění a rozložení teplot v peci, energetické bilance a tavicí výkonnosti (MI - melting indexu). Vyhodnocené výsledky ukázaly, že účinnost modelové pece byla 29,6 %, která je blízká reálné provozní hodnotě. Byl také proveden výpočet nákladů na otop pece za 24 hodin na základě vstupních energií, účinnosti pece, výhřevnosti a ceny zemního plynu. Také tento výsledek byl ve velmi dobré shodě s provozními údaji. Při zkoumání vhodné hloubky tavicího bazénu, bylo zjištěno, že při snížení hloubky tavicího bazénu na hodnotu 0,5 m se v něm začínají tvořit tzv. mrtvé prostory. Také se ukázala nežádoucí změna proudění při stejné (0,5 m) hloubce bazénu. Z výsledků modelování vyplynula vhodná hloubka bazénu 0,75 m. Při studiu tloušťky žáromateriálu vyzdívkou pece byla zjištěna jako nejvhodnější varianta kombinace 0,2 m AZS (ER 1711) a 0,3 m JM 30 (porézní šamotové cihly), která se projevila především u dna tavicího bazénu.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Minimum residence time a jeho využití k posouzení chování sklářské pece

Autor: Bc. Lucie Čermáková
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: doc. Ing. Stanislav Kasa, CSc.

Sklářské tavicí pece si lze představit jako chemické reaktory s komplexním systémem chemických a fyzikálních procesů. Důležitými technickými aspekty pro design a konstrukci sklářské pece jsou konečná kvalita skloviny, životnost sklářské pece a energetická náročnost. Rozdělení teplotního pole ve sklářské peci a z něho vyplývající konvekce v tavicí části je jedním z parametrů, který umožňuje sledovat kvalitu tavené skloviny. Matematické modelování s využitím programu CFD kód Fluent 6 tyto kvalitativní prvky predikuje. Tato práce byla zaměřena na výpočet hodnot střední a minimální doby zdržení skloviny v peci (RTD - residence time distribution a MRT - minimum residence time) a indexu tavení (MI - melting index) v závislosti na výšce vložené mechanické bariéry (0; 0,2; 0,4; 0,6 m). Výsledky z matematické simulace ukázaly, že rostoucí výška mechanické bariéry prodlužuje hodnotu MRT a ovlivňuje velikost mrtvých prostorů v peci, které byly vypočteny z hodnot RTD. Rovněž hodnota MI je ovlivňována výškou mechanické bariéry.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Úprava povrchu Ti implantátu za účelom jeho rýchleho vhojenia

Autor: Barbara Černická
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Dr. Ing. Dana Rohanová

Nanášanie bioaktívnych vrstiev na inertný kovový substrát (Ti) s využitím bioaktívneho skla či sklokeramiky sa javí ako vhodné riešenie na urýchlenie vhojovania implantátov. Takýto spôsob úpravy kovových implantátov v sebe spája výhody oboch použitých materiálov. Cieľom práce bolo sledovať schopnosť testovaných materiálov indukovať tvorbu hydroxyapatitu (HAp) na povrchu Ti podložky (Ti BIO, výrobca LASAK, s.r.o.) po exponovaní v roztoku SBF (Simulated Body Fluid). Povrch titánovej podložky bol pokrytý vrstvičkami bioaktívneho skla Bioglass®, sklokeramickým *scaffoldem* a vrstvičkami fosforečného invertného skla PIG10 a PIG3 vo forme práškov. Experiment prebiehal formou *in vitro* testu za statických podmienok. Pripravené vzorky boli exponované po dobu 9 dní v roztoku simulovanej telovej tekutiny. Vlastnosti vzniknutých vrstiev boli hodnotené nielen pomocou optickej mikroskopie, RTG práškovej difraktometrie a GDS analýzy, ale i sledovaním koncentrácie Ca^{2+} a $(\text{PO}_4)^{3-}$ iónov vo výluhoch. Na základe získaných dát bolo potvrdená bioaktívne chovanie Bioglass® a sklokeramického *scaffoldu*. Použité metódy u týchto materiálov detekovali prítomnosť HAp na povrchu Ti podložky po expozícii v SBF. V prípade materiálov PIG 3 a PIG 10 sa ich bioaktívne chovanie nepotvrdilo.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Charakterizace mikrostruktury dinasu analýzou obrazu pomocí stereologických vztahů

Autor: Petra Karlová
Ročník: M1
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Gregorová Eva, CSc., konzultant: Ing. Tereza Uhlířová

Práce se zabývá charakterizací mikrostruktury čtyř nezávislých vzorků dinasu pomocí obrazové analýzy s využitím stereologických vztahů. Z každého vzorku bylo zhotoveno 9 mikroskopických snímků, které byly podrobeny obrazové analýze. Každý snímek byl proložen mřížkou s konstantním počtem uzlových bodů a pomocí stereologických vztahů byl stanoven obsah (tj. objemová frakce) cristobalitu a tridymitu, hustota rozhraní, střední vzdálenost a střední velikost (tj. délka úseků) částic cristobalitu, hodnota hustoty středního integrálního zakřivení a velikost podle Jeffriesa. Statistické vyhodnocování bylo provedeno za využití koncepce standardní chyby, takže absolutní chyby byly vypočteny jako součiny standardních chyb a normovaných odchylek podle Studentovo t-rozdělení, které udává spolehlivost naměřených hodnot s 95% pravděpodobností. V závěru práce bylo provedeno porovnání získaných výsledků (obsah cristobalitu a tridymitu) s hodnotami stanovenými pro sledované vzorky pomocí rentgenové difrakce.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Porézní nosiče pro sorpci ^{137}Cs

Autor: Kristýna Linhartová
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Jan Macháček, Ph.D.

Radionuklidové zářiče se využívají v průmyslové výrobě např. pro stanovení výšky hladiny, při měření obsahu popela v uhlí, v CT-skenerech a při měření tloušťky nebo hustoty materiálu. V medicíně se zářiče využívají při brachyterapii.

Porézní nosiče jsou připravovány smísením keramické hmoty s pórtvorným činidlem a jejich následným vypálením. Cílem práce je zvýšení sorpční kapacity nosiče, čehož je možné dosáhnout několika způsoby. Jednou z možností je změna stávajícího materiálu za jiný, který se vyznačuje vyšší nasákavostí po výpalu. Materiál musí splňovat i další parametry – pevnost v tlaku musí být dostatečná kvůli možnosti manipulace s polotovarem při výrobě a musí mít též vhodné vysokoteplotní chování po sorpci ^{137}Cs .

Práce se zabývá analýzou vysokoteplotního chování původních nosičů po sorpci radionuklidu. Dále úpravou složení stávajícího materiálu a postupu přípravy nosičů.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Studium systému keramický střep-glazura

Autor: Tomáš Nedvěd
Ročník: B3
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Alexandra Kloužková, CSc.,

Užití vrstvy glazury na keramický střep má zlepšit vlastnosti keramického výrobku zejména nepropustnost, odolnost proti povětrnostním vlivům, chemickou odolnost, případně mechanické vlastnosti výrobku a jeho povrchu. Pro správnou funkci nanesené glazury je třeba zajistit dobrou shodu teplotní roztažnosti glazury a střepové hmoty, aby nedocházelo ke vzniku defektů a porušení vrstvy. Práce je zaměřena na systém keramický střep – glazura u pálené střešní krytiny, a to pro dvě střepové hmoty (dvě ložiska, dvě výrobní linky) a tři glazury (jedna určená na první a dvě na druhou střepovou hmotu). Byl hodnocen soulad koeficientů teplotní roztažnosti, v prvním případě v souvislosti s novým složením střepové hmoty, ve druhém s novým složením dvou glazur. Zároveň byla prověřována shoda koeficientů teplotní roztažnosti pro všechny ostatní kombinace uvažovaných střepových hmot a glazur. Koeficienty teplotní roztažnosti střepových hmot i glazur byly změřeny dilatometricky. Dále byla provedena zkouška pevnosti v ohybu na vzorcích před výpalem, po výpalu bez glazury a po výpalu s glazurou. Výsledky byly vyhodnoceny dle ČSN EN 843-5.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Příprava a charakterizace suspenze BaTiO pro MRI

Autor: Martina Řehořová
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Jan Macháček, Ph.D.

Práce je zaměřena na přípravu suspenze titaničitanu barnatého, který se pro své příhodné dielektrické vlastnosti používá ke zvýšení rozlišení a kvality zobrazení medicínské magnetické rezonance (MRI). Součástí práce je kromě měření dielektrických a reologických vlastností připravené suspenze také simulace chování dielektrika v elektromagnetickém poli. Díky tomu lze upravovat složení suspenze tak, aby byl výsledný obraz co nejostřejší, s výraznými přechody a jasnými okraji, a umožnil tak vytvořit co nejpřesnější představu o zkoumaném objektu.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Příprava alginátových hydrogelů s obsahem oxidu hlinitého metodou ionotropní gelace

Autor: Tereza Smolíková

Ročník: B2

Ústav: Skla a keramiky

Školitel: Ing. Eva Gregorová, CSc., konzultant: Ing. Tereza Uhlířová

Práce se zabývá přípravou alginátových gelů s obsahem oxidu hlinitého s anizotropní mikrostrukturou ve formě rovnoběžných pórových kanálků. Pro přípravu těchto gelů bylo využito metody ionotropní gelace, která spočívá v přípravě difúzního páru složeného z alginátové soli a elektrolytického roztoku chloridu vápenatého, který se nachází nad alginátovou solí. Rozhraním je tenká vrstva gelové membrány, která se tvoří okamžitě po nanesení malého množství roztoku chloridu vápenatého na roztok alginátové soli. Základní chemická reakce je založena na iontové výměně iontů Na^+ a Ca^{2+} a následné polymerizaci lineárních alginátových řetězců do gelové sítě. V této práci obsahuje alginátová sůl také částice keramického prášku, tzn. že alginátová sůl je zároveň suspenzí oxidu hlinitého. Vzniká pórovitý hydrogel s obsahem korundu. Problematika sušení hydrogelu je řešena pomocí osmozy ve vysoce koncentrovaném roztoku polyetylenglykolu. Vytvořený organicko-anorganický xerogel je možno vypálit, čímž se získá keramický materiál s požadovanou mikrostrukturou.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Modelový popis kinetiky interakce bioaktivních materiálů s tělními tekutinami

Autor: Bc. Zuzana Styková

Ročník: M1

Ústav: Skla a keramiky

Školitel: prof. Ing. Aleš Helebrant, CSc.

Cieľom práce bolo vytvorenie modelov precipitácie fosforečnanov vápenatých na bioaktívnych materiáloch. Na overenie modelov boli použité vybrané experimentálne dáta z literatúry.

Práca predstavuje dva modely interakcie dvoch biomateriálov BAS[®]-HA a BIO-OSS so simulovanou telovou tekutinou SBF. Ako prvý bol stanovený predpoklad konštantného toku SBF pri výpočtoch hmotností teoreticky vyzrážaného hydroxyapatitu (HAp) z koncentrácie vyzrážaných fosforečnanových iónov, ktorý sa potvrdil ako správny. Na tieto vypočítané hmotnosti HAp boli použité modely exponencionálnej a lineárnej závislosti. Model exponencionálnej závislosti bol presnejší. Pri materiáli BIO-OSS sa javí z daných výpočtov modelovania, že sa na ňom naozaj tvorí jediná fáza HAp. Toto tvrdenie je doložené zrovnateľnými rýchlosťami pri tvorbe HAp pri modelovaní z úbytku fosforečnanových a vápenatých iónov. Pri druhom materiáli BAS[®]-HA sa vypočítané dáta hmotností HAp z vápenatých iónov nedajú preložiť ani jedným modelom. Možným vysvetlením by mohlo byť selektívne rozpúšťanie vápnika a tvorba inej fázy.

Absolútne hodnoty rýchlostí precipitácie sú vyššie pre materiál BIO-OSS, po prepočte na jednotku povrchu sa ukazujú naopak ako intenzívnejšie reakcie pre materiál BAS[®]-HA.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Nové kokrystaly trospium chloridu

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

Cílem práce je připravit nové kokrystaly trospium chloridu a vyřešit jejich strukturu. Trospium chlorid je léčivá látka blokující účinky acetylcholinu převážně u receptorů v oblasti hladkého svalstva. Užívá se pro léčbu poruch močového měchýře, jako je urgentní inkontinence a polakisurie. Příprava kokrystalů je moderní metoda pro upravování vlastností pevných látek ve farmaceutickém průmyslu. Vzorky byly připravovány metodou pomalého odpaření ze společného roztoku obou složek potenciálního kokrystalu. Koformery byly vybrány na základě podobnosti polarit a tvarů molekul. Analytickou metodou použitou pro fázovou analýzu byla prášková RTG difrakce, pro popsání struktury byla využívána monokrystalová RTG difrakce. Bylo použito 21 koformerů a u 18 z nich byl z práškové analýzy zaznamenán vznik nové pevné fáze, potenciální kokrystal.

Od některých z těchto pevných fází se již podařilo připravit monokrystaly a vyřešit strukturu. U tří se ukázalo, že se jedná pouze o doposud nepopsané pevné formy koformerů.

Největším úspěchem dosavadní práce bylo připravení nového kokrystalu trospium chloridu s kyselinou benzoovou. Vyřešená struktura byla též srovnána s již známými kokrystaly trospium chloridu.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Kryštalové fáze azulonu

Autor: Dominika Bocková
Ročník: B3
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: Ing. Jan Čejka, Ph.D.

Azulon, alebo tiež guaiazulen, je derivát azulenu. Je to modrá kryštalická látka s farmaceutickým účinkom. Má veľmi nízku teplotu topenia, blízku teploty tela, preto sa používa vo forme masť ako dermatologikum. Jeho nízka teplota topenia značne obmedzuje jeho lekárske využitie, nie je možné z neho vytvoriť tablety. Tento zásadný fyzikálne-chemický problém sa pokúšame vyriešiť prípravou novej pevnej formy, ktorá by mala teplotu topenia vyššiu. Doposiaľ bol prevedený polymorfný screening z 13 rôznych solventov. Žiadne polymorfy ani solváty ale neboli nájdené. Všetky vzorky odpovedali tej samej pevnej forme, od ktorej sa podarilo vyriešiť štruktúru z monokryštalu. Nasledoval kokryštalizačný screening. Společným mletím azulonu postupne s 14 koformermi sme rentgenovou práškovou difrakčnou analýzou identifikovali vznik dvoch kokryštálov. Jednalo sa o kokryštaly s tetrakynoethylenom a tetrakynochinodimethanom. V ďalšej práci sa plánujem venovať hľadaniu nových kokryštálov a príprave monokryštálov od kokryštálov už objavených.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Příprava fotoaktivních vrstev metodou sol-gel

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

Práce se zabývá přípravou tenkých vrstev oxidu křemičitého se zabudovanými fotosenzitizátory na bázi hexanukleárních molybdenových klastrů s organickými apikálními ligandy, konkrétně $\text{Na}_2[\text{Mo}_6\text{I}_8(\text{SCN})_6]$ a $\text{Na}_2[\text{Mo}_6\text{I}_8(\text{CF}_3\text{COO})_6]$. Tyto sloučeniny jsou schopné po ozáření světlem excitovat molekulární kyslík za vzniku vysoce reaktivního singletového kyslíku ($^1\text{O}_2$), který má antimikrobiální účinky. Fotosenzitizátory byly přidány do roztoku prekursoru (tetraethoxysilanu nebo triethoxyfenylsilanu). Reakce sol-gel probíhala v prostředí ethanolu nebo tetrahydrofuranu a vzniklý sol byl metodou dip-coating nanášen na substrát ze sodnovápenatého skla. Byl sledován vliv složení reakční směsi, tj. použitého prekursoru, rozpouštědla, katalyzátoru a jejich vzájemných poměrů, a stárnutí vzniklého solu na kvalitu nanesených vrstev. K hodnocení kvality vrstev byla použita především optická a elektronová mikroskopie. Po ozáření vrstev byla pozorována luminiscence, což potvrzuje fotoaktivitu fotosenzitizátorů v připravených produktech.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Sodná sůl kyseliny acetylsalicylové

Autor: Miroslava Dědová
Ročník: B3
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: Ing. Jan Čejka, Ph.D.

Kyselina acetylsalicylová (ASK), používaná zejména jako antipyretikum, analgetikum a antiflogistikum, má také antitrombotické účinky. Používá se k léčbě akutního infarktu myokardu a nestabilní anginy pectoris, pro sekundární prevenci u nemocných s manifestním aterosklerotickým onemocněním tepenného řečiště, pro primární prevence proti kardiovaskulárním onemocněním u lidí s vysokým rizikem vzniku těchto onemocnění.

Jednou z nevýhod ASK je špatná rozpustnost ve vodě a kyselých roztocích. Možným řešením je připravit sůl ASK. Sodnou sůl ASK lze připravit reakcí kyseliny acetylsalicylové a hydrogenuhličitanu sodného za přítomnosti malého množství vody pro nastartování reakce a následnou krystalizací z isopropanolu. Tímto postupem je možné připravit dvě formy sodné soli ASK (anhydrát a dihydrát). Formy se odlišují také stabilitou. Anhydrát je stabilní, zatímco dihydrát se rozkládá na octan sodný a kyselinu salicylovou. Struktura dihydrátu byla již v předchozích pracích vyřešena. Struktura anhydrátu stále ještě není známa. V této práci se podařilo připravit novou formu sodné soli ASK. Byla vyřešena struktura monohydrátu acetylsalicylátu sodného pomocí RTG difrakce na monokrystalu. Tento solvát se po pár měsících také rozkládá.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Technologie odstraňování fosfátů z vodných prostředí užitím syntetických aluminosilikátů

Autor: Bc. Lenka Holcová
Ročník: M2
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: doc. Ing. Barbora Doušová, CSc.

Fosfor je významným biogenním prvkem. Jeho sloučeniny se účastní důležitých procesů, např. přenosu energie (metabolismus – ATP, svalová, nervová činnost), růstu kostí a zubů. Dále je velmi důležitý pro růst a vývoj rostlin. Fosfor je také nedílnou součástí mnoha zemědělských hnojiv a detergentů. Vysoký obsah fosforečnanů v odpadních vodách však způsobuje kontaminaci přírodních vod, která se projevuje např. přemnožením řas a sinic (eutrofizací vodních ploch). Následkem je pak ochuzení vod o rozpuštěný kyslík. Eutrofizace je předmětem legislativního opatření. Náplní mé práce je studium mechanismu a kinetiky odstraňování fosfátů z vodných roztoků adsorpcí na modifikované sorbenty na bázi aluminosilikátů a stanovení teoretických sorpčních kapacit těchto materiálů. Experimentálně získaná data jsou vyhodnocována na základě adsorpčního modelu (Langmuirova izoterma). Nedílnou součástí práce je také sledování stability fosfátem vysyceného sorbentu v přirozeném prostředí podle ČSN.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Sorpce toxických oxoaniontů na modifikované kaoliny

Autor: Bc. Petra Houdková
Ročník: M2
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: doc. Ing. Barbora Doušová, CSc.

Arsen, antimon a selen patří mezi toxické prvky vyskytující se v malých množstvích ve vodách i v zemské kůře. Míra toxicity závisí na oxidačním stupni a formě výskytu těchto prvků. V mnoha oblastech Evropy i světa se kontaminace arsenem, antimonem a selenem zvyšují, často navzdory důslednému monitoringu a přísným ekologickým opatřením.

V práci je sledován průběh sorpce toxických oxoaniontů arsenu, antimonu a selenu na rehydratované kaoliny upravované solí dvojmocného železa, jako jedna z možností eliminace těchto látek z odpadních vod.

Jako sorbent byl použit kaolin Sedlec Ia upravený rehydratační metodou a následnou modifikací ionty Fe^{2+} . Tepelnou úpravou (dehydroxylací) při 550 °C byl přírodní kaolin převeden na metakaolin. První typ sorbentů vznikl následnou rehydratací v autoklávu v 0,6 M roztoku FeCl_2 a v 0,6 M roztoku FeSO_4 . Druhý typ sorbentů byl připraven třepáním po dobu 24 h v 0,6 M roztoku FeCl_2 a v 0,6 M roztoku FeSO_4 . Byly získány kaoliny modifikované ionty Fe, a tedy selektivní k anionickým kontaminantům. Na takto upravené kaoliny byly sorbovány oxoanionty As^{III} , As^{V} , Se^{IV} , Se^{VI} a Sb^{V} z roztoku o koncentraci $2 \cdot 10^{-4}$ M.

Výsledkem práce je porovnání účinnosti sorpce oxoaniontů v závislosti na době rehydratace sorbentu a porovnání sorpčních kapacit jednotlivých sorbentů vůči sledovaným oxoaniontům.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Příprava komplexů silibininu s β -cyklodextriny a jejich interkalace do Mg-Al hydrotalcitu

Autor: Bc. Tereza Houšková
Ročník: M1
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: prof. Ing. František Kovanda, CSc.

Hepatoprotektivum silibinin, hlavní účinná složka silymarinu izolovaného z ostropestřce mariánského, je velmi špatně rozpustné ve vodě. Jeho rozpustnost lze zvýšit vytvořením inkluzního komplexu s cyklodextriny. Farmakokinetické vlastnosti léčiv mohou být také zlepšeny zabudováním do anorganických nosičů. Cílem práce byla příprava komplexů silibininu s funkcionalizovanými β -cyklodextriny (karboxymethyl- β -cyklodextrinem a sulfatovaným β -cyklodextrinem) a jejich interkalace do struktury Mg-Al hydrotalcitu. K přípravě komplexů byla použita metoda společného odpaření rozpouštědel ze směsi roztoku sodných solí cyklodextrinů ve vodě a roztoku silibininu v ethanolu. Rozpuštěním připravených komplexů se silibinin podařilo převést do vodného roztoku. Pro interkalaci komplexů byla použita aniontově-výměnná reakce s Mg-Al hydrotalcitem v dusičnanové formě. Byla ověřena také možnost přímé interkalace silibininu rozpuštěného ve směsi vody a ethanolu s využitím rehydratační reakce směsného oxidu vzniklého kalcinací Mg-Al hydrotalcitu. Připravené vzorky byly charakterizovány pomocí práškové rentgenové difrakční analýzy a infračervené spektroskopie. Komplexy a interkalované vzorky smísené s mikrokrytalickou celulózą byly zapracovány do tablet a následně byly provedeny disoluční testy v simulovaných tělních tekutinách.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Sublimační kokrystalizace

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

Kokrystal API a vhodného koformeru je další z možností farmaceutické formulace, která může řešit problémy s rozpustností, rozpouštěcí rychlostí, samotnou formulací a dalších fyzikálních vlastností API. Nejprve bylo nutné vyhledat API a koformery vhodné pro sublimaci. Porovnáním v literatuře publikovaných připravených kokrystalů mezi jednotlivými API a koformery a dalších vlastností byly pro další práci zvoleny tři léčivé látky – niklosamid (antihelmetikum), nevirapin (antivirotikum) a ibuprofen (nesteroidní antiflogistikum), které jsou v čistém stavu ve vodném prostředí prakticky nerozpustné a vytvoření kokrystalu by mohlo rozpustnost příznivě ovlivnit. Nezbytné pro samotné provedení experimentu bylo navrhnout aparaturu. Pro společnou sublimaci API a koformeru je třeba obě látky v aparatuře zahřívat na optimální teplotu separátně vzhledem k rozdílným bodům sublimace API a koformeru.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Příprava fotoaktivních polymerních materiálů

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

Práce se zabývá přípravou polymerů s přídavkem fotosenzitizátorů schopných po ozáření světlem produkovat singletový kyslík $^1\text{O}_2$. Tato excitovaná forma molekulárního kyslíku je vysoce reaktivní a má antimikrobiální účinky. Jako fotosenzitizátory byly použity hexanukleární molybdenové klastry s jádrem $\text{Mo}_6\text{I}_8^{4+}$ a organickými apikálními ligandy, které obsahují skupiny umožňující interakci s polymerními řetězci. Byly syntetizovány klastry s *p*-aminobenzoátovými, monomethyltereftalátovými a *p*-hydroxybenzoátovými ligandy, které byly vneseny do polyester/polyamidové matrice. Polymer byl připraven blokovou kopolymerací kaprolaktonu s kaprolaktamem v hmotnostním poměru 40:60, fotosenzitizátory byly přidány v množství 0,1 hm.% do reakční směsi. Byl sledován vliv přídavku fotosenzitizátorů na vlastnosti vzniklého polymeru (množství nezreagovaných monomerů, bod tání). Luminiscence pozorovaná po ozáření materiálů zpracovaných do fólií prokázala, že během polymerační reakce nedošlo k odtržení apikálních ligandů a připravené molybdenové klastry si zachovaly fotoaktivní vlastnosti.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Solváty Trosipium chloridu

Autor: Tereza Skalická
Ročník: B3
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc.

Cílem práce bylo doplnit solvátový screening farmaceutické substance trosipium chloridu (TCI) a přinést ucelený obraz o solvátech TCI: reprodukovat dříve připravené solváty a případně připravit solváty nové. Dalším cílem bylo stanovit a porovnat rozpustnost TCI v rozpouštědlech, s nimiž TCI tvoří solváty.

Screening zahrnoval tři běžné krystalizační metody: pomalé odpařování rozpouštědla, krystalizaci v suspenzi a krystalizaci přídavkem antisolventu.

Orientační rozpustnost byla odhadnuta z krystalizačních experimentů, přesněji byla stanovena dvěma metodami. U rozpouštědel, ve kterých je TCI dobře rozpustný byla rozpustnost stanovena gravimetricky; u rozpouštědel, ve kterých je TCI rozpustný málo byla koncentrace nasyceného roztoku stanovena pomocí měření absorbance na UV-VIS spektrofotometru.

V systematickém solvátovém screeningu bylo použito celkem 25 rozpouštědel. Podařilo se reprodukovat některé dříve připravené solváty a připravit formu zcela novou: trosipium chlorid dihydrát.

Naměřené rozpustnosti a charakterizace nového dihydrátu TCI bude zúročena v připravované publikaci o solvátech trosipium chloridu.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Včlenění zeolitů do geopolymerní matrice

Autor: Bc. Michal Šuhájek
Ročník: M2
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: Ing. David Koloušek, CSc.

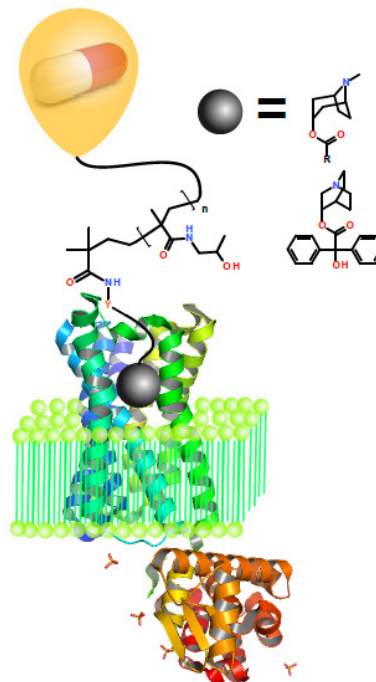
Předmětem práce byla příprava geopolymerní matrice. Do této matrice byl uměle přidáván syntetický zeolit A, případně přírodní Klinoptilolit. Byly připraveny reakční směsi s postupným nahrazováním metakaolinu zeolitem a zároveň byl udržován poměr $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3 = 1$. Takto připravené směsi byly podrobeny hydrotermální reakci při 50°C po dobu 24 hodin a následné alteraci ve vodě po dobu 1, 7, 14 a 28 dnů. Cílem experimentů bylo stanovit množství přidaného zeolitu, jež pozitivně ovlivní fyzikální a chemické vlastnosti připraveného materiálu, zejména pevnost v tlaku a specifický povrch. Výsledky měření ukázaly rostoucí hodnoty specifického povrchu s množstvím přidaného zeolitu. Hlavně pak překvapivější vyšší pevnost v tlaku u materiálů s 25 a 50 procenty zeolitu než u geopolymery připravených pouze z metakaolinu.

Sekce : Organická chemie M1

Syntéza polymerních konjugátů ligandů MACHR pro onkologickou diagnostiku a terapii

Autor: Aneta Pospíšilová
Ročník: M1
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Radek Jurok, Ph.D.

Muskarinový acetylcholinový receptor (MACHR) byl dlouho zkoumán jen pro svou funkci v nervovém systému. Ukazuje se ovšem, že některé typy rakovinných buněk jej silně hyperexprimují. Ligandy MACHR je proto možné použít pro vysoce účinné cílení rakovinné tkáně, pokud se zabrání jejich průniku k nervovým buňkám. Ideálním řešením je navázáním ligandu na vhodnou polymerní nanočástici, která znemožní průnik ligandu k nervové tkáni a navíc může nést a řízeně uvolňovat chemoterapeutikum. Cílem mé práce je syntetizovat takový „drug delivery“ systém. V současnosti připravuji řadu methakrylamidových monomerů, které prostřednictvím různých linkerů ponesou ester tropinu nebo 3-chinuklidinyl-benzilát. Kopolymerací těchto monomerů s 2-hydroxypropylmethakrylamidem a další funkcionalizací polymeru bude připraven požadovaný „drug delivery“ systém. Na základě získaných poznatků v budoucnu připravím širší škálu analog cholinu pro další experimenty *in vitro* a *in vivo*.



Příprava 2-amino[6]helicenu jako prekursoru pro chirální flaviniové katalyzátory

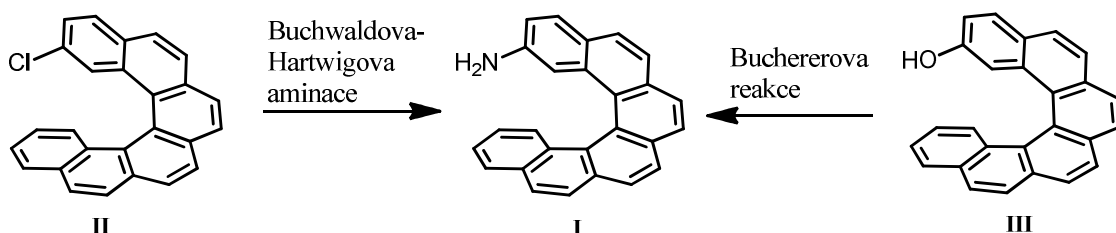
Autor: Martin Jakubec

Ročník: M2

Ústav: Organická chemie

Školitel: doc. Ing. Radek Cibulka, Ph.D.; Ing. Jan Storch, Ph.D.

Chirální flaviniové soli jsou látky schopné působit jako enantioselektivní oxidačně-redukční katalyzátory v řadě reakcí, například u sulfoxidací, *N*-oxidací, nebo v Baeyerových-Villigerových reakcích. Heliceny jsou naproti tomu polycyklické, inherentně chirální sloučeniny, jež disponují velkým potenciálem pro řadu využití, mimo jiné v enantioselektivní katalýze. Cílem této práce je připravit 2-amino[6]helicen (**I**), který může být následně inkorporován do struktury flaviniové soli tak, aby fungoval jako chirální selektor. Bylo připraveno několik precursorů potenciálně vedoucích ke struktuře **I**, z nichž sloučeniny **II** a **III** poskytují 2-amino[6]helicen pomocí Buchererovy, respektive Buchwaldovy-Hartwigovy reakce v dobrých výtěžcích.



Studie Hiyamova couplingu polyfluoralkenyl- a polyfluorpolyoxaalkenylsilanů

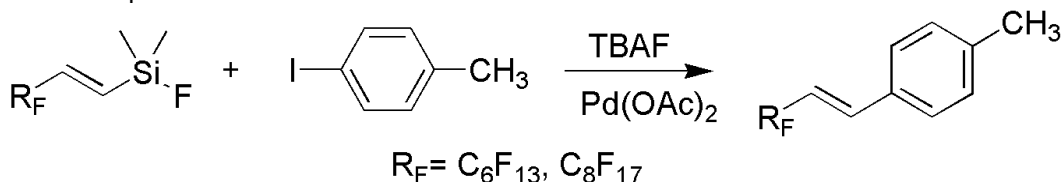
Autor: Martin Maroušek

Ročník: M1

Ústav: Organická chemie

Školitel: doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

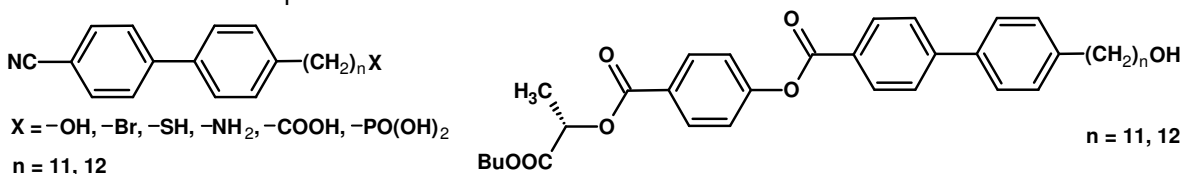
V naší laboratoři se v současné době zabýváme syntézou polyfluoralkylovaných NHC ligandů pro rutheniové katalyzátory recyklovatelné pomocí fluorových separačních metod. Ve své práci jsem se zabýval přípravou polyfluoralkenylsilanů a polyfluorpolyoxaalkenylsilanů a jejich potenciálním využitím pro Hiyamův coupling s modelovou látkou, 4-jodtoluenem, a fluorderiváty 4-jodanilinu jako potenciálními intermediáty pro fluorové NHC ligandy. Hiyamův coupling polyfluoralkenylsilanů s 4-jodtoluenem proběhl podle očekávání, ale coupling s fluorderiváty 4-jodanilinu neproběhl.



Kapalné krystaly: Ligandy pro magnetické nanočástice

Autor: Tomáš Hodík
Ročník: M2
Ústav: Organická chemie
Školitel: prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

Kapalně-krystalické materiály představují pestrou paletu sloučenin, které v sobě skrývají nevyčerpatelné možnosti aplikace. Využití bifenyl-4-karbonitrilu pro design a syntézu kapalně-krystalických materiálů je široce rozšířená oblast zájmu. Naším cílem bylo připravit ω -substituované modelové kapalně-krystalické materiály a studovat vliv terminální funkční skupiny ($-\text{Br}$, $-\text{OH}$, $-\text{COOH}$, $-\text{SH}$, $-\text{NH}_2$, $-\text{PO}(\text{OH})_2$) na mesomorfní chování. Ve své práci se zabývám jak syntézou cílených potenciálních mesogenů, tak i studiem mesomorfního chování ve vztahu ke struktuře produktů.



Příprava iontových receptorů na bázi calix[4]arenů – syntéza a studium vlastností

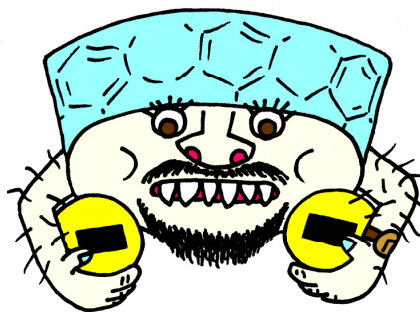
Autor: Tomáš Klejch
Ročník: M1
Ústav: Organická chemie
Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Calixareny jsou makrocyclické sloučeniny, jejichž deriváty tvoří již několik desítek let důležitou součást supramolekulární chemie. Zavedením vhodných funkčních skupin do skeletu calixarenu lze připravit receptory, které nacházejí využití v různých multioborových aplikacích. Tato práce je zaměřena na přípravu receptorů pro anionty, jejichž rozpoznávání je obtížnější než rozpoznávání kationtů a je méně prozkoumáno.

Pro syntézu receptorů byly připraveny deriváty s nitro skupinami v různých pozicích. Deriváty s nitro skupinou na horním okraji nesou dále acetátové, nebo propargylové funkce na spodním okraji, které umožňují další derivatizaci.

Deriváty s nitro skupinou na spodním okraji byly připraveny nosylací a obsahují sulfonylové elektronakceptorní skupiny, které zlepšují komplexační vlastnosti výsledného receptoru.

V dalším kroku byly zredukovány nitroskupiny a reakcí takto připravených aminoderivátů s různými isokyanáty byly připraveny cílové receptory. Jejich komplexační vlastnosti byly zkoumány pomocí NMR spektroskopie.



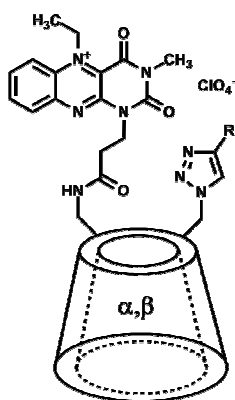
Flavin-cyklodextrinové katalyzátory s modifikovanou cykloextrinovou podjednotkou

Autor: Jan Zelenka

Ročník: M2

Ústav: Organické chemie

Školitel: doc. Ing. Radek Cibulka, Ph.D., Mgr. Tomáš Kraus, Ph.D.



Flavin-cykloextrinové a pyrimidin-cykloextrinové konjugáty představují slibné katalyzátory enantioselektivních oxidací sulfidů na sulfoxidy peroxidem vodíku. S jejich využitím je dosahováno enantioselektivity až 91 % při oxidacích alifatických sulfidů. Za enantioselektivní průběh reakce v přítomnosti flavin-cykloextrinového katalyzátoru je zodpovědná inherentně chirální cykloextrinová jednotka. Stávající struktura konjugátů neumožňuje jejich modifikaci na cykloextrinovém skeletu, a tím pádem neumožňuje případné zlepšení enantioselektivity pro konkrétní substrát. Cílem práce je syntéza cykloextrinového skeletu, který by mohl být snadno selektivně substituován dvěma substituenty: flavinovou jednotkou a stereodiskriminantem, a prozkoumání vlivu různých stereodiskriminantů a způsobu jejich připojení na cykloextrinový skelet.

Syntéza a využití fluorofilního cyklopentadienu

Autor: Veronika Bílková

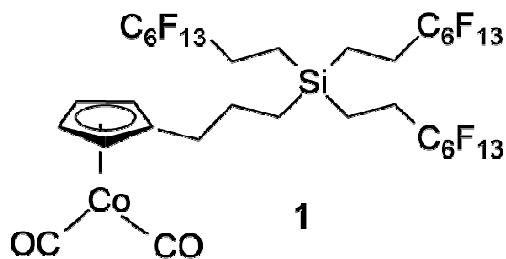
Ročník: M1

Ústav: Organické chemie

Školitel: prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.

Vysoce fluorované látky vykazují výbornou preferenční rozpustnost ve fluorových rozpouštědlech oproti rozpouštědlům organickým, dobrou rozpustnost ve superkritickém CO₂ a vysokou afinitu k fluorovaným povrchům. Těchto vlastností se, mimo jiné, dá využít v řadě separačních metod. V této práci byl připraven polyfluorovaný silanový tag využitelný k fluorofilizaci různých substrátů, například cyklopentadienu, acetylenu nebo pyridinu.

Cyklopentadien s polyfluorovaným tagem byl využit k syntéze fluorofilních komplexů - titanocen dichloridu a komplexů kobaltu, které jsou běžně využívány jako katalyzátory cyklotrimerizačních reakcí. Katalytická aktivita komplexu **1** byla otestována na modelovém substrátu fenylacetylenu za různých podmínek v scCO₂.



Syntéza N, S a P derivátů [7]helicenu a studium jejich koordinačních vlastností s přechodnými kovy

Autor: Tomáš Beránek

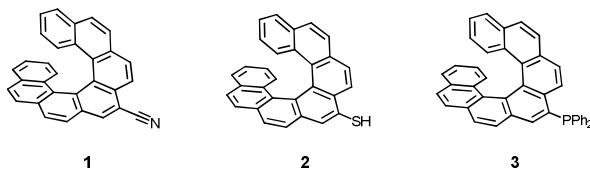
Ročník: M2

Ústav: Organické chemie

Školitel: prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.; Konzultant: Ing. Jan Storch, Ph.D.

Heliceny představují díky svým unikátním elektronickým a chiroptickým vlastnostem vhodné kandidáty pro širokou škálu aplikací. Přestože byly heliceny již úspěšně použity například také v asymetrické katalýze, neexistuje rozsáhlejší studie přípravy komplexů helicenových ligandů s katalyticky významnými přechodnými kovy.

S důrazem na poslední zmíněnou oblast byl připraven nitrilový (1), sulfanylový (2) a fosfinový (3) derivát [7]helicenu¹ a jejich syntéza byla v rámci této práce dále optimalizována. Byly provedeny pilotní studie komplexačních vlastností 9-(difenylofosfanyl)[7]helicenu (3) a pokusy o imobilizaci 9-sulfanyl[7]helicenu (2) na nanočástice CdSe.



[1] Žádný, J. et al. *Tetrahedron* **2013**, 69, 6213.

Vliv úhlu zalomení na mesomorfní chování kapalných krystalů

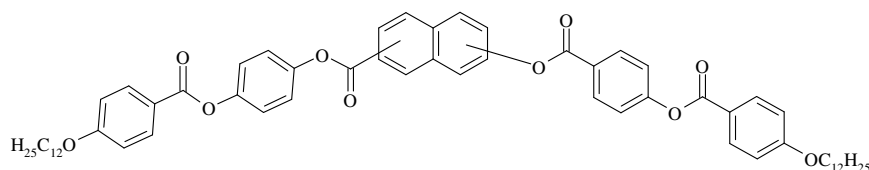
Autor: Tereza Prausová

Ročník: M2

Ústav: Organické chemie

Školitel: Ing. Václav Kozmík, CSc.

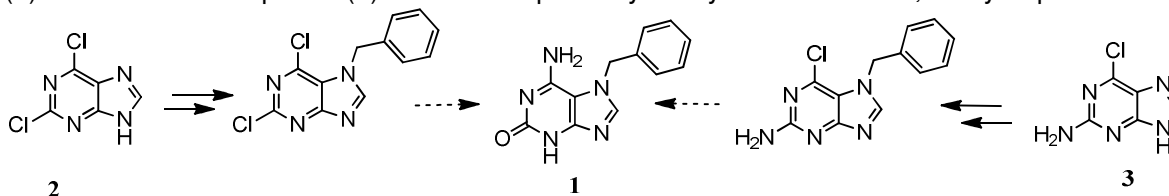
Studium kapalných krystalů je v dnešní době širokým oborem zahrnujícím nejen chemii a fyziku, ale i elektroinženýrství, biologii a další. Své uplatnění ale stále nacházejí především v zobrazovací technice. Tato práce je zaměřena na syntézu nových lomených kapalných krystalů s různým úhlem zalomení. Jako centrální jádro těchto nových sloučenin byly využity polohové izomery hydroxynaftalenkarboxylové kyseliny. Cílem práce je zjistit vliv velikosti úhlu zalomení a místa připojení prodlužujících řetězců na mesomorfní vlastnosti připravených kapalně-krystalických materiálů. Bylo připraveno šest modelových cílových materiálů níže uvedené obecné struktury.



Regioselektivní příprava N^7 -substituovaných isoguaninů

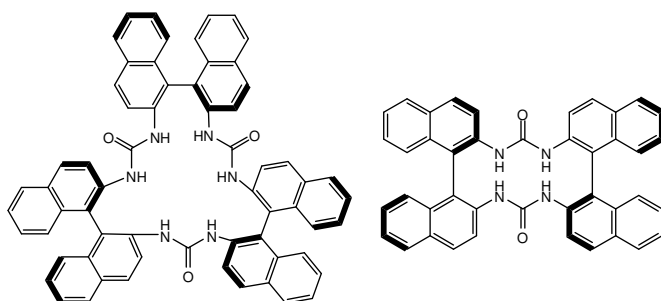
Autor: Lukáš Lattenberk
 Ročník: M1
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D.

Isoguanin je heterocyklická látka odvozená od purinu, jehož strukturní motiv se nachází v řadě biologicky aktivních látek. Na rozdíl od N^9 -isomerů je velmi málo známo o biologické aktivitě N^7 -substituovaných isoguaninů, pravděpodobně z důvodu jejich obtížné dostupnosti. Proto je cílem této práce vyvinout vhodnou metodu pro regioselektivní syntézu N^7 -substituovaných isoguaninů **1**. V příspěvku budou diskutovány výsledky získané během pokusů o přeměnu 2,6-dichlorpurinu (**2**) a 2-amino-6-chlorpurinu (**3**) na koncové produkty **1** s využitím chemie 7,8-dihydropurinů.



Cyklické ligandy na bázi binaftalenových močovin pro enantiomerní komplexaci

Autor: David Just
 Ročník: M2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.

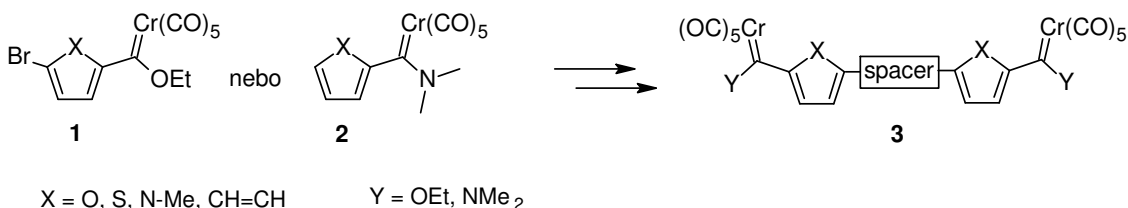


U organokatalytických reakcí hrají významnou roli nekovalentní interakce a tvorba komplexů. Deriváty močovin a thiomčovín mají schopnost interagovat s organickými sloučeninami a proto jsou využívány jako ligandy pro komplexaci. Zavedením binaftalenové jednotky vzniká chirální látka a otevírá se tak možnost enantiomerní komplexace. Větší účinnosti by mohlo být docíleno uzavřením kruhu, čímž by vznikla kavita a bylo by dosaženo preorganizované molekuly s definovaným vnitřním prostorem. Cílem této práce je syntéza různých cyklických derivátů močovín obsahující binaftalenové jednotky, které by mohly být využity k enantiomerní komplexaci chirálních organických látek.

Regioselektivní příprava Fischerových biskarbenových komplexů chromu

Autor: Hana Váňová
 Ročník: M2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D.

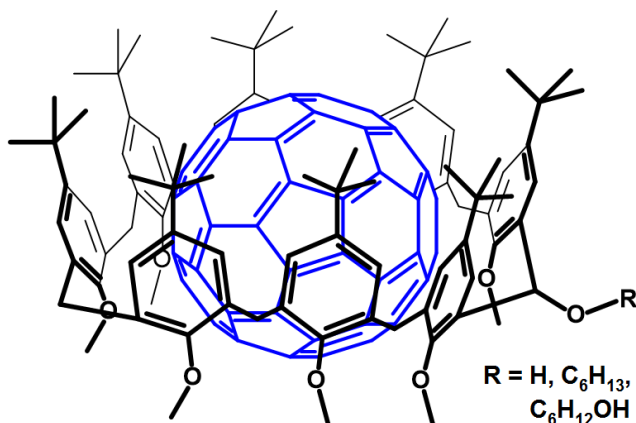
Fischerovy karbenové komplexy jsou sloučeniny s formální dvojnou vazbou uhlík–kov, které nachází četné aplikace v moderní organické chemii, zejména pak při přípravě přírodních biologicky aktivních látek. Na rozdíl od jednoduchých Fischerových karbenových komplexů je velmi málo známo o elektrochemických vlastnostech, reaktivitě a přípravě Fischerových biskarbenových komplexů. Proto jsme se v naší práci zaměřili na vypracování vhodné metodiky pro syntézu biskarbenových komplexů **3**, kde jsou dva karbenové fragmenty spojeny prostřednictvím různých spojek. Při přípravě cílových molekul **3** vycházíme ze snadno dostupných karbenových komplexů **1,2**. Metalací výchozích látek a následnou reakcí s elektrofilu jsou získány odpovídající symetrické a nesymetrické biskarbenové komplexy **3**.



Sekce : Organická chemie M2

Příprava derivátů calix[8]arenu vhodných pro chromatografickou separaci fullerénů

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

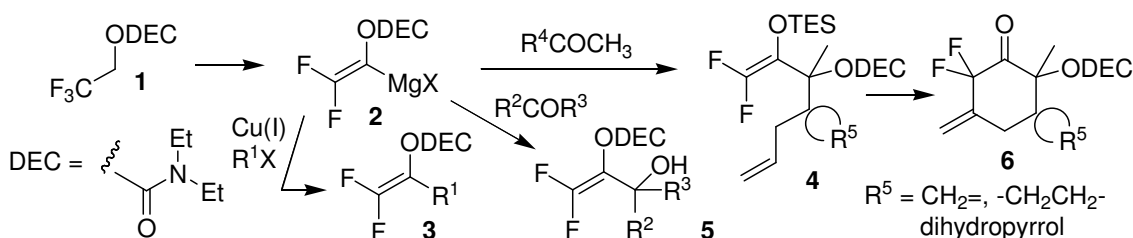


Calix[6]- a calix[8]aren mají díky rozsáhlému π -systému značnou afinitu k fullerenu, se kterým tvoří inkluzní komplexy. Navázáním calixarenu na vhodný nosič (silikagel) lze připravit stacionární fázi pro chromatografickou separaci fullerénů. Cílem práce je syntéza derivátů calix[8]arenu, které by na jednom z můstků nesly substituent vhodný k připojení na nosič. Radikálová bromace ve vodě vede k hydroxyderivátu a v alkoholu k alkoxyderivátu - logickým dalším krokem je proto reakce prováděná v přítomnosti diolu, který po připojení na calix[8]aren bude obsahovat dále transformovatelnou hydroxyskupinu.

2,2,2-Trifluorethanol jako syntetický stavební blok

Autor: Iveta Klimánková
 Ročník: M2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc., prof. Jonathan M. Percy

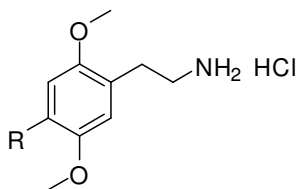
Molekuly obsahující fluor nacházejí široké uplatnění v různých oblastech chemie včetně farmakochemie. Fluorované látky s pěti- a šestičlennými kruhy mohou být využity jako analoga cukrů a lze na nich zkoumat specifitu substrátu v příslušných enzymatických reakcích. Dehydrofluorací a metalací chráněného 2,2,2-trifluorethanolu **1** jsem získala enolát **2**, použitelný pro syntézu široké řady sloučenin. Ve své práci jsem se zabývala optimalizací jak jeho přípravy, tak jeho reakcí s elektrofilu na fluorované produkty **3-5**. Difluorkarbamat **4** jsem využila pro syntézu spirocyklů **6** pomocí Saguesovy-Itovy cyklizace.



Syntéza haptenu drog odvozených od fenylethylaminu

Autor: Kateřina Bártová
 Ročník: M1
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: Ing. Radek Jurok, Ph.D., Ing. Martin Kuchař, Ph.D.

Nárůst popularity nových syntetických drog v posledních letech odhalil nedostatky v detekci těchto látek v biologických matricích. Rychlý screening ukazující na požití drogy umožňují imunochromatografické testy. Jejich základem jsou polyklonální protilátky, které se získávají imunizací laboratorních zvířat konjugáty haptenu s BSA. Hapteny vycházejí ze struktury cílové skupiny drog a jsou opatřeny spojkou zakončenou karboxylovou funkcí, přes kterou jsou dále navázány na volné aminoskupiny lysinu obsažené v BSA.

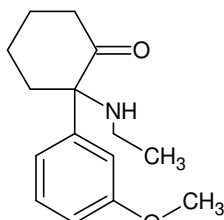


1: R = -CH₂COOH
2: R = -CH₂CH₂CH₂COOH

Byly připraveny dva hapteny **1** a **2** k modelové skupině 2C fenylethylaminů lišící se délkou spojky. Hapten s kratší spojkou byl navázán na BSA a připraveným konjugátem byla imunizována laboratorní zvířata.

Syntéza metabolitů psychoaktivní látky methoxetaminu

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



Methoxetamin

Methoxetamin je z hlediska strukturního i farmakologického analogem ketaminu. I přes komerční dostupnost methoxetaminu jeho kompletní syntéza zatím publikována nebyla. Zatímco ketamin je klasifikován jako látka omamná a psychotropní, držení methoxetaminu u nás protizákonné není. Důkladná znalost jeho účinků a metabolismu je kritickým faktorem pro takzvaný "risk assessment", na základě kterého jsou látky zařazovány mezi zákonem zakázané látky. Vzhledem k řadě intoxikací, včetně fatálních případů, je včasná diagnostika klíčová pro správnou terapii. Pro správnou diagnostiku je nutné srovnání se standardy. Byla navržena syntéza methoxetaminu a několika jeho metabolitů. Takto připravené metabolity budou použity jako standardy pro následné metabolické studie, analytické testy a studium farmakokinetiky. Změřené přesné hmoty látek budou zařazeny do toxikologické knihovny hmotnostních spekter.

Syntéza nových ligandů cholinového transportéru

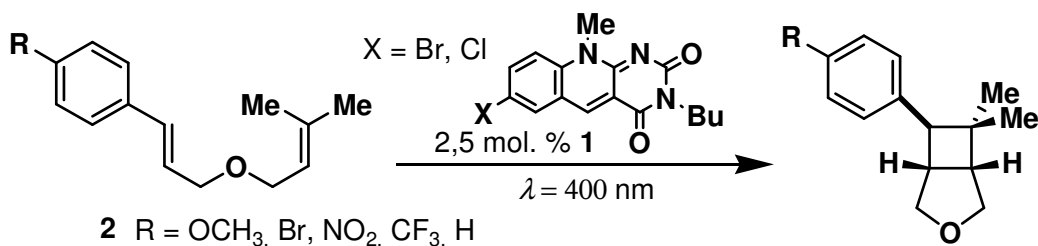
Autor: Bc. Pavel Švec
Ročník: M2
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Radek Jurok, Ph.D.

Cholinový transportér (ChT) je hyperexprimován na povrchu některých typů nádorových buněk a představuje tak molekulární strukturu využitelnou pro cílení diagnostických a terapeutických radiofarmak. Předložený syntetický postup vede k novým radioznačitelným derivátům cholinu a umožňuje syntézu řady strukturně příbuzných látek. Přípravu radioizotopově značených derivátů jsem optimalizoval k dosažení vysokých radiochemických výtěžků ve vodném prostředí bez nutnosti chromatografické separace. Při *in vitro* testování první série látek byla pozorována jejich preferenční vazba na nádorové linie hyperexprimující ChT, a to s řádově vyšší afinitou než u běžně používaných standardů (cholin, hemicholinium-3). Na základě získaných poznatků v budoucnu připravím širší škálu analog cholinu pro další experimenty *in vitro* a *in vivo*.

Halogendeazaflaviny jako nové katalyzátory pro fotochemické [2+2] cykloadice

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

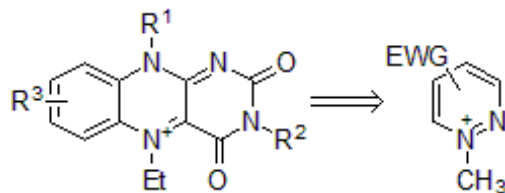
V posledních pěti letech dochází k rychlému rozvoji nových syntetických postupů založených na reakcích využívajících viditelného světla ve spojení s vhodnými fotokatalyzátory. Jednou z takových reakcí je fotochemická [2+2] cykloadice představující pravděpodobně nejužitečnější způsob přípravy derivátů cyklobutanu. Zatímco dosud známé přístupy využívají UV záření nebo viditelné světlo v kombinaci s komplexními katalyzátory ušlechtilých kovů, byla u nás v laboratoři pozorována fotochemická [2+2] cykloadice iniciovaná viditelným světlem a flavinovým fotosenzitizátorem. S cílem využít tzv. efektu těžkého atomu byly připraveny nové katalyzátory 7-halogen-5-deazaflaviny **1** a jejich katalytická aktivita byla otestována na řadě 1,6-nenasycených etherů **2**. Studován byl dále vliv rozpouštědla na průběh reakce, stabilita katalyzátorů a možnost aplikace intramolekulárních [2+2] cykloadic při totální syntéze přírodních látek.



Pyridaziniové soli jako katalyzátory oxidací peroxidem vodíku

Autor: Vít Zvoníček
 Ročník: M2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: doc. Ing. Radek Cibulka, Ph.D.

Flaviniové soli byly studovány jako účinné chemoselektivní katalyzátory oxidací pomocí peroxidu vodíku. Bylo zjištěno, že je možno relativně složitý skelet flavinového katalyzátoru nahradit jednoduchou heteroareniovou solí, která nese elektronegativní substituent, za dosažení podobné katalytické účinnosti. Tím se zjednoduší syntéza a zvýší dostupnost takových katalyzátorů pro praktické aplikace. Dosud byly testovány soli připravené z pyrazinu, pyridinu a pyrimidinu. Cílem práce je příprava substituovaných pyridaziniových solí a otestování jejich katalytické účinnosti s využitím modelových substrátů. Do budoucna se uvažuje i možnost zavedení chirálního selektoru pro katalýzu enantioselektivních oxidací.



Příprava nové povrchově aktivní látky radikálovou adicí

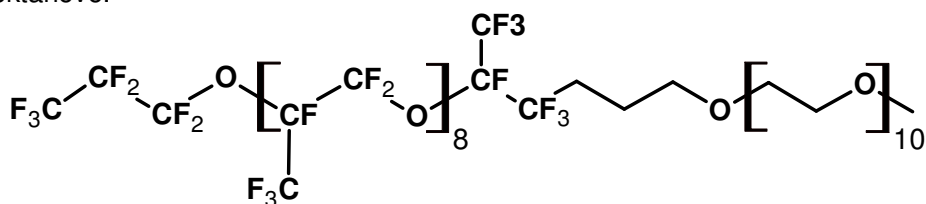
Autor: Jiří Lapčík

Ročník: M1

Ústav: Organické chemie

Školitel: prof. Ing. Chadron Mark Friesen Ph.D.; doc. Ing. Jaroslav Kvičala, CSc.

Polyfluorované povrchově aktivní látky nacházejí široké využití v běžném životě, například ve voděodolných membránách, při povrchové ochraně materiálů, i jako přísada do hasících pěn. Nevýhodou je minimální biodegradabilita dříve běžně používaných sloučenin jako je perfluorooctanová kyselina (PFOA) a tím jejich akumulace v životním prostředí. Cílem mé práce bylo připravit látku potenciálně schopnou nahradit používanou PFOA a provést její základní charakterizaci. Jako výchozí látka byl použit jodoligohexafluoropropylenoxid (pHFPO-I). Reakcí s allylpolyethylenglykolem na fázovém rozhraní byl radikálovou adicí připraven odpovídající diblok. Následnou redukcí byla získána nová povrchově aktivní látka s výrazně nižší kritickou micelární koncentrací než jakou vykazovala pro srovnání použitá amonná sůl kyseliny perfluorooctanové.



Syntéza metabolitů nových syntetických drog s 1,3-dioxolanovým kruhem

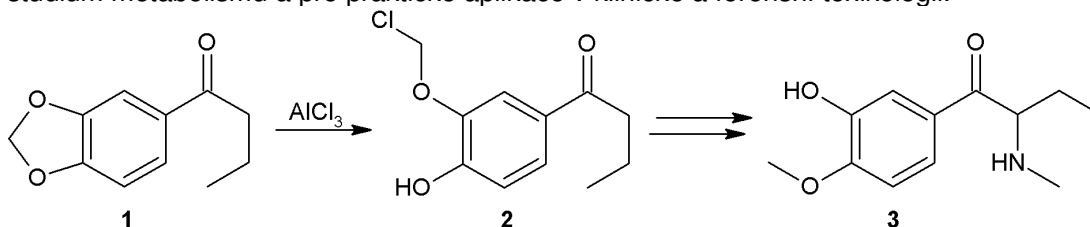
Autor: Lubomír Váňa

Ročník: M2

Ústav: Organické chemie

Školitel: Ing. Michal Himl, Ph.D.

Celá řada psychoaktivních látek (např: MDMA (extáze), Eden, Butylon...) obsahuje ve své struktuře 1,3-dioxolanový kruh. Tyto látky podléhají v organismu metabolickému otevření kruhu, a proto bylo cílem této práce vypracovat metodu štěpení tohoto kruhu vhodnou k syntéze analytických standardů využitelných pro studium metabolismu nových syntetických drog, které ve své struktuře 1,3-dioxolanový kruh zahrnují. Štěpení bylo prováděno pomocí AlCl_3 a rovněž byla studována regioselektivita této reakce. Jedna z připravených látek (3-chlormethoxy-4-hydroxybutyrofenon (**2**)) byla použita k syntéze potenciálního metabolitu (**3**) drogy Butylonu. Takto synteticky připravené látky mohou sloužit jako autentické standardy pro studium metabolismu a pro praktické aplikace v klinické a forensní toxikologii.

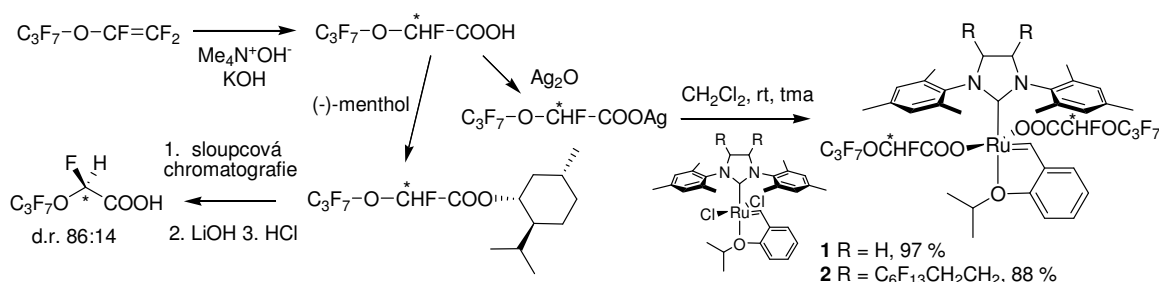


Rutheniové katalyzátory modifikované polyfluoroxaalkanoáty

Autor: Pavlína Lipovská
 Ročník: M1
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Ve své práci jsem se zabývala syntézou rutheniových komplexů **1**, **2** nesoucích racemické polyfluoroxaalkanoátové ligandy. Tyto katalyzátory jsou poměrně stabilní a překvapivě vysoce aktivní při metatezi alkenů za vzniku tetrasubstituované dvojné vazby.

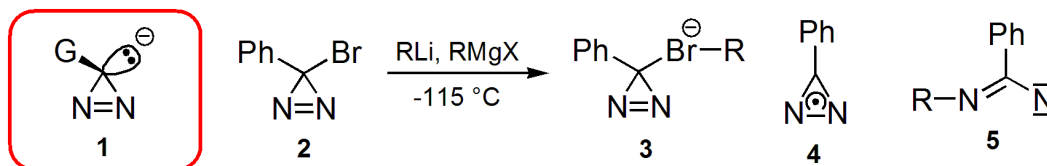
V další části práce jsem studovala rezoluci racemických polyfluoroxaalkanových kyselin jako prekurzorů pro přípravu chirálních rutheniových katalyzátorů enantioselektivní metateze alkenů. Jako zatím nejúspěšnější se ukázala separace distereoisomerních (-)-menthyl-esterů pomocí sloupcové chromatografie.



Metalace 3H-diazirinů

Autor: Rafael Navrátil
 Ročník: M2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: Ing. Tomáš Martinů, Ph.D.

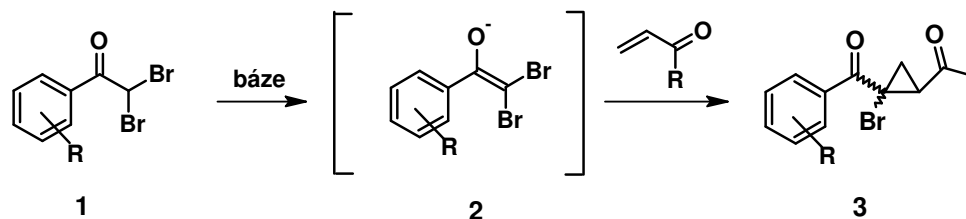
3H-Diaziriny jsou cyklické valenční izomery diazosloučenin. Na rozdíl od snadné metalace diazosloučenin na centrálním atomu uhlíku není metalace diazirinů prozkoumána. Odpovídající karbanionty **1**, formálně antiaromatické 4π elektronové systémy, byly již dříve generovány v plynné fázi a kvantově-chemické výpočty předpovídají jejich relativní stabilitu. Reakce 3-brom-3-fenyldiazirinu (**2**) jako modelové sloučeniny s organolithnými sloučeninami za velmi nízkých teplot poskytuje „ate“ komplexy **3** a radikál **4**, zatímco reakce s organohorečnatými sloučeninami poskytuje imidoynitreny **5**. Reaktivní intermediáty **3**, **4**, **5** následnými reakcemi poskytují izolovatelné produkty – dehalogenovaný diazirin, benzonitril, resp. N,N'-dialkylamidiny.



Příprava substituoaných bromcyklopropanů s využitím α,α -dihalogenketonů

Autor: Peter Polák
 Ročník: M2
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D.

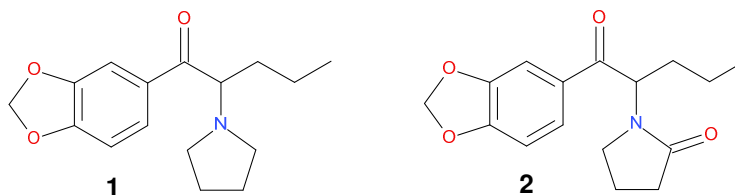
V přírodě se cyklopropanové uskupení vyskytuje velmi často jako součást metabolických derivátů a biologicky aktivních látek. Proto jsme se pokusili vypracovat vhodnou metodiku pro přípravu substituoaných bromcyklopropanů **3**. Výchozí látkou při přípravě cyklopropanových derivátů jsou dibromketony **1**, které byly získány reakcí terminálních alkynů s NBS. Přeměna výchozí látky **1** na enolát **2** byla provedena účinkem vhodné báze a následná reakce enolátu **2** s Michaelovskými akceptory poskytla cyklopropanové deriváty **3**. V příspěvku bude diskutován vliv reakčních podmínek, struktury výchozích látek a aditiv na průběh cyklopropanační reakce.



Syntéza metabolitu methylenedioxyprovaleronu

Autor: Heda Jakubův
 Ročník: B3
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: Ing. Václav Kozmík, CSc.

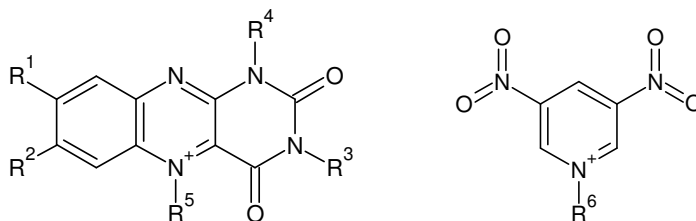
Kathinony tvoří skupinu nových syntetických drog tzv. "designer drugs" se silnými psychostimulačními účinky, jež jsou v hojné míře zneužívány jako náhražka za klasické drogy. Jsou odvozeny od katinonu, alkaloidu fenyalkylaminového typu vyskytujícího se v rostlině Kata jedlá (*Catha edulis*). Do této skupiny drog patří i methylenedioxyprovaleron **1**, jenž se v těle uživatelů přeměňuje za vzniku celé řady metabolitů, jejichž struktura byla prokázána pomocí hmotnostní spektrometrie. Pro plánovanou diagnostiku je proto nutné připravit veškeré metabolity a mým úkolem bylo připravit laktam **2**.



Deriváty 3,5-dinitropyridinu jako katalyzátory oxidací peroxidem vodíku v dvoufázových prostředích

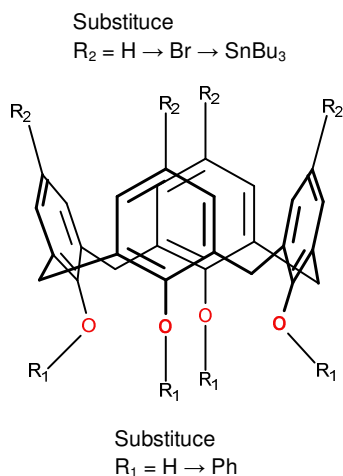
Autor: Adam Pokluda
Ročník: B2
Ústav: Organické chemie
Školitel: doc. Ing. Radek Cibulka, Ph.D., Ing. Jiří Šturala

V nedávné době byla v naší laboratoři popsána oxidace sulfidů na sulfoxidy peroxidem vodíku v dvoufázovém prostředí voda – organické rozpouštědlo katalyzovaná amfifilními flaviniovými solemi, které zde fungují jako katalyzátory fázového přenosu peroxidu vodíku (*ChemCatChem* **2014**, 6 (10), 2843-2846). V této reakci by flaviniové soli mohly být nahrazeny jednoduššími heteroareniovými solemi, které jsou snadněji synteticky dostupné. Cílem mé práce je příprava série lipofilních 1-alkyl-3,5-dinitropyridiniových solí a jejich otestování jako katalyzátorů oxidace modelových substrátů v prostředí chloroform – voda.



Substituce calix[4]arenového skeletu

Autor: Michaela Houšková
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.



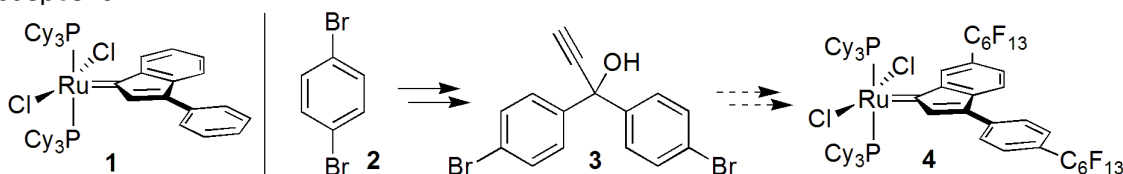
V projektu budou prezentovány reakce na calixarenech, které mohou být substituovány na horním nebo spodním okraji. První část bude věnována fenylocím spodního okraje calixarenů. V této oblasti byla provedena celá řada pokusů, jejichž výsledky budou diskutovány. V druhé části budou představeny substituce horního okraje, konkrétně tvorba stannanů, které budou v budoucnosti využity ke cross-coupling reakcím.

Intermediáty pro fluorované indenylidenové komplexy Ru

Autor: Kateřina Kučňirová
 Ročník: B3
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Rutheniový komplex **1** je komerčně dostupný katalyzátor metateze alkenů s vysokou stabilitou, ale pomalou iniciační fází. U jeho bis-perfluoralkylovaného analogu **4** by vlivem elektronakceptorních skupin mělo dojít k urychlení iniciační fáze a zvýšení fluorofility, která by umožnila recyklaci katalyzátoru z reakční směsi.

Cílem mé práce byla syntéza intermediátů pro fluorový indenylidenový ligand komplexu **4**. Studovala jsem dvě reakční cesty: v první jsem získala z *p*-dibrombenzenu (**2**) tříkrokovou syntézou diarylovaný propynol **3**, výchozí sloučeninou druhé cesty byl 1-brom-4-(perfluorhexyl)benzen. Pokusy o zavedení perfluoralkylových skupin do molekuly propynolu **3** byly zatím neúspěšné.

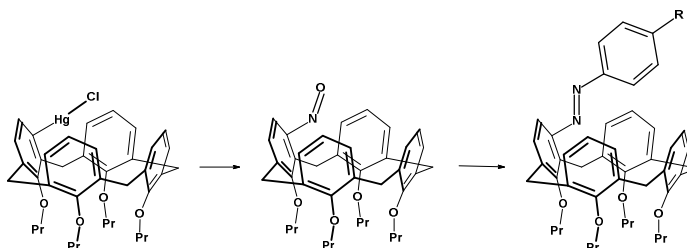


Příprava *meta*-nitrosocalix[4]arenů a jejich využití v syntéze azosloučenin

Autor: Martin Tlustý
 Ročník: B3
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: Ing. Petr Slavík

Calixareny jsou makrocyclické sloučeniny, které tvoří již po několik desítek let spolu s cyklodextriny, porfyriny a fullereny nedílnou součást supramolekulární chemie. Většina popsaných metod derivatizace horního okraje calix[4]arenu vede k substituci do *para*-polohy. Využitím elektrofilní aromatické merkurace je však možné selektivně provést substituci v poloze *meta*.

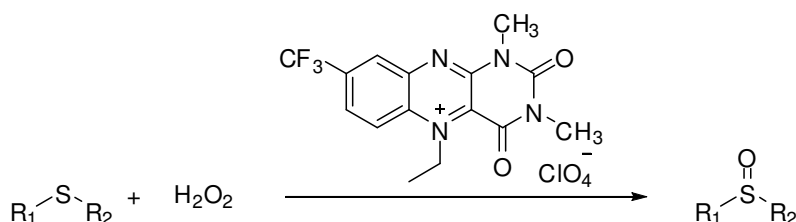
Tato práce se zabývá přípravou calix[4]arenů nesoucích v poloze *meta* nitroso skupinu. Těchto sloučenin bylo dále využito především v přípravě azosloučenin, které by mohly sloužit jako prekurzory pro syntézu složitějších inherentně chirálních receptorů. Další část práce se zabývá využitím mononitrosoderivátů k přípravě intramolekulárně přemostěných derivátů calix[4]arenu. Tyto sloučeniny mají pravděpodobně velmi odlišné chování oproti běžným calixarenům.



Příprava a studium katalytické aktivity alloxaziniové soli s elektronakceptorní trifluormethylovou skupinou

Autor: Hana Brunhoferová
 Ročník: B3
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: Ing. Eva Svobodová, Ph.D.

Sulfoxidy představují významné intermediáty v organické syntéze, některé z nich vykazují výraznou biologickou aktivitu a používají se jako farmaceutické substance, například inhibitory protonové pumpy, známé jako prazoly, či analeptikum modafinil. Sulfoxidy jsou obvykle připravovány oxidací odpovídajících sulfidů. Mezi perspektivní organokatalyzátory oxidace sulfidů na sulfoxidy peroxidem vodíku patří flaviniové soli. Bylo pozorováno¹, že elektronakceptorní skupina navázaná v poloze 8 alloxaziniového katalyzátoru zvyšuje jeho



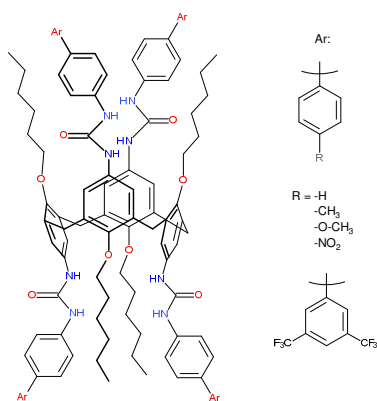
účinnost. Cílem této práce je příprava 1,3-dimethyl-8-trifluormethylalloxazinium-perchlorátu **1** a studium jeho katalytické účinnosti při oxidacích vybraných sulfidů; studovány jsou především prekursorů vybraných léčiv, jako je modafinil či

rabeprazol.

¹ Ménová P., Dvořáková H., Eigner V., Ludvík J., Cibulka R.: *Adv. Synth. Catal.* **2013**, 355, 3451-3462.

Syntéza a využití 1,3-alternujících p-ureidoderivátů calix[4]arenu

Autor: Pavla Zielonková
 Ročník: B3
 Ústav: Organické chemie
 Školitel: doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.



p-Ureidoderiváty calixarenu jsou látky známé svou schopností komplexovat anionty, které hrají důležitou roli mj. i v přírodních procesech. Tato práce je zaměřena na doplnění řady 1,3-alternujících ureidoreceptorů, které dosud nebyly systematicky zkoumány. Základem byl zvolen tetra-*O*-hexyloxy-*p*-*tert*-butylcalix[4]aren v 1,3-alternující konformaci, který byl postupně převeden na *p*-aminoderivát a následnou adicí na různě substituované (elektron-donorními nebo elektron-akceptorními skupinami) fenylosokyanáty na požadované ureidoreceptory (viz obrázek). Komplexační vlastnosti připravených receptorů vůči vybraným aniontům budou studovány pomocí ¹H NMR titrací.

Sekce : Technologie organických látek a chemických specialit

Vývoj metody pro stanovení rychlosti tvorby uhlíkatých úsad při pyrolýze uhlovodíkových surovin

Autor: Dominik Hasal
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Jan Patera, Ph.D.

Uhlíkaté úsady patří mezi nejvýznamnější vedlejší produkty ethylenové pyrolýzy. Tyto úsady nejsou významné z hlediska množství, ale jsou významné z hlediska funkce na celý proces. Ovlivňují výtěžky ostatních surovin, snižují reakční objem, zvyšují tlakové ztráty reakční směsi atd. Pro možnost komplexního hodnocení surovin byla snaha vyvinout aparát a metodiku pro hodnocení rychlosti tvorby uhlíkatých úsad, který by byl doplňkový k pyrolýzní plynové chromatografii, která uhlíkaté úsady nedetekuje. Podstatou navrženého aparátu je trubkový reaktor, který pracuje v kontinuálním režimu, a uhlíkaté úsady jsou stanovovány gravimetricky. Postupně byl optimalizován průtok nosného plynu, dávkování vzorku a vlastní podoba reaktoru. Jako reaktor byly používány různé modifikace křemenné trubice naplněné pilinami či cihličkami materiálu z pyrolýzní vlásenky nebo také ocelové trubice z žáruvzdorného materiálu. V průběhu postupné optimalizace procesu sice došlo k významnému zlepšení reprodukovatelnosti výsledků, avšak pro srovnání stejného typu suroviny ještě není reprodukovatelnost stále dostačující. Z toho důvodu stále probíhá další vývoj aparátu. Jednou z dalších variant je upuštění od kontinuálního dávkování vzorku a stanovení uhlíkatých úsad na základě jejich spalování dávkováním kyslíku a měření množství vzniklých oxidů uhlíku.

Sekce : Technologie organických látek a chemických specialit

Návrh, příprava a zakotvení rutheniových katalyzátorů pro anti-Markovnikovskou hydrataci terminální CC trojné vazby

Autor: Martin Kindl
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Jiří Vavřík, doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Hydratace terminálních alkynů na aldehyd, produkt odporující Markovnikovu pravidlu, se dá realizovat jedním reakčním krokem za nízkých reakčních podmínek s vysokou atomovou hospodárností při použití speciálních rutheniových katalyzátorů. Jejich častá nevýhoda je nestálost vůči vzdušné oxidaci a tím ztráta katalytické aktivity. Dosud nebyly publikovány žádné heterogenní katalyzátory umožňující tuto reakci. Zakotvení katalyzátoru umožní snadnou separaci katalyzátoru z reakční směsi a jeho opětovné použití. Předmětem této práce je návrh a příprava nového typu katalyzátoru s *N*-heterocyklickými karbenovými ligandy. Jejich výhodou je především vysoká stálost na vzduchu.

Sekce : Technologie organických látek a chemických specialit

Vývoj technologie nitrátu 2-ethylhexanolu

Autor: Bc. Daniel Kopecký
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: prof. Ing. Josef Pašek, DrSc.

Nitrát 2-ethylhexanolu (EHN) je významným aditivem do motorové nafty na zvýšení cetanového čísla. Efekt zvýšení cetanového čísla nastává již při nízkých koncentracích EHN v řádech desetin objemových procent. Účinek spočívá v urychlení iniciace hoření. Motory následně lépe startují, mají vyšší výkon a produkují méně spalin.

Nitrát se vyrábí esterifikací 2-ethylhexanolu nitrační směsí (HNO_3 a H_2SO_4) nebo samotnou kyselinou dusičnou. Návrh firmy Meissner počítá s esterifikací v adiabatickém reaktoru v rozmezí 30 – 50 °C. V našem kolektivu byla vyvinuta technologie s chlazeným míchaným průtočným reaktorem (CSTR), pracujícím v rozmezí 10 – 15 °C. Výhodou nízké kontrolované teploty je vysoká kvalita produktu a bezpečnější provoz. Při vývoji byl sestaven laboratorní model obsahující CSTR, post-reaktor s pístovým tokem, neutralizátor kyselého EHN a separátory. Byl sledován vliv přebytku HNO_3 na výkon reaktoru a vliv post-reaktoru na celkovou konverzi reakce. Dále byl zkoumán vliv podmínek reakce na vznik vedlejších produktů, především nitritu 2-ethylhexanolu vznikajícího redoxními reakcemi z kyseliny dusité. Optimalizací se podařilo nalézt podmínky potlačující vedlejší reakce a byl připraven produkt o čistotě 99,6 %, který splňoval požadované normy.

Sekce : Technologie organických látek a chemických specialit

Acylace benzaldehydu katalyzovaná funkcionalizovanými silikátovými částicemi

Autor: Klára Krupičková
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Eva Vrbková

Tato práce se zabývá přípravou mezoporézních silikátových částic se sférickou morfologií a průměrnou velikostí od 100 nm do 2 μm . Jako templát pro syntézu bylo použito činidlo n hexadecylamin.

Volné silanolové skupiny na povrchu silikátových částic byly dále modifikovány různými funkčními skupinami, což vedlo ke změně acidobazických vlastností původního materiálu. V tomto případě byly jako modifikátory použity látky (3-kyanopropyl)trichlorsilan a (3 merkaptopropyl)triethoxysilan. Kyano- a thiolová skupina byly následně převedeny na karboxy- a sulfoxy- skupinu, které byly poté využity pro kysele katalyzovanou reakci benzaldehydu a acetanhydridu.

Kondenzace byla optimalizována změnou některé z podmínek: množství a typu katalyzátoru, reakční teploty, použitého rozpouštědla. Byla sledována konverze benzaldehydu a selektivita na žádaný diacetát. Nejvyšší konverze (50 % po 24 hodinách, selektivita 78 %) bylo dosaženo při použití silikátových částic modifikovaných $-\text{SO}_3\text{H}$ skupinami, heptanu jako rozpouštědla a při teplotě 60 °C.

Sekce : Technologie organických látek a chemických specialit

Příprava citronellynitridu

Autor: Nikola Pilařová
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: prof. Ing. Libor Červený, DrSc.

Relativně nově využívanou skupinou vonných látek jsou nitrily, jejichž obliba v parfumářském průmyslu stoupá. Jejich výhodou oproti podobně vonícím analogickým aldehydům je větší stálost. Používají se v mýdlech, kosmetických přípravcích a detergentech. Nitrily se obecně vyrábějí z aldehydů, oximů, amidů, aminů nebo se nitrilová skupina generuje z kyanidu.

Ve snaze rozšířit portfolio společnosti Aroma a.s. se začíná na ÚOT řešit potenciální výroba citronellynitridu. Z dostupných literárních zdrojů byly vybrány dvě technologicky vhodné jednostupňové syntézy citronellynitridu z příslušného aldehydu – citronellalu. První možností je reakce citronellalu s hydroxylamin hydrochloridem v prostředí acetonitrilu při refluxu. Bylo zjištěno, že za těchto podmínek částečně probíhá cyklizace citronellalu a vzniká isopulegol. Hlavními produkty byly příslušný amid a oxim. Žádaný nitril vznikal v malém množství, které se po destilaci za sníženého tlaku zvýšilo. Druhou možností je amoxidace – reakce aldehydu s amoniakem a peroxidem vodíku v prostředí isopropylalkoholu, za současné katalýzy chloridem měďným, při laboratorní teplotě. U takto vedené reakce nedocházelo k cyklizaci výchozí látky a hlavními produkty byly příslušný amid a oxim. Žádaný nitril vznikal také v malém množství. Obě reakce budou nadále studovány s cílem zvýšit selektivitu k žádanému nitrilu.

Sekce : Technologie organických látek a chemických specialit

Čištění odpadních vod pomocí Fentonovy oxidace

Autor: Bc. Tomáš Sommer
Ročník: M2
Ústav: Organická technologie
Školitel: Eric Devos, MSc., Ing. Bart Vanmarcke, prof. Ing. Josef Pašek, DrSc.

Ve společnosti Taminco (Gent, Belgie) se při granulaci agrochemikálií mezi jednotlivými výrobními cykly vyplachují atomizéry vodou. Tyto odpadní vody nelze fyzikálně-chemicky zpracovávat jako ostatní vody z důvodu vysokého obsahu lignosulfonátů, jejichž přítomnost vadí fyzikálně-chemickému zpracování. Proto se odpadní voda shromažďuje a zpracovává externí společností, za jejíž služby Taminco musí platit. Pro výrazné snížení nákladů bylo rozhodnuto využít v současné době stále více se uplatňující Fentonovu oxidaci.

Principem této metody je reakce organické látky s peroxidem vodíku katalyzovaná ionty železa. Volné hydroxylové radikály napadají molekuly organického substrátu a ten se tak rozkládá na jednodušší, méně toxické látky. Cílem práce bylo vyzkoušet účinnost této metody na vzorcích odpadních vod z různých vyráběných produktů. Původní sirná sloučenina byla převedena na volný CS_2 a jeho obsah chromatograficky stanoven.

Výsledky ukazují, že Fentonova oxidace je slibnou variantou pro zpracování výše uvedených odpadních vod. Bylo dosaženo poklesu koncentrace CS_2 až o 99,3 %. Iniciací vzniku hydroxylových radikálů by bylo možné místo peroxidem vodíku provést elektrolyticky. Tímto směrem se výzkum dále ubírá.

Sekce : Technologie organických látek a chemické speciality

Selektivní N-methylace toluidinů

Autor: Jakub Bumba
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: doc. Ing. Bohumír Dvořák, CSc.

Toluidiny (amino-1-methylbenzeny) jsou aromatické aminy, které jsou využitelné jako aditiva do motorového benzínu za účelem zvýšení jeho oktanového čísla (OČ). Jako disubstituované sloučeniny se vyskytují ve třech polohových izomerních strukturách: *ortho*, *meta* a *para*. V průmyslovém měřítku se vyrábějí z odpovídajících mononitroderivátů redukcí. Z analogie k N-methylanilinu je možné očekávat, že také N-methylace toluidinů povede ke zvýšení jejich oktanového čísla. Reakce N-methylace toluidinu je, v závislosti na použitém alkylačním činidle, slabě exotermická reakce. Reakci nejčastěji urychlují katalyzátory na bázi mědi dispergované na γ -Al₂O₃ a promotované řadou kovových oxidů. Selektivita užitého katalyzátoru je jeho důležitou vlastností, neboť N,N-dimethylderivát je zcela neúčinný jako posilovač OČ a jeho separace z reakční směsi je energeticky velmi náročná. Měďná složka také účinně katalyzuje rozklad methanolu a je proto příčinou ztrát této suroviny. V práci bylo využito zkušeností ze studia N-methylace anilinu, zakončené návrhem jeho technologie. Cílem této práce bylo zhodnotit a porovnat reaktivitu N-methylace toluidinů vůči anilinu. Dále pak určit reaktivitu jednotlivých izomerních struktur toluidinu a následně zhodnotit vliv polohy methylové skupiny na selektivitu N-methylace toluidinů vztaženou k tvorbě N,N-dialkylderivátů.

Sekce : Technologie organických látek a chemických specialit

Charakterizace kompozitních membrán pomocí kombinovaného iontového a elektronového mikroskopu

Autor: Petra Diblíková
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: doc. Pavel Čapek, CSc.; Ing. Martin Veselý

Jednou z nejrychleji se rozvíjejících oblastí membránových technologií je separace směsí plynů za použití kompozitních membrán (KM). Využití KM umožňuje zvýšit propustnost pro plyny a páry organických látek při zachování dobré selektivity separace, mechanické pevnosti a časové stability odpovídající čistým polymerním membránám. Jednou ze slibných materiálových formulací je užití částic silikalitu-1 rovnoměrně dispergovaného v polyimidové matici. V práci byly studovány čtyři vzorky KM s různými hm. zlomky silikalitu-1 s cílem získat fázovou funkci popisující prostorové rozložení jednotlivých fází. Jeho znalost je nezbytná pro předpověď transportních a mechanických vlastností membrány. Také slouží jako zpětná vazba pro syntézu KM. Třírozměrná fázová funkce, která popisuje strukturu KM, byla získána pomocí sériové tomografie s užitím duálního elektronového a iontového mikroskopu. Následnou úpravou primárních dat zahrnujících filtraci a segmentaci byla získána třírozměrná mikrostruktura s rozlišením 30 nm. Všechny KM byly rovněž charakterizovány v 2D prostoru snímkováním nábrusů membrán, čímž byla získána data pro alternativní rekonstrukční metody. Práce ukazuje postupné kroky nutné k získání věrohodné repliky vícefázového heterogenního materiálu.

Sekce : Technologie organických látek a chemických specialit

Příprava hexylcinnamaldehydu

Autor: Karlíčková Adéla
Ročník: B3
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Eliška Vyskočilová, Ph.D.

Práce se zabývá přípravou vonné látky (2*E*)-2-benzylidenoktanal, známou pod názvem hexylcinnamaldehyd. 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 vzniku polymerů. Jako bazické katalyzátory byly použity KOH nebo NaOH rozpuštěné ve vodě, methanolu, popřípadě ethylenglykolu. 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 a poměru reaktantů na výtěžek žádaného produktu. Při použití 30% vodného roztoku NaOH (mol. poměry: katalyzátor : benzaldehyd = 0,8:1; rozpouštědlo CH₃OH : benzaldehyd = 1:0,1; benzaldehyd : oktanal = 1,415:1) byl získán výtěžek 72% hexylcinnamaldehydu.

Sekce : Technologie organických látek a chemických specialit

Optimalizace přípravy Florosy pomocí faktorového plánování

Autor: Marika Krátká
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Eliška Vyskočilová, Ph.D.

Vonné látky byly známy již několik tisíciletí před naším letopočtem, v dnešní době jsou vyráběny synteticky a jejich příprava je velice žádaná v mnoha odvětvích chemie či parfumérském průmyslu. Mezi vonné látky patří také Florosa (2-isobutyl-4-methyl-tetrahydro-4*H*-pyran-4-ol), která je charakteristická svou květinovou vůní připomínající konvalinku. Cílem práce je optimalizace syntézy této látky, která by mohla být v budoucnu využita ve firmě Aroma a.s. Florosa se připravuje tzv. Prinsovou kondenzací z isoprenolu a isovaleraldehydu za přítomnosti kyselého katalyzátoru Amberlyst 15. Vedlejšími produkty jsou dihydropyrany, které mohou vznikat dehydratací žádané látky. Byla prováděna optimalizace podmínek syntézy Florosy pomocí metody faktorového plánování. Byl sledován vliv teploty, poměru navážek reakčních komponent, množství navážek katalyzátoru a přídavku vody pro dosažení co nejvyšší selektivity k žádané látce. Výsledky byly vyhodnoceny v programu Statistica 10 Cz. Bylo zjištěno, že nejvyšší selektivity 81 % bylo dosaženo za teploty 30 °C, 10 mol. % přídavku vody, 5 hm. % přídavku katalyzátoru a poměru reakčních komponent 1:2 (isoprenol:isovaleraldehyd).

Sekce : Technologie organických látek a chemických specialit

Acylace kumenu acetanhydridem:příprava 4-isopropylacetofenonu

Autor: Lucie Václavíková
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Eliška Vyskočilová, Ph.D.

Tato práce se zabývá přípravou 4-isopropylacetofenonu (kuminonu), který je meziproduktem pro přípravu velmi žádané vonné látky Mugetanolu (1-(4-isopropylcyklohexyl)etanolu). Mugetanol se vyznačuje konvalinkovou vůní a je využíván především v parfumářském průmyslu. 4-Isopropylacetofenon vzniká Friedelovou-Craftsovou acylací kumenu acetanhydridem nebo acetylchloridem, s použitím Lewisových kyselin.

Jako katalyzátor byl pro všechna měření volen AlCl_3 . Byl sledován vliv teploty a poměr složení výchozích látek. Vzhledem k tomu, že Lewisovy kyseliny, a tedy i použitý AlCl_3 , jsou v přítomnosti vody deaktivovány, bylo nutné výchozí látky před samotným měřením přdestilovat. Měření probíhala v přebytku kumenu, který sloužil zároveň jako rozpouštědlo. Bylo zjištěno, že nejvyššího výtěžku (75 %) bylo dosaženo při použití molárního poměru acetanhydrid:katalyzátor 1:1, při teplotě kolem 0 °C a poměru reaktantů 7:1. Vyšší teploty měly nepříznivý vliv na výtěžek reakce.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Syntéza prekurzorů heterogenních katalyzátorů pro asymetrickou hydrogenaci

Autor: Jaroslav Aubrecht
Ročník: B3
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Beáta Vilhanová, doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Ukotvení (imobilizace) homogenních katalyzátorů na pevný nosič je jedním z hlavních témat současné katalýzy. Umožňuje oddělení katalyzátorů z reakční směsi a jejich opětovné použití (recyklaci). To se týká i chirálních rutheniových katalyzátorů $[\text{Ru}(\eta^6\text{-aren})(\text{N-sulfonyldiamin})]$ používaných v asymetrické transfer hydrogenaci iminů. Existuje řada příkladů ukotvení těchto komplexů, avšak téměř všechny spočívají ve vazbě nosiče a diaminového ligandu. Cílem této práce je vyvinout nový způsob imobilizace katalyzátorů přes $\eta^6\text{-aren}$. Principem ukotvení je reakce typu $\text{S}_{\text{N}}2$ mezi katalyzátorem nesoucí 4-hydroxybutylový fragment na $\eta^6\text{-arenu}$ a silikáty (MCM-41 a SBA-15) obsahujícími 3-jodpropylovou skupinu. Katalyzátor také obsahuje aminovou skupinu, která může podobně reagovat s nosičem, a proto je nutné ji ochránit.

V první fázi byly připraveny materiály MCM-41 a SBA-15 a charakterizovány pomocí RTG difrakce a fyzisorpce dusíku při 77 K, jež poskytla informaci o specifickém povrchu a velikosti pórů. Materiály byly funkcionalizovány 3-jodpropyltrimethoxysilanem a obsah jódu byl stanoven elementární analýzou. Dále byla vyvinuta metoda pro ochránění a odchránění aminové skupiny 9-fluorenylmethoxykarbonylem (Fmoc). Ochráněný ligand i katalyzátor byly charakterizovány pomocí hmotnostní spektrometrie s vysokým rozlišením a NMR spektroskopie.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Optimalizace podmínek pro stereoselektivní hydrogenaci strukturně odlišných iminů

Autor: Alena Budinská
Ročník: B1
Ústav: Organické technologie
Školitel: doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Asymetrická transfer hydrogenace iminů (dihydroisochinolinů) je jedním z efektivních způsobů přípravy chirálních aminů, které nacházejí uplatnění především ve farmaceutickém průmyslu. Reakce probíhá za mírných reakčních podmínek s využitím polosendvičových katalyzátorů $[\text{RuCl}(\eta^6\text{-p-cymen})\text{TsDPEN}]$ (TsDPEN = N-tosyl-1,2-difenylethylendiamin) a jako zdroj vodíku slouží směs kyseliny mravenčí a triethylaminu.

V první části se práce věnuje několika reakčním podmínkám při hydrogenaci 1-methyl-3,4-dihydroisochinolinu. Byl zkoumán vliv teploty, poměru hydrogenační směsi k substrátu a pořadí přidávání jednotlivých komponent s cílem najít jejich vhodnou kombinaci tak, aby reakce probíhala co nejrychleji a s co největším výtěžkem požadovaného izomeru.

Pokud se však methylová skupina v poloze 1 nahradí arylem, stává se katalytický komplex prakticky nereaktivní. Proto se druhá část práce zabývá studiem katalytického systému, který bude schopen hydrogenovat i tyto iminy. Byly testovány různé parametry a podařilo se nalézt vhodné optimum, s jehož využitím je možné dosáhnout vysoké reakční rychlosti i enantioselektivity při hydrogenaci těchto jinak velmi málo reaktivních substrátů.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Vývoj sensoru pro online monitorování účinnosti VPHP procesu

Autor: Bc. Eva Čermáková
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Jiří Kovářík, doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

VPHP (Vapour Phase Hydrogen Peroxide) proces je rozšířenou metodou pro bio-dekontaminaci a sterilizaci izolátorů ve farmaceutickém průmyslu či výrobních linek v potravinářství a sterilizaci nemocničních prostor. Pro kontrolu úspěšnosti sterilizace se využívají bioindikátory, jejichž nevýhodou je dlouhá doba kultivace (typicky 7 dní). Používají se také chemické indikátory, ty však slouží pouze pro ověření expozice sterilizačnímu prostředí a vyhodnocení probíhá pouze orientačně vizuálně. Naší snahou bylo vyvinout senzor na bázi chemického indikátoru, který by umožňoval průběžné sledování a vyhodnocování účinnosti sterilizace a byl tak schopen nahradit stávající bioindikátory. Zvolili jsme koncept barevného chemického indikátoru na nosiči z celulózy a pro vyhodnocování vzorků jsme použili kolorimetrii. Anilinová modř byla zvolena pro svou citlivost obecně na oxidační prostředí a tedy reagující již s molekulárním peroxidem vodíku. Byl vyvinut spolehlivý způsob přípravy vzorků a otestovány různé koncentrace anilinové modři při různých reakčních podmínkách. Anilinová modř se během experimentů plynule a konzistentně odfarbuje a změny jsou snadno pozorovatelné. Vzniklé křivky jsou zároveň natolik jednoduché, aby umožnily budoucí matematickou korelaci s bioindikátory, čímž potvrzují výrazný potenciál anilinové modři pro online monitorování.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Studium mechanismu účinku transdermálního urychlovače absorpce L-Pro2 na molekulární úrovni

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

Transdermální podání léčiv má mnoho výhod oproti jiným běžným způsobům podávání, jako je například obejití prvního průchodu jater. Hlavním problémem transdermálního podání léčiva je překonání extrémně nepropustné nejsvrchnější části kůže – *stratum corneum*. Permeační urychlovače dokážou reverzibilně oslabit kožní bariéru a umožnit tak průnik léčiva do systémového oběhu. L-Pro2 (dodecylester (S)-N-acetylprolin) je velmi účinný urychlovač, který má předpoklady k potenciálnímu klinickému použití. Cílem této práce je objasnění mechanismu urychlovacího účinku L-Pro2. Připravili jsme modelové membrány obsahující různé typy ceramidů, kyselinu stearovou a cholesterol, které napodobují složení membrán *stratum corneum*. Do těchto membrán byly zavedeny různé koncentrace L-Pro2. Pomocí infračervené spektroskopie a rentgenové difrakce jsme sledovali změny vlastností membrány a mezimolekulárních interakcí vyvolaných L-Pro2. Z výsledků měření lze usoudit, že L-Pro2 zvyšuje schopnost hydratace membrán, dokáže vyvolat fázovou separaci mezi lipidy a fluidizovat lipidové řetězce. Tyto závěry objasňují mechanismus účinku L-Pro2.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Syntéza (a vlastnosti) vysoce aktivních rutheniových katalyzátorů

Autor: Leoš Kořený
Ročník: B3
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Jan Pecháček

Redukce karbonylových skupin na hydroxylové patří mezi jedny z nejběžnějších chemických reakcí v chemickém i farmaceutickém průmyslu. Lze je provádět pomocí redukčního činidla (komplexní hydridy např. LAH, Red-Al), či katalytickou hydrogenací. Pro průmyslové využití je vhodnější reakce s použitím katalyzátoru.

Je známo, že rutheniové komplexy mohou sloužit jako homogenní katalyzátory transfer hydrogenace karbonylových sloučenin. Jejich hlavní výhodou je velmi vysoká aktivita (TOF až 1 000 000/hod v případě moderních komplexů) a prakticky úplná selektivita.

Předmětem předkládané práce je syntéza nového rutheniového komplexu s ligandem modifikovaným tak, aby bylo dosaženo velmi vysoké aktivity, jakož i charakterizace a reakční testování nového katalyzátoru.

Získaný katalyzátor pak bude využit ke zkoumání mechanismu jeho působení. Do budoucna je plánována i snaha o zabudování katalyzátoru do struktur materiálu typu MOF.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Vliv excipientů a materiálů na čistitelnost farmaceutických zařízení

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

U excipientů je obvyklé hodnotit zejména ty vlastnosti, které jsou spojené s jejich požadovanou funkcí v léčivu a při jeho výrobě. Z výrobního hlediska však může být podstatný i jejich vliv na (ne)efektivitu čistícího procesu farmaceutického zařízení.

Tato práce sleduje, jaký vliv mají excipienty na čistitelnost farmaceutického zařízení. Jako čistěný materiál jsou použity skleněné kuličky, které jsou kontaminovány léčivou látkou (paracetamol, ibuprofen) a excipientem nebo směsí dvou excipientů. Všechna měření byla provedena stejným způsobem. V určitých časových intervalech byla měřena hmotnostní koncentrace API v mycí vodě, která protékala průtočnou celou, v níž byly kontaminované kuličky umístěny. Následně byla stanovena zbytková hmotnostní koncentrace extrakcí kuliček do methanolu. Z naměřených dat byla vypočítána specifická rychlost vymývání, která sloužila k porovnání kinetiky čištění u všech měření. Z časového profilu specifické rychlosti byly zjištěny hodnoty parametrů vyjadřujících rychlost eroze kontaminovaných částic z povrchu kuliček a limitní hodnotu specifické rychlosti vymývání, při níž dochází pouze k rozpouštění a vyluhování API do mycí kapaliny. Ze získaných parametrů bylo zjištěno, že vliv na čistitelnost má rozpustnost jak léčivé látky, tak i rozpustnost, hydrofilita, bobtnavost i další vlastnosti excipientu.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Vliv sulfonamidového ligandu Noyoriho Ru(II) katalyzátoru na asymetrickou transfer hydrogenaci vazby C=N

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

Enantioselektivní příprava různě substituovaných tetrahydroisochinolinů je jedním z klíčových kroků syntézy svalových relaxancií jako jsou například Mivacurium nebo Atracurium. Tento typ reakce se nazývá asymetrická transfer hydrogenace (ATH), jejíž správný průběh je podmíněn přítomností katalytického systému ať již na bázi ruthenia, či jiného kovu. Objev Noyoriho rutheniových katalyzátorů typu $[\text{RuCl}(\text{aryl/alkylsulfonylDPEN})(\eta^6\text{-}p\text{-cymen})]$, kde DPEN = 1,2-difenylethylendiamin, znamenal ve druhé polovině 90. let 20. století velký průlom na poli homogenních katalyzátorů určených pro ATH.

Samotný katalyzátor je složen ze dvou částí, tou první je chirální sulfonamidový ligand, jenž napomáhá determinaci chiralit u produktů. Druhou částí je pak $\eta^6\text{-}p\text{-cymen}$ koordinovaný k atomu ruthenia, jenž je zodpovědný za samotný chirální průběh reakce.

Smyslem této práce bylo objasnění vlivu různě substituovaných sulfonamidových ligandů, zabudovaných do struktury katalyzátoru, na průběh ATH prochirálních substituovaných 1-methyl-3,4-dihydroisochinolinů. Katalyzátory byly porovnány na základě frekvence reakčních obrátů (TOF) a enantioselektivity (ee). Výsledky kinetické studie byly porovnány s poznatky získanými v průběhu teoretických výpočtů prováděných v programovém balíku Gaussian09.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Molekulární mapování průběhu mozkové ischemie metodou LC-MS

Autor: Miloš Mikoška
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Kamila Syslová; doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Hektické životní tempo spolu s kontroverzní životosprávou dnes vytvářejí prostor pro vznik a rozvoj civilizačních nemocí, jejichž léčba či dokonce včasná diagnóza není uspokojivě vyřešena. Incidence mozkové ischemie (mrtvice) nedosahuje takových čísel jako např. rakovina či diabetes mellitus, avšak důsledky tohoto náhlého selhání jsou dalekosáhlé či přímo fatální. Ideální nástroj pro online monitoring průběhu ischemické mozkové příhody představuje metoda mikrodialýzy, kdy odběr mikrodialyzátů v reálném čase po ischemii indukované aplikací endothelinu-1 vytváří cennou matici pro monitorování metabolických změn koncentrací aminokyselin, neurotransmiterů a jiných metabolitů. Vzhledem k povaze matrice samotné analýze předchází derivatizace stanovovaných látek za účelem snížení LOD a LOQ a umožnění chromatografické separace (včetně chirální derivatizace pro oddělení isomerů aminokyselin). Separace je prováděna pomocí vysokoúčinné kapalinové chromatografie, detekci zajišťuje hmotnostní spektrometr s vysokým rozlišením, kde touto kaskádou je zajištěna vynikající citlivost, reprodukovatelnost a robustnost analýz. Závěry z provedené práce mohou mít význam nejen pro včasnou diagnózu, ale i terapii a rekonvalescenci po prodělané mozkové ischemii.

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 přehřevem 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

Hodnocení lisovatelnosti farmaceutických formulací pomocí Heckelova diagramu

Autor: Anna Procházková
Ročník: B3
Ústav: Organické technologie
Školitel: doc. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.

Trh řady generických léčiv je v současnosti velmi konkurenční a objevuje se v tomto oboru dříve nebývalý tlak na snižování výrobních nákladů. Jedním z populárních opatření k dosažení tohoto cíle je náhrada poměrně nákladné přípravy tabletoviny vlhkou granulací, alternativními aglomeračními technologiemi, jako je například kompaktace. Při optimalizaci těchto aglomeračních technologií je důležité dosáhnout dobré lisovatelnosti produktu. Vzhledem k tomu, že hodnocení lisovatelnosti analýzou tabletovacího procesu je poměrně zdouhavé, zaměřuje se tato práce na hodnocení lisovatelnosti podle analýzy Heckelova diagramu. Modelové formulace jsou založeny na paracetamolu, který vykazuje velmi špatnou lisovatelnost, a zahrnují prášky, granuláty i briketáže s různými pomocnými látkami.

Byla vyvinuta metodika měření na laboratorním lisu a pro uvedené formulace byly naměřeny záznamy vztahu síly a dráhy během tabletovacího procesu, které umožnily porovnat plasticitu, stlačitelnost a lisovatelnost formulací. Naměřená data byla následně popsána pomocí Heckelovy rovnice. Bylo zjištěno, že přidavek vhodných pojiv do kompaktačního procesu přibližuje lisovací vlastnosti produktu běžnému granulátu a představuje tak nadějnou cestu pro eliminaci potřeby vlhké granulace ve výrobním procesu.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Studium vlivu povrchových vlastností farmaceutických materiálů na segregáční chování směsí

Autor: Bc. Tereza Školáková
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Jan Patera, Ph.D.

Ve farmaceutickém průmyslu je většina účinných látek a excipientů v podobě sypkých hmot. Jedná se tedy o práci s reologickými systémy, u kterých ještě nelze zcela předpovědět jejich chování při následné manipulaci. Jedním z potenciálních problémů je segregace, která způsobuje oddělování složek, a tak narušuje jednotnost směsi. Oddělování částic je především způsobeno odlišnými vlastnostmi použitých práškových materiálů.

Práce byla zaměřena na studium vlivů povrchových vlastností dvou modelových granulátů, kofeinu a paracetamolu, na adhezi jednotlivých složek při jejich mísení a segregaci látek z připravených homogenizovaných směsí. Pozornost byla zaměřena především na segregaci způsobenou odlišnou velikostí granulí. Cílem bylo také zhodnocení vlivu změny v povrchových vlastnostech. Pro charakteristiku povrchových vlastností látek a jejich změn byla použita inverzní plynová chromatografie.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Testování prototypu nového typu senzoru pro měření par peroxidu vodíku

Autor: Bc. Jan Tomas
Ročník: M1
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Jiří Kovářík, doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Ve VPHP (Vapour Phase Hydrogen Peroxide) aplikacích je z hlediska regulace, schvalování, standardizace a validace velmi důležité přesné a spolehlivé měření koncentrací par H_2O_2 v dekontaminační atmosféře. V současnosti známé a používané metody detekce VPHP využívají elektrochemických senzorů, fluorescence, NIR spektroskopie, či jsou založeny na enzymatických reakcích. Tyto metody nejsou schopny kombinovat detekci ve velkých prostorech a vysokých koncentracích a zároveň detekci nízkých koncentrací VPHP vlivem proudění vzduchu nebo nízké citlivosti. Principem testovaného senzoru je měření indukovaného napětí vzniklého rozkladem H_2O_2 na elektrodovém článku. Konstrukce testovaného senzoru byla volena tak aby bylo docíleno jeho robustnosti, snadné obsluhy a nejvyšší možné životnosti senzoru. Byla sestavena kalibrace s minimálním vlivem jiných látek přítomných v měřené atmosféře, zjištěn minimální a maximální rozsah testovaného senzoru a provedeno testování spolehlivosti při dlouhodobém měření v simulovaných podmínkách dekontaminačních cyklů prováděných v praxi.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Potlačení segregace směsi pro přímé lisování tablet předkompaktací

Autor: Kateřina Zelenková
Ročník: B3
Ústav: Organické technologie
Školitel: doc. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.

Segregace neboli česky rozduřování je velkým problémem při výrobě pevných lékových forem. Částice již promíchané, zhomogenizované směsi se mohou opět začít oddělovat, tj. segregovat. K segregaci dochází z mnoha různých příčin, např. vlivem různých tvarů, rozdílné hustoty či velikosti jednotlivých částic nebo i různým poměrem API a excipientů. Cílem práce bylo zjistit příčiny segregace a navrhnout zlepšení segregálního chování u konkrétní formulace pro přímé lisování tablet, bez toho, aby došlo ke změně složení přípravku. Segregačními testy bylo zjištěno, že míra segregace roste s časovou prodlevou mezi homogenizací a lisováním tablet. S provedenou síťovou analýzou je spojena změna tokových vlastností směsi a samovolná tvorba agregátů. Pro potlačení segregace bylo navrženo zkompaktovat API s částí monohydrátu laktosy a tento meziprodukt použít v další výrobě. Segregační testy prokázaly, že zařazení kompaktace snižuje absolutní hodnotu segregálního koeficientu, tedy snižuje tendenci směsi segregovat. Důvodem je pravděpodobně začlenění API do stabilních aglomerátů s nižším sklonem k další agregaci.

Sekce : Výroba léčiv

Optimalizace formulace lipofilních matricových tablet s prodlouženým uvolňováním

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

Práce je zaměřena na nalezení vhodného retardačního ekvivalentu u testovaného léčivého přípravku, který je podáván ve formě tablet s prodlouženým uvolňováním. Jako retardační složka je v současné době používán montanní vosk, který je přírodního původu, což má za následek určitou variabilitu jeho vlastností, a tedy i variabilitu šarží léčivého přípravku.

Byl proto testován montanní vosk od jiného výrobce spolu s dalšími vybranými vosky (stearamidový, ethylen-bis-stearamidový a karnaubský vosk). Tyto vosky byly porovnávány v laboratorním měřítku a dále byl sledován vliv nastavených parametrů sušení granulátu na vlastnosti jader tablet. U každé připravené šarže byly ověřovány vybrané vlastnosti tabletoviny, jader tablet a disoluční profil. Dále bylo sledováno chování vosků v průběhu sušení a taktéž byl měřen charakter pórovitosti zbytkových lipofilních matic po disoluci.

Na základě získaných výsledků byl jako vhodný retardační ekvivalent doporučen ethylen-bis-stearamidový vosk, který má nejmenší částice a tablety z něj připravené měly nejmenší objemový medián poloměru pórů, což mělo za následek pomalejší uvolňování léčivé látky - toto je u tablet s prodlouženým uvolňováním žádoucí.

Sekce : Výroba léčiv

Extrakce složek léčivých rostlin oxidem uhličitým za superkritických podmínek

Autor: Viktorija Baškatova
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: prof. Ing. Jiří Hanika, DrSc., Ing. Marie Sajfrtová, Ph.D.

Superkritická extrakce (SFE) je separační metoda, ve které se jako rozpouštědlo používá tekutina, která po překročení určitého tlaku a teploty, tak se dostane do superkritického stavu. V tomto bodě dochází k zániku společné existence kapalně a plynné fáze za vzniku fáze jedné, superkritické. SFE je šetrná k životnímu prostředí, protože užívá buď malých, nebo žádných přísad organických rozpouštědel, zatímco typická extrakční metoda vyžaduje desítky až stovky mililitrů. Superkritická extrakce (SFE) se obvykle provádí při relativně nízkých teplotách, proto se využívá jako ideální technika pro tepelně labilní sloučeniny (například při hydrolýze zázvoru dochází k degradaci extrahovatelných látek).

Cílem práce bylo použít tuto metodu pro zjištění průběhu extrakce silice ze sušeného materiálu zavinutky podvojně (*Monarda didyma*) a zavinutky trubkovité (*Monarda fistulosa*) se zaměřením především na jejich hlavní složku, thymochinon. Byl sledován vliv podmínek (teplota 40 – 60 °C, tlak 9 – 30 MPa) na výtěžek a koncentraci thymochinonu v extraktu. Nejvyšší výtěžek extraktu u obou rostlin byl dosažen při vysokém tlaku a nízké teplotě (30 MPa, 40 °C). Nicméně při těchto podmínkách byla nízká koncentrace sledované látky. S ohledem na dosažení vysoké koncentrace a výtěžku byly nejlépe vyhovující podmínky extrakce 12 MPa a 40 °C.

Sekce : Výroba léčiv

Zjišťování původu biologicky aktivních látek

Autor: Tomáš Koutný
Ročník: M2
Ústav: Organické Technologie
Školitel: doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Zjišťování původu biologicky aktivních látek se využívá pro určení geografického původu látek a distribučních cest (určení původu látky v rámci distribuční sítě). Obdržená data se využívají pro potlačování organizovaného zločinu, trhu s narkotiky. K určení geografického původu se užívá hlavně analýz izotopových poměrů a obsahu alkaloidů (hlavně pomocí GC-MS), či kombinace těchto metod.

Práce se zaměřuje na možnost využití analytických metod a metod zpracování dat pro určení původu ilicitních látek, ať už geografického či v rámci distribuční sítě, porovnáváním se vzorky o známém původu. Navíc poskytuje informace o možných úpravách látek (užití rozpouštědel, adulterantů). Metody HPLC-MS, NMR, IR a Ramanovy spektrometrie, headspace plynové chromatografie, rentgenové difrakce, rentgenové fluorescenční analýzy byly ozkoušeny na vzorcích kokainu poskytnutých Kriminalistickým ústavem Praha. Jádrem práce tvořily analýzy HPLC-MS a NMR, jelikož poskytovaly nejžítelnější údaje. Byla vytvořena HPLC-MS gradientová metoda. Data získaná pomocí HPLC-MS byla zpracována užitím lineární diskriminanční analýzy (LDA) a analýzy hlavních komponent (PCA). Získaná zpracovaná data byla použita pro profilaci a porovnání vzorků.

Sekce : Výroba léčiv

Optimalizace materiálových ztrát ve farmaceutické výrobě tekutých lékových forem

Autor: Jitka Kulhavá
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Petr Durdil, CSc.

Cílem práce je studium zdrojů materiálových ztrát ve výrobě injekčních přípravků během technologických procesů, jejich analýza a návrh na snížení ztrát meziprojektu.

Základními technologickými procesy jsou příprava injekčního roztoku, sterilizační filtrace a plnění roztoku do ampulí. Na začátku každé výrobní šarže se vždy odebírá a vyřazuje určité množství ampulí, které je stanoveno pro každý objem ampule na základě zkoušek. Důvodem tohoto tzv. povinného výřadu je nižší koncentrace jednotlivých účinných látek na počátku plnění. Práce je zaměřena na stanovení závislosti koncentrace účinných látek vzhledem k objemu roztoku, který byl naplněn. Předpokládá se, že počáteční nižší koncentrace je způsobena především vlivem zbytkové vlhkosti zařízení po mytí a sterilizaci a dalšími faktory, například sterilizační filtrací. V práci bude diskutován průběh nárůstu koncentrací účinných látek pro různé produkty, jejichž technologie se liší.

Sekce : Výroba léčiv

Vývoj nástroje pro včasnou detekci rakoviny urogenitálního traktu

Autor: Bc. Michala Moučková

Ročník: M2

Ústav: Organické technologie

Školitel: doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D., Ing. Kamila Syslová, Ing. Aram Zolal

Rakovina urogenitálního traktu (vaječníků, prostaty a močového měchýře) je dlouhou dobu asymptomatická a proto její odhalení bývá v 80 % případů až v pozdním stádiu nemoci, kdy mortalita pacientů bývá vysoká. Cílem této práce je vyvinout jednoduchý diagnostický prostředek (diagnostický proužek) pracující na principu Lateral Flow ImmunoAssay (LFIA) pro včasnou diagnostiku těchto onemocnění. Předpokladem je, že rakovinné markery jsou obsaženy v moči, jakožto snadno odejíratelné a méně komplexní matrici než krevní plazma. Prvním úkolem je vytipovat biomarkery co nejvíce specifické pro daný typ rakoviny, druhým úkolem sestavit diagnostický proužek tak, aby bylo dosaženo spolehlivé detekce daných biomarkerů v moči. Je nezbytné dosáhnout 100 % kompatibility všech částí testu tak, aby odpovídaly typu matrice, pro který jsou určeny. Tento orientační test by mohl pomoci především pacientům rizikových skupin k včasnému odhalení raných stádiích onemocnění, kdy je prognóza úspěšnosti léčby podstatně vyšší.

Sekce : Výroba léčiv

Role bismutu v katalyzátoru pro výrobu 1,4-butyndiolu

Autor: Jana Mrozková

Ročník: M2

Ústav: Organické technologie

Školitel: doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Prezentovaná práce je zaměřena na přípravu katalyzátoru na bázi mědi s příměsí bismutu, který se používá na výrobu 1,4-butyndiolu reakcí formaldehydu s acetylenem (Reppeho proces). 1,4-butyndiol je prekurzorem dalších komerčně významných látek. Jeho převážná většina je hydrogenována na 1,4-butandiol, ze kterého může být připraven např. tetrahydrofuran.

Vedlejší reakcí při syntéze 1,4-butandiolu je polymerizace acetylenu na tzv. kupren, která je katalyzována mědí. Vzniklý polymer je nežádoucí, protože blokuje aktivní místa katalyzátoru. S přibývajícím polymerem se snižuje aktivita katalyzátoru až do bodu, kdy je třeba ho vyměnit. Zde je klíčová úloha bismutu, který částečně zabraňuje tvorbě polymeru. Obsahem této práce bylo prozkoumat vliv množství bismutu na funkci katalyzátoru. Za shodných podmínek byly připraveny katalyzátory s různým obsahem bismutu (0 – 6%) a každý z nich byl následně otestován v pěti navazujících reakcích za účelem vyhodnocení deaktivace katalyzátoru. Po páté provedené reakci byl katalyzátor oddělen od reakční směsi a pomocí termogravimetrie byl vyhodnocen obsah vytvořeného polymeru.

Sekce : Výroba léčiv

Funkcionalizace η^6 -ligandu polosendvičových komplexů: **úloha při imobilizaci Noyoriho komplexů,** **zobecnění koncepce**

Autor: Bc. Petr Šot
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: doc. Ing. Petr Kačer, PhD.

Heterogenizace organokovových komplexů představuje značně komplikovanou a intenzivně studovanou problematiku v rámci katalýzy. Tato práce se zabývá primárně Noyoriho rutheniovými komplexy s obecnou strukturou $[\text{RuCl}(\text{N-arylsulfonyl-difenylethylendiamin})(\eta^6\text{-aren})]$, které jsou známé pro svoji schopnost enantioselektivně hydrogenovat prochirální ketony a iminy pomocí přenosu vodíku (tzv. transfer hydrogenace), a se snaží rozvést poměrně ojedinělou koncepci imobilizace pomocí přípravy funkcionalizovaného η^6 -ligandu pro následné ukotvení na pevný nosič.

Přednáška je zaměřena zejména na organickou syntézu a testování homogenních analogů připravených komplexů. V práci je dále zdůrazněna možnost zobecnění vypracované koncepce pro jiné polosendvičové katalyzátory a pomocí výpočetních metod na bázi DFT jsou analyzovány základní aspekty asociované s funkcionalizací η^6 -ligandu či případnými interakcemi s nosičem.

Sekce : Výroba léčiv

Validace čištění geometricky složitých částí farmaceutického **výrobního zařízení**

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

Práce se zabývá čistitelností rotačního kartáče adjustační linky od reziduí zpracovávané léčivé látky. Kartáč je příkladem tvarově komplikované části, u jakých se v současnosti validace čištění neprovádí a problém se řeší výhradním použitím takových součástí pro jediný výrobek.

V minulosti byla nalezena vhodná kombinovaná metoda k určení zbytkové kontaminace po čistícím procesu, která byla testována na modelové léčivé látce - paracetamolu. Cílem práce bylo ověřit platnost nalezené metody i pro další účinné látky (ibuprofen a alprazolam) a aplikovat metodu do praxe. Laboratorní měření bylo prováděno na vzorcích kartáče, které byly reprezentativní s ohledem na přítomnost různě dostupných povrchů. Vzorek byl vždy vystaven modelové kontaminaci a mytí, načež byl podroben sekvenci tří extrakčních kroků pro získání analytického vzorku – celkové extrakci, cílenému vzorkování kavit a destruktivní extrakci. Ke stanovení obsahu kontaminantu v extraktech byla použita HPLC.

Funkčnost navržené metody byla kromě paracetamolu potvrzena i pro ibuprofen a alprazolam. Pro každou látku byl stanoven jiný faktor výtěžnosti druhého kroku kombinované metody. Pomocí této nedestruktivní metody bylo možné stanovit celkovou kontaminaci kartáče. Tato metoda byla využita při hodnocení testovacího provozu ultrazvukové myčky.

Sekce : Výroba léčiv

Vliv vlastností částic na charakter a měřítko homogenity farmaceutické směsi

Autor: Diem Trang Tran
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: doc. Ing. Petr Zámotný, Ph.D

Vlastnosti a interakce mezi částicemi ovlivňují dosažitelnou homogenitu a charakter práškových směsí pro přímé lisování tablet. Cílem této práce bylo u modelové směsi prostudovat vliv vlastností částic složek na makrohomogenitu a mikrohomogenitu vznikající směsi a pokusit se optimalizovat parametry částic složek pro dosažení co nejnižšího měřítka homogenity. Pro experimenty byly použity dvě mikronizované účinné látky, mesilát doxazosinu a ibuprofen (IBP), a dva modelové nosiče, dihydrát hydrogenfosforečnanu vápenatého (Emcompress[®]) a monohydrát laktózy. Homogenita směsí byla posuzována na základě hodnoty relativní směrodatné odchylky hmotnostní koncentrace (RSD). Interakce jednotlivých složek směsi byly studovány pomocí centrifugační metody. Vyvinutá metodika měření adhezní síly centrifugační metodou dokázala vysvětlit, jak interakce mezi částicemi ovlivňují výsledné vlastnosti směsi. Z výsledků vyplynulo, že čím je silnější interakce mezi API a nosičem, tím je lepší homogenita vznikající směsi. Další příznivý vliv na homogenitu mají i vhodný poměr obou složek a velikost částic.

Sekce : Výroba léčiv

Využití gelových extrudátů na bázi škrobu k řízenému uvolňování léčiva

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

Cílem této práce bylo připravit lékové formy na bázi škrobu s řízeným uvolňováním léčiva s použitím paracetamolu jako modelové API, prozkoumat parametry jejich výroby a faktory ovlivňující uvolňování léčiva. Byly použity dva typy škrobu (bramborový a kukuřičný) a jejich směsi. Škrob byl smíchán s paracetamolem a vodou, vlit do Petriho misky a vložen do sušárny, kde proběhl proces mazovatění. Vzniklý gel byl vyextrudován pomocí ručního extrudéru, extrudáty byly vysušeny v sušárně, rozdrceny a síťovány. Ze vzniklých velikostních frakcí byly připraveny dva typy lékových forem – tablety a tobolky. U vzniklých lékových forem byly stanoveny disoluční charakteristiky. Ze zkoumaných lékových forem se projeví jako vhodné pro řízené uvolňování léčiva tablety. Dále bylo zjištěno, že disoluční charakteristiky jsou ovlivněny velikostí tablety, teplotou mazovatění, množstvím vody ve směsi, typem škrobu a v případě tablet obsahujících extrudáty na bázi kukuřičného škrobu i velikostí částic. Naopak disoluční charakteristiky nejsou ovlivněny lisovacím tlakem a v případě tablet obsahujících extrudáty na bázi bramborového škrobu i velikostí částic. Nakonec byly zkoumány směsi s různými poměry bramborového a kukuřičného škrobu, které se však projeví jako nevhodné pro řízené uvolňování léčiva z důvodu nepravidelného uvolňování.

Sekce : Výroba léčiv

Nový koncept v léčení bronchiálního zánětu

Autor: Veronika Rotová
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Kamila Syslová, doc. Ing. Petr Kačer, PhD.

Asthma bronchiale je závažné plicní onemocnění, jehož incidence neustále roste a první ataky se projevují již u kojenců a batolat. Nejzávažnějším typem bronchiálního astmatu je obtížně léčitelné astma (OLA), kterým v současné době trpí až 5 % z celkového počtu astmatiků. Tito tzv. OLA pacienti nereagují na dostupnou farmakoterapii a důsledkem toho mají omezenou fyzickou aktivitu a často trpí depresemi. Při tomto onemocnění se v organismu produkují biomarkery, jejichž koncentrace se v tělních tekutinách (kondenzátu vydechovaného vzduchu, plasma, moč) vlivem této choroby liší od koncentrace ve fyziologickém stavu. Mezi nejzajímavější biomolekuly astmatu patří produkty vzniklé štěpením z arachidonové kyseliny-cysteinylované leukotrieny (LTC_4 , LTD_4 a LTE_4), které mají prozánětlivé a bronchokonstrikční účinky a lipoxiny (LXA_4 , LXB_4), které mají naopak protizánětlivý účinek. Objevením lipoxinů se nám otevírá nová cesta nejen ke zpřesnění diagnostiky astmatu, ale zároveň k novému konceptu v léčení bronchiálního zánětu, využitím vhodného protizánětlivého lipoxinového analogu a zabránění tak nadměrnému užívání steroidních přípravků s řadou nežádoucích účinků.

Sekce : Výroba léčiv

Nová platinová cytostatika 4. generace s novou lékovou formou pro cílený transport

Autor: Jan Svoboda
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D., Ing. Kamila Syslová

Nádorová onemocnění představují 2. nejzávažnější onemocnění současné lidské populace. Každoročně na toto onemocnění umře více než 8 mil. obyvatel a více než 14 miliónů nových nálezů je diagnostikováno. Nejrozšířenější léčba rakoviny je pomocí chemoterapie, což je podávání cytotoxických látek do organismu. Mezi nejpoužívanější cytostatika s více než 60% zastoupením v klinické praxi patří skupina látek, kde centrální atom je platina. V současné době jsou pouze tři platinová cytostatika na trhu a to látky cisplatina, karboplatina a oxaliplatina. Ačkoliv tyto látky vykazují nejlepší cytotoxické účinky, kvůli závažným nežádoucím účinkům a postupné buněčné rezistenci je potřeba vyvinout nové Pt cytostatikum s lepší lékovou formou pro cílený transport. Cílem naší práce, je připravit nové platinové cytostatikum 4. generace, kde platinový kov je v oxidačním stavu IV s novou lékovou formou pro cílený transport cytostatika k cílovému nádoru, zejména glyoblastomu. Pro tento cíl, byly vybrány komplexy s různě objemnými a lipofilními ligandy v axiálních i ekvatoriálních polohách. Komplexy byly následně analyticky charakterizovány a byl stanoven jejich prostup buněčnou membránou. Následně tyto komplexy byly podrobeny testu na buněčných liniích pro zjištění jejich cytotoxických vlastností. Byly připraveny lékové formy komplexů pro cílený transport léčiv na bázi Si nanočástic.

Sekce : Výroba léčiv

Příprava a charakterizace lipidických nanokarierů obsahujících ceramid 6

Autor: Vít Kolaja
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Dr. rer nat. Jarmila Zbytovská

Atopická dermatitida a další kožní choroby jsou doprovázeny nižší koncentrací ceramidů v kůži, z čímž souvisí narušení kožní bariéry. Dermální aplikace ceramidu má příznivý vliv na terapii těchto chorob. Problémem ale bývá stabilní formulace extrémně lipofilních ceramidů. Cílem této práce je nalezení optimálního postupu přípravy stabilních lipidických nanočástic a liposomů s obsahem ceramidu 6, které jsou potenciálně využitelné jako transdermální nosiče ceramidu 6 pro cílený transport do kůže. Pro přípravu lipidických nanočástic byly použity dvě metody formulace, metoda sonifikační, a metoda fázové inverze. Liposomy byly připravovány metodou tenké vrstvy s následnou homogenizací. V připravených systémech byla sledována velikost částic, polydisperzita a stabilita systému v čase. Všemi metodami byly připraveny stabilní systémy s 5% inkorporovaného ceramidu 6. Velikosti částic a polydisperzita systémů se liší podle použité metody přípravy, přičemž celkový rozsah velikostí částic se pohybuje od 30 do 85 nm. Vzhledem k velké různorodosti metod nelze definitivně určit univerzálně nejvhodnější techniku přípravy nanosystémů, naopak je možné volit metodu přípravy s ohledem na požadavky na vlastnosti výsledného nanosystému.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Příprava nanokompozitů polyamid 6/montmorillonit s využitím laktimetherů

Autor: Daniel Jaksch
Ročník: M2
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Lenka Malinová, Ph.D., prof. Ing. Jiří Brožek, CSc.

Příprava nanokompozitu polyamidu 6 s vrstevnatým silikátem montmorillonitem je možná pouze, pokud je vrstevnatý silikát vhodně modifikován – organofilizován. V literatuře se využívá montmorillonit modifikovaný alkylamoniovými solemi. Dosud nebyla popsána organofilizace využívající laktimethery a sloučeniny od nich odvozené. Tyto látky aktivně přispívají k urychlení polymerace ϵ -kaprolaktamu jak hydrolytickým tak aniontovým mechanismem.

Tato práce je zaměřena na přípravu nanokompozitů polyamidu 6 a montmorillonitu organofilizovaného laktimethery s různou velikostí cyklu a sloučeninami vznikajícími reakcí laktimetherů a ϵ -aminokapronové kyseliny. Pro přípravu nanokompozitů byl nejprve aplikován hydrolytický mechanismus polymerace, který nám pomohl otestovat míru dispergace nanoplňiva v tavenině monomeru. U připravených materiálů byly vyhodnoceny termické vlastnosti (TGA, DSC) a byl stanoven obsah polymeru.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Příprava nanokompozitů grafen oxid/polyamid 6 z disperzí

Autor: Bc. Dominika Harabišová
Ročník: M1
Ústav: Polymerů
Školitel: prof. Ing. Jiří Brožek, CSc.

Pro přípravu (nano)kompozitů byl použit grafen oxid připravený modifikovanou Hummersovou metodou a grafen oxid organofilizovaný kyselinou ϵ -aminokapronovou. (Nano)kompozity ve formě fólií byly získány odpařením těkavého rozpouštědla z disperze grafen oxidu a polyamidu 6. Zajímavou technikou je příprava disperzí polyamidu 6 s grafen oxidem či organofilizovanou formou v *N*-methyl-2-pyrrolidonu za zvýšené teploty následovaná extrakcí acetone. Tyto disperze byly použity pro přípravu (nano)kompozitů z roztoku a lisováním z taveniny. Produkty jednotlivých fází přípravy byly charakterizovány elementární analýzou, termogravimetrickou analýzou, diferenciální skenovací kalorimetrií, rentgenovou difrakcí a skenovací elektronovou mikroskopií.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Způsoby provedení polymerací ϵ -kaprolaktamu v přítomnosti grafen oxidu

Autor: Jaroslav Minář
Ročník: M2
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Václava Benešová

Polyamid 6 je konstrukční plast, jehož vlastnosti lze modifikovat přidavkem rozmanitých plniv, například grafenu či grafen oxidu. Cílem této práce je nalézt způsob modifikace grafen oxidu, usnadňující jeho dispergaci v tavenině ϵ -kaprolaktamu a provedení aniontové a hydrolytické polymerace.

Grafen oxid byl modifikován reakcí s kyselinou ϵ -aminokapronovou v tavenině ϵ -kaprolaktamu. Rozsah modifikace byl vyhodnocen z výsledků elementárního složení, termogravimetrické analýzy a infračervené spektroskopie. Takto modifikovaný grafen oxid se snadno disperguje v tavenině ϵ -kaprolaktamu. (Nano)kompozity polyamidu 6 byly připraveny *in situ* aniontovou polymerací iniciovanou Grignardovou sloučeninou a urychlenou aktivátorem *N*-acyllaktamového typu. Při hydrolytické polymeraci iniciátor procesu kyselina ϵ -aminokapronová napomáhá účinné dispergaci nemodifikovaného grafen oxidu v tavenině laktamu. U produktů polymerací byl stanoven obsah polymeru, termické vlastnosti a u hydrolytických polymerací viskozitně-průměrná molární hmotnost.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Možnosti provedení polymerací ϵ -kaprolaktonu iniciovaných bis(ϵ -kaprolaktamát) vápenatým

Autor: Alena Jurásková
Ročník: B3
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Lenka Malinová, Ph.D.

Poly(ϵ -kaprolakton) je biologicky rozložitelný polymer, který nachází uplatnění v medicíně a farmacii. K iniciaci polymerace se většinou využívají iniciátory na bázi cínu, hliníku apod. Cín je však podezřelý z cytotoxicity. Proto se pozornost zaměřuje na využití iniciátoru biogenních prvků na bázi hořčíku a vápníku.

V předešlé práci bylo zjištěno, že bis(ϵ -kaprolaktamát) vápenatý je vhodný iniciátor pro polymeraci ϵ -kaprolaktonu. Cílem práce bylo popsat kinetiku roztokové polymerace ϵ -kaprolaktonu iniciované bis(ϵ -kaprolaktamát) vápenatým. Při studiu polymerace byly měněny koncentrace jednotlivých složek systému a byl testován vliv obsahu vody v rozpouštědle. V další části práce jsem se pokusila o přípravu poly(ϵ -kaprolaktonu) v monomerní fázi. Nejprve byla potřeba najít vhodný způsob dispergace pevného iniciátoru v monomeru. Polymerace byly provedeny při různých teplotách a koncentracích iniciátoru. U všech získaných vzorků poly(ϵ -kaprolaktonu) byly stanoveny obsahy polymerů, molární hmotnosti a termické vlastnosti.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Hodnocení sklonu k aglomeraci aktivních typů ZnO

Autor: Hana Kohoutová
Ročník: B3
Ústav: Polymerů
Školitel: doc. Ing. Antonín Kuta, CSc.

Oxid zinečnatý se při výrobě kaučukové směsi používá jako aktivátor vulkanizace. Zinek je sice biogenní prvek, ale ve větším množství škodí malým vodním organismům, a proto se v této práci věnuje možnosti snížení jeho obsahu v pryži. Jednou z možností je použití tzv. aktivního ZnO, který má menší částice (větší povrch). Tyto materiály mohou mít sklon k aglomeraci a tím snížení „aktivity“.

Porovnávala jsem tři typy oxidu zinečnatého: jeden běžně používaný (neaktivní) typ a dva aktivní typy. Pro hodnocení sklonu k aglomeraci byl ZnO zamíchán rozmixovaný v inertním plnivu (křídě) a jako čistá látka. Hodnotila jsem vulkanizační charakteristiky směsí a vlastnosti vulkanizátů.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Vliv síťování na vlastnosti polyimidových membrán

Autor: David Malý
Ročník: M2
Ústav: Polymerů
Školitel: prof. Ing. Petr Sysel, CSc.

Polyimidy patří mezi významné materiály pro přípravu membrán pro separační procesy zaměřené na dělení plyných směsí. Transport membránou je ovlivňován charakterem dělených látek i membrány. V posledním období se jako účinný nástroj cíleného zásahu do struktury polymerní membrány začíná uplatňovat transformace lineárního polymeru do trojrozměrné sítě. V této práci byly k zesíťování komerčně dostupného lineárního polyimidu na bázi dianhydridu kyseliny 3,3',4,4'-benzofenontetrakarboxylové a diaminofenylindanu použity 4,4'-diaminodifenylmethan nebo 4,4',4''-triaminotrifenylmethan nebo aminoskupinami terminovaný polyimidový prekurzor, vysoce větvená polyamidkarboxylová kyselina na bázi 4,4'-(hexafluorisopropyliden)difthalanhydridu a 4,4',4''-triaminotrifenylmethanu. Struktura v literatuře dosud nepopsaných produktů byla monitorována infračervenou spektroskopií a jejich morfologie snímací elektronovou mikroskopií a dynamicko-mechanickou analýzou. Transportní parametry vybraných plynů samonosnými membránami z těchto materiálů o tloušťce pohybující se v desítkách mikrometrů byly sledovány pomocí integrálního permeometru a sorpční aparatury.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Vysokomolekulární biodegradovatelné hydrofilní polymery jako nosiče léčiv

Autor: Gabriela Mužíková
Ročník: M2
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Michal Pechar, CSc., prof. Ing. Jiří Brožek, CSc.

Vysokomolekulární polymerní nosiče léčiv se využívají k pasivnímu směřování do nádorů, kde se akumulují díky EPR (enhanced permeability and retention) efektu. Ten spočívá ve zvýšené propustnosti nádorového endotelu a absenci lymfatického systému. Biodegradovatelný polymer zajistí následné vyloučení degradačních produktů z organismu.

Připravila jsem modelový semitelechelický polymer RAFT (reversible addition-fragmentation chain transfer) polymerizací 2-hydroxypropylmethakrylamidu v roztoku. Početně průměrná molární hmotnost polymeru byla 11000 g/mol a disperzita 1,09. Kromě ω -koncové dithiobenzoátové skupiny obsahoval azidovou α -koncovou skupinu. Následnou reakcí s azoiniciátory obsahujícími alkynové nebo azidové skupiny se dithiobenzoátová skupina nahradila těmito funkčními skupinami. Cykloadicí azidové a alkynové skupiny (click reakce) byly připraveny vysokomolekulární polymery s krátkými termicky štěpitelnými spojkami.

Další polymery byly připraveny s použitím přenašeče (CTA - chain transfer agent) obsahujícím tripeptid, který je štěpitelný při nízkém pH (simulace nádorové tkáně). Následovalo odstranění dithiobenzoátových koncových skupin a click reakce jako v případě modelových polymerů.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Organické katalyzátory polymerací cyklických esterů

Autor: Anna Patrova
Ročník: M1
Ústav: Polymerů
Školitel: Mgr. Soňa Hermanová, Ph.D.; Ing. Lenka Kotrchová

Alifatické polyestery (polykaprolakton, polylaktid, polyglykolid) jsou biologicky rozložitelné polymery s hydrolyzovatelnými esterovými vazbami v hlavním řetězci. Patří mezi významné materiály vhodné pro medicínské aplikace a to zejména díky rozložitelnosti za fyziologických podmínek v nastavitelných časových intervalech. Výzkum je zaměřen na přípravu polyesterů polymeracemi za otevření kruhu iniciovanými organickými sloučeninami, které představují vhodnou alternativu k tradičním organokovovým systémům.

Cílem práce bylo ověření katalytické účinnosti guanidinové báze 1,5,7-triazabicyklo[4.4.0]dec-5-enu (TBD) pro polymerace ϵ -kaprolaktonu. V práci byly studovány polymerace iniciované jak jednosložkovým systémem (TBD), tak i dvousložkovým systémem (TBD/alkohol). Jako iniciátory byly použity benzylalkohol, hexan-1,6-diol a polyethylenglykol. Připravené polymery byly podrobeny SEC analýze pro stanovení průměrných molárních hmotností. U vybraných vzorků byl charakter koncových skupin stanoven pomocí ^1H NMR analýzy.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Příprava polymerních nosičů pro látky s biologickým účinkem

Autor: Lucie Reinišová
Ročník: B3
Ústav: Polymerů
Školitel: Mgr. Soňa Hermanová, Ph.D., Ing. Lenka Kotrchová

Polymerní nosiče jsou v současnosti předmětem intenzivního výzkumu jako moderní alternativa k tradičním metodám aplikace biologicky aktivních látek. Velkou výhodou je značná rozmanitost vlastností těchto materiálů, záviselých například na typu polymeru, jeho struktuře či molární hmotnosti. Tato rozmanitost umožňuje vytvořit transportní systém na míru konkrétním požadavkům. Významnou skupinou rozložitelných a biokompatibilních polymerních nosičů jsou alifatické polyestery a jejich kopolymery.

Cílem této práce byla příprava mikro- a nanočástic na bázi poly(ϵ -kaprolaktonu), jejich charakterizace a studium degradačního chování v přítomnosti hydrolytických enzymů při 37 °C. Částice byly připraveny metodou odpařování rozpouštědla z emulze typu olej/voda. Vzorky byly charakterizovány pomocí dynamického rozptylu světla pro určení velikosti částic.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Hodnocení vlivu heterogenity přírodního kaučuku na plasticitu Wallace a PRI

Autor: Bc. Jan Šimek

Ročník: M2

Ústav: Polymerů

Školitel: doc. Ing. Antonín Kuta, CSc.

Konzultant: Ing. Jiří Brejcha, Mitas a.s., Ing. Lucie Herzigová, Mitas a.s.

Převážná část přírodního kaučuku se v současné době těží na plantážích v Jihovýchodní Asii a v Africe. Vlivem mnoha faktorů nemůže být kvalita produkovaného materiálu na všech plantážích stejná, proto ji pečlivě sledují výrobci i zpracovatelé kaučuku. Jedním z hojně používaných ukazatelů pro hodnocení kvality přírodního kaučuku je plasticita Wallace a hodnota PRI. Naměřené hodnoty pak mají dopad na způsob použití kaučuku ve výrobních závodech.

V první fázi byla provedena studie ověření vlivu kalandrování na plasticitu přírodního kaučuku. Po neshodě experimentálních hodnot s teorií se jako jeden z možných faktorů ovlivňující hodnoty měření jevila heterogenita dodaných kaučuků. V této práci byla studována míra heterogenity kaučuku pomocí plasticity Wallace a PRI.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Využití GC/MS při charakterizaci produktů zahřívání gumárenských surovin

Autor: Milada Teubnerová

Ročník: B2

Ústav: Analytické chemie

Školitel: Ing. Jiří Brejcha, Ing. Jiří Kosina

Během výroby gumárenských směsí a pneumatik se uvolňuje velké množství sloučenin v plynné fázi. Některé z nich jsou potenciálně zdraví škodlivé, a tak je jejich klasifikace a určení zdroje do budoucna nezbytná. Protože část látek během výroby vzniká nebo se naopak rozkládá (kvůli teplotám a tlaku), je nutné začít od jednotlivých surovin, rozdělit je podle určitých podobností a měření provést za podmínek co nejvíce odpovídajících výrobě, dříve než začneme měřit používané směsi, respektive vzorky emisí získaných přímo v reálném výrobním procesu. Následná interpretace se musí přizpůsobit procentuálnímu zastoupení surovin ve směsích tak, aby nebyly určovány látky, které se později při měření hotové pneumatiky kvůli citlivosti dané metody nedají rozlišit. V mé práci jsem se omezila na měření jednotlivých surovin pomocí GC/MS, který umožňuje změřit velkou škálu organických sloučenin za vysokých teplot a s dostatečnou citlivostí.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Vytváření vrstevnatých struktur montmorillonit-polymer

Autor: Tomáš Urbánek
Ročník: M1
Ústav: Polymerů
Školitel: prof. Ing. Jiří Brožek, CSc.

K této práci nás inspirovala struktura přírodního hybridního materiálu – perleti, která se vyznačuje výbornými mechanickými vlastnostmi. Cílem této práce je vytváření podobně uspořádaných vrstevnatých struktur „*bricks and mortar*“ (cihly a malta) na bázi montmorillonitu a vhodných polymerů či jejich prekurzorů. Byly připraveny disperze různých druhů montmorillonitů s vodorozpustnými polymery (karboxymethylcelulóza, poly(vinylalkohol)) nebo s prekurzory polyamidů (6-aminokapronová kyselina a AH sůl). Fólie se formovaly odpařováním vody z disperzí při pokojové teplotě tzv. procesem samouspořádávání. Při optimálních podmínkách se vytvářela vrstevnatá struktura, jak prokázaly snímky z elektronového mikroskopu. Materiály jsme dále podrobili termogravimetrické analýze a infračervené spektroskopii. Zjistili jsme, že prekurzor v mezivrstvi montmorillonitu je možné polykondenzací při teplotě 260 °C převést na nízkomolekulární polyamid při zachování vrstevnaté struktury výsledného hybridního materiálu.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Vysoce větvené polyimidy obsahující oxid titaničitý

Autor: Jan Vyšohlíd
Ročník: M2
Ústav: Polymerů
Školitel: prof. Ing. Petr Sysel, CSc.

Jednu z cest přípravy materiálů pro pokročilé aplikace představuje kombinace polymeru s vhodným aditivem. Cílem je přitom zúročit vyhledávané vlastnosti obou komponent. V této práci byla studována příprava a základní vlastnosti v literatuře dosud nepopsaných materiálů na bázi vysoce větveného polyimidu a oxidu titaničitého, potenciálně využitelných například jako polymerní membrány nebo jako substráty pro fotokatalytické reakce. Výchozími monomery pro dvoustupňovou syntézu (přes stadium vysoce větvené polyamidkarboxylové kyseliny) vysoce větveného polyimidu byly 4,4'-oxydiftalanhydrid a 4,4',4''-triaminotriphenylmethan. Oxid byl přidáván jednak do roztoku vysoce větvené polyamidkarboxylové kyseliny ve formě částic (rutil s deklarovanou velikostí primárních částic do 100 nm) a jednak generován v reakčním systému z prekurzoru butoxidu titaničitého sol-gel metodou. Struktura materiálů – připravených ve formě filmů o tloušťce pohybující se v desítkách mikrometrů – byla sledována infračervenou spektroskopií a jejich morfologie snímací elektronovou mikroskopií a dynamicko-mechanickou analýzou. Byl posouzen vliv přítomnosti oxidu na termickou a chemickou stabilitu a optické vlastnosti materiálů.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Hodnotenie stability farmaceutických blistrov na bázi PVC

Autor: Martin Záboj
Ročník: M2
Ústav: Polymerů
Školitel: doc. Ing. Antonín Kuta, CSc.

Balenie liečiv v obaloch označovaných ako „blister-pack“ je v súčasnosti najviac používaným typom primárnych obalov predovšetkým tuhých kusových foriem. Na tieto balenia sú kladené nemalé požiadavky ako napríklad sterilita, chemická odolnosť či nepriepustnosť, ktoré musia byť splnené po dobu expirácie liečiva. Cieľom práce bolo otestovať stabilitu fólie pre výrobu blistrov pred a po tepelnom tvarovaní. Bola hodnotená fólie z polyvinylchloridu, a dve vrstvené fólie tvorené kombináciou polyvinylchlorid/polyvinylidenchlorid a polyetylen/polyvinylchlorid/polyvinylidenchlorid. U jednotlivých vzoriek bola sledovaná tepelná odolnosť, kde sa sledoval únik chlorovodíku a tiež tepelná farebná stabilita. Vzorky boli ďalej analyzované termogravimetricky s následným vyhodnotením unikajúcich látok na infračervenej spektrofotometrii. U netvarovaných vzoriek bolo sledované starnutie materiálu simulované ve veterometru a vyhodnotené farebnou zmenou.

Sekce : Materiálové inženýrství

Studium kovových vrstev deponovaných na PES

Autor: Veronika Bláhová
Ročník: M1
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: doc. Ing. Petr Slepíčka, PhD.

Cílem práce je příprava a charakterizace Au nanovrstev na polymerním substrátu. Kovové vrstvy byly deponovány katodovým naprašováním. Jako polymerní substrát byl zvolen PES ve formě 50 μm fólií a také laserově modifikovaný. Naprašování Au vrstev probíhalo po dobu 10-300 s při proudu 20 mA a pokojové teplotě. Spojitost vrstev byla studována měřením plošné rezistance, změna optických vlastností sledována metodou UV-VIS spektroskopie, morfologie vzorků měřena metodou LSCM a AFM. Výsledkem práce je porovnání vlastností systému kov-substrát s ohledem na původní a laserově modifikovaný PES.

Sekce : Materiálové inženýrství

Uhlíkové nanovrstvy deponované na plazmatem a laserem modifikovaném PLLA

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

Práce se zabývá studiem povrchových vlastností uhlíkových nanovrstev napařených na poly-L-laktidu, který byl nejprve modifikován plazmatem resp. laserem. Výkon elektrického výboje při modifikaci plazmatem byl nastaven na 8 W a proměnnou veličinou byla doba modifikace – 40, 120, 240 s. Při modifikaci laserem byly proměnnými hustota energie laseru – 5 a 10 mJcm⁻² a počet pulzů – 100, 500 a 1000 pulzů.

Při následném napařování uhlíkových vrstev bylo použito jedno uhlíkové vlákno a proměnnou veličinou byla vzdálenost vzorku od vlákna při napařování – 3, 5 a 7 cm. Byl sledován zejména vliv způsobu přípravy vzorků na povrchovou energii a kontaktní úhel. Dále u vzorků, které byly modifikovány plazmatem, byla také studována povrchová morfologie a drsnost metodou AFM. V další části práce byl zkoumán vliv tepelného zahřívání na povrchové vlastnosti uhlíkových vrstev. Vzorky byly tepelně namáhány po dobu 1 hodiny při teplotě 60°C. Rovněž byly sledovány zejména změny povrchové energie a kontaktního úhlu.

Sekce : Materiálové inženýrství

Štúdium kovových vrstiev na sklenenom substráte

Autor: Bc. Peter Konrád
Ročník: M2
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: prof. Ing. Václav Švorčík, DrSc.

Práce je venovaná štúdiu kovových vrstiev na sklenenom substráte z čistého SiO₂. Kovové vrstvy Ag a Au boli pripravené metódou katódového naprašovania. Naprášené vrstvy boli žíhané na vzduchu pri teplote 300 °C po dobu 60 minút. Na takto pripravené vrstvy bolo nanesených niekoľko farieb rozpustených v organických rozpúšťadlách upravenou metódou „spin coating“. Po odparení rozpúšťadla boli vzorky študované UV-Vis spektroskopiou a taktiež bola študovaná ich použiteľnosť ako substrát pre povrchovo zosilnenú Ramanovu spektroskopiou.

Sekce : Materiálové inženýrství

Plazmatická modifikace a povrchová morfologie PHB

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

Projekt se zabývá studiem povrchových vlastností polyhydroxybutyrátu (PHB). Nejprve byla zkoumána folie PHB obsahující 8 %-ní polyhydroxyvalerát (PHV), konkrétně vliv plazmatické modifikace na smáčivost, ablaci, stárnutí a biokompatibilitu. Dále byl PHB zkoumán ve formě netkané textilie, u které byla zkoumána též plazmatické modifikace. Po působení Ar plazmatu byla zkoumána smáčivost, tepelná stabilita, tloušťka ablatované vrstvy, ale i roubování kovových nanočástic. Také bylo zjišťováno chemické složení a optický vzhled vláken povrchové vrstvy. Kromě modifikovaného biopolymeru byl pro porovnání zkoumán i původní polymer. PHB je hydrofobní materiál, z kterého se po plazmatické modifikaci stává materiál hydrofilní. Změna je skoková a poměrně stálá. Také byla prokázána vysoká biokompatibilita, která by se mohla využít v obvazových materiálech či nosičích léčiv.

Sekce : Materiálové inženýrství

Štúdium zlatých vrstiev na plazmaticky aktivovanom PLLA

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

Kombinácia tenkých polymérnych filmov s nanočasticami alebo tenkými kontinuálnymi vrstvami kovových materiálov môže viesť k novým materiálom s unikátnymi elektrickými, mechanickými, optickými alebo antibakteriálnymi vlastnosťami. Materiály na báze polymér-kov nachádzajú široké uplatnenie v automobilovom a elektrotechnickom priemysle, mikroelektronike, či dokonca v tkanivovom inžinierstve. Pre zlepšenie priľnavosti kovových vrstiev k polymérom sa používajú rôzne postupy, ako napríklad modifikácia plazmou, UV žiarením alebo kyselinami. Povrch polyméru sa tak mení, vytvárajú sa polárne skupiny a vrstva na rozhraní schopná adhézie je účinnejšia.

Táto práca sa zaoberá štúdiom zlatých vrstiev na plazmaticky modifikovanej kyseline poly-L-mliečnej. Vrstvy o rôznych hrúbkach boli pripravené metódou katódového naprašovania a následne zahrievané pri teplote 60 °C. Sledované boli predovšetkým zmeny v povrchovej morfológii a drsnosti povrchu prostredníctvom rastrovacej konfokálnej mikroskopie a mikroskopie atomárnych síl. Na základe XPS spektier bol analyzovaný obsah jednotlivých prvkov v povrchových vrstvách.

Sekce : Materiálové inženýrství

Stabilita nanočástic cínu v inertní a oxidační atmosféře

Autor: Jan Pajtai
Ročník: B3
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: prof. Ing. Jindřich Leitner, DrSc.

Cílem práce je připravit nanočástice cínu (Sn-np) a pomocí metod DSC a DTA/TG posoudit vliv jejich velikosti na teplotu tání a stabilitu při oxidaci za zvýšené teploty. Sn-np byly připraveny redukcí 2-ethylhexanoátu cínu hydrogenboritanem sodným za přítomnosti surfaktantu 1,10-fenantrolinu. Odsředěné a vysušené částice byly charakterizovány metodou RTG difrakce, pomocí které byla rovněž určena jejich průměrná velikost. Teplota tání Sn-np byla stanovena v kalorimetru DSC 404 C (Netzsch) při ohřevu rychlostí 10°C/min do konečné teploty 300°C v inertní atmosféře (Ar 5N s dočistěním na obsah kyslíku ≤ 3 ppb). Průběh oxidace byl sledován jednak v kalorimetru DSC 404 C (Netzsch) při ohřevu rychlostí 10°C/min do konečné teploty 800°C v oxidační atmosféře (syntetický vzduch 5N), jednak v zařízení pro simultánní DTA/TG analýzu STA PT 1600 (Linseis) za stejných podmínek. Získané výsledky byly porovnány s údaji pro mikrokryсталický cín a porovnány s dostupnou literaturou.

Sekce : Materiálové inženýrství

Příprava polysacharidových filmů na bázi chitosanu a celulózy

Autor: Markéta Pišlová
Ročník: M2
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Kateřina Kolářová, Ph.D.

Cílem této práce bylo připravit polysacharidové filmy na bázi chitosanu a celulózy. Chitosan i celulóza patří mezi nejrozšířenější přírodní polysacharidy na Zemi. Chitosan je netoxický, biokompatibilní a biodegradabilní polymer. Spolu s celulózou má široké uplatnění v medicíně, zejména při hojení ran. Při přípravě byly také využity stříbrné nanočástice, které mají prokázané antibakteriální vlastnosti. Právě díky těmto vlastnostem by připravované filmy mohly nalézt uplatnění v medicíně.

Připravila jsem film, který obsahoval chitosan a celulózu. Dále film, který, obsahoval chitosan, celulózu a navíc ještě stříbrné nanočástice. Zkoušela jsem také ovlivnit vlastnosti jednotlivých filmů přidávkou polyetylen glykolu o různé molekulové hmotnosti. U připravených filmů jsem zkoumala jejich vlastnosti, jako nasákavost, hodnotu kontaktního úhlu či rozpouštění v pufrovaných roztocích.

Sekce : Materiálové inženýrství

Studium kovových nanočástic připravených metodami PVD

Autor: Jan Smolka
Ročník: B3
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: doc. Ing. Jakub Siegel, Ph.D.

Práce se zabývá přípravou nanočástic platiny a paladia metodou katodového naprašování do glycerolu a zkoumání jejich cytotoxických vlastností v závislosti na koncentraci kovu. Jako kapalný substrát byl zvolen glycerol pro svou nízkou tenzi par, schopnost stabilizovat nanočástice, prakticky nulovou toxicitu a biologickou odbouratelnost.

Velikost a distribuce připravených nanočástic byla studována pomocí transmisní elektronové mikroskopie (TEM) a dynamického rozptylu světla (DLS). Pro analýzu připravených nanočástic byly použity metody spektroskopie v ultrafialovém a viditelném spektru (UV-Vis) a atomové absorpční spektrometrie (AAS). Spolehlivost výsledků cytotoxických testů je zásadně ovlivněna osmolaritou testovaných vzorků, která musí odpovídat isotonickému prostředí.

Sekce : Materiálové inženýrství

Příprava Pd nanostruktur na polyethylennaftalátu a studium jejich antibakteriálních účinků

Autor: Michaela Valová
Ročník: B3
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: doc. Ing. Jakub Siegel, Ph.D.

Paladium, stejně jako další ušlechtilé kovy, má prokazatelné antibakteriální účinky. Díky vysoké korozní odolnosti, snadné zpracovatelnosti a nízké ceně je používáno k dentálním účelům. Cílem mé práce bylo připravit Pd nanovrstvy o proměnné tloušťce na biokompatibilním polymeru polyethylennaftalátu (PEN) pomocí katodového naprašování. Tyto vrstvy jsem charakterizovala ihned po depozici a po teplotním namáhání pomocí goniometrie, UV-Vis spektroskopie, XPS a AFM. Následně budu na těchto vzorcích studovat antibakteriální účinky kapkovým testem. Pomocí goniometrie bylo u deponovaných vzorků zjištěno ustálení hodnot kontaktního úhlu v čase depozice 60 s, kde se tvoří souvislá vrstva Pd, což bylo potvrzeno měřením plošné rezistance. U teplotně namáhaných vzorků dochází k ustálení hodnot kontaktního úhlu od času depozice 160 s. Po transformaci vrstev působením zvýšené teploty byl pozorován přechod od nesouvislé v souvislou vrstvu v rozmezí depozičních časů 160-500 s. XPS měření naznačují koalescenci Pd po teplotním namáhání vrstev, což se projevuje poklesem koncentrace Pd v XPS spektrech. Tento závěr byl potvrzen i analýzou AFM. Pd vrstvy budou následně testovány vůči vybraným bakteriálním kmenům a bude vyhodnocena jejich antibakteriální aktivita.

Sekce : Chemická informatika a bioinformatika

Expres rekombinantní formy nepenthesinu I z *Nepenthes gracilis*

Autor: Vjačeslav Tretjačenko
Ročník: M1
Ústav: Mikrobiologický ústav AV ČR, v. v. i.
Školitel: RNDr. Petr Man Ph.D,

Nepenthesin je nespecifickou aspartátovou proteasou láčkovek *Nepenthes* a *Drosera*. Přírodní forma se vyznačuje vysokou termostabilitou a odolností v širokém rozmezí pH, vlastnostmi, které dovolují použití enzymu pro účely experimentu vodík/deuteriové výměny ve spojení s hmotnostní spektrometrií. Navzdory těmto charakteristikám se ukázalo, že proteasa má relativně nízkou stabilitu vůči denaturačním činidlům (močovina, guanidinium chlorid). Pro vysvětlení tohoto fenoménu je třeba strukturně-funkční analýzy, která dosud nebyla možná z důvodu nízkého množství izolovaného enzymu z láček a jeho dodatečné glykosylace. Cílem projektu bylo připravit aktivní rekombinantní formu nepenthesinu v dostatečném množství pro možnost jeho rutinního využívání v experimentech vodík/deuteriové výměny a pro jeho charakterizaci prostřednictvím rentgenstrukturní analýzy.

Sekce : Chemická informatika a bioinformatika

Vizualizace chemického prostoru definovaného pomocí chemických otisků prstů

Autor: Tereza Boučková
Ročník: M2
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: doc. Daniel Svozil, Ph.D.

Chemický prostor je okupován všemi možnými (tj. Energeticky stabilními) organickými sloučeninami. Je obrovský, neboť čítá něco mezi 1060 and 10200 molekulami. Pro efektivní exploraci chemického prostoru je třeba vyřešit problém jeho vizualizace. Nevýhodou chemického prostoru je jeho nejednoznačná definice, neboť nejsou přesně definovány jeho souřadnice. Cílem práce je otestovat vhodnost použití chemických otisků prstů jako souřadných systémů pro vizualizaci chemického prostoru a porovnat různé vizualizační techniky.

Sekce : Chemická informatika a bioinformatika

Srovnání moderních editorů chemických vzorců na internetu

Autor: Hana Dohnalová
Ročník: M1
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Ing. Jiří Znamenáček

Práce se zabývá chemickými editory založenými na webových technologiích a jejich vzájemným porovnáním z hlediska licence, vlastností a podporovaných formátů.

První část je věnována vývoji chemických editorů a různým technologiím, které se pro jejich vývoj využívají nebo využívaly.

V druhé části se předložená práce zabývá vlastními editory. Popisuje volně dostupné editory i editory komerční, které v současné době přechází na tyto nové technologie. U volně dostupných editorů navíc hodnotí snadnost instalace.

Na závěr jsou pak přiloženy přehledné tabulky shrnující zjištěné informace o jednotlivých editorech.

Sekce : Chemická informatika a bioinformatika

Funkční analýza endogenních retrovirových elementů v lidském genomu

Autor: Mirka Famfulíková
Ročník: M1
Ústav: Ústav molekulární genetiky AV ČR, v. v. i.
Školitel: Mgr. Jan Pačes, Ph.D.

Lidský genom obsahuje kromě kódujících oblastí také nekódující, ke kterým řadíme transponovatelné genetické elementy, které jsou schopny se v genomu přemísťovat. Mezi ně řadíme i lidské endogenní retroviry (human endogenous retroviruses = HERVs). Dlouhý čas se vědecká obec domnívala, že elementy HERV jsou pouze neaktivními součástmi lidského genomu, ale z posledních výzkumů toto tvrzení vyvracejí.

V našem výzkumu jsme analyzovali transkriptomy z jedenácti různých tkání a sledovali v nich transkripci endogenních retrovirových elementů. Míru její abundance jsme pak srovnávali s transkripcí vybraných housekeeping genů, které jsou nezbytné pro fungování všech buněk organismu. Zjistili jsme, že některé rodiny elementů HERV jsou v různých tkáních poměrně hojně transkribovány. Výsledky mohou přispět k porozumění funkcí endogenních retrovirů v lidském genomu.

Sekce : Chemická informatika a bioinformatika

Srovnání podobnostního hledání ve strukturních databázích

Autor: Kateřina Frabšová
Ročník: M2
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Ing. Jiří Jiráť, Ph.D.

Hledání podobných látek v chemických databázích je v dnešní době velmi rozšířené. Pro chemický průmysl je důležité z hlediska hledání nových vlastností u sloučenin, které by mohly nahradit stávající drahé látky, například při různých syntézách nebo v lékařství při hledání nových léčiv. Mým cílem bylo prozkoumat podobnostní hledání ve strukturní chemické databázi Reaxys a PubChem, a to zejména z hlediska výsledků pro uživatele-chemika a porovnání získaných výsledků s těmi, které vyplynou z následného zpracování pomocí chemoinformatických softwarových nástrojů. Výsledky podobnostního hledání se v databázi Reaxys a PubChem znatelně liší. Podobnost vyšla při testech pomocí softwarových nástrojů ve většině případů jinak než v chemických databázích, což je způsobeno odlišnými algoritmy pro výpočet podobnosti, které dané databáze používají.

Sekce : Chemická informatika a bioinformatika

Analýza interakčních preferencí v protein – DNA komplexoch

Autor: Bc. Dávid Jakubec
Ročník: M1
Ústav: Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i.
Školitel: RNDr. Jiří Vondrášek, CSc.

Špecifické interakcie medzi proteinmi a nukleovými kyselinami sú kritické pre základné bunkové procesy ako sú regulácia bunkového cyklu a regulácia génovej expzie. Rastúce množstvo experimentálnych štruktúr protein – DNA komplexov vo vysokom rozlíšení umožňuje na atomistickej úrovni skúmať či existujú všeobecne aplikovateľné pravidlá determinujúce rozpoznávanie DNA sekvencie proteínom. Naša práca kvantitatívne vyhodnocuje väzobné preferencie v neredundantnej podmnožine protein – DNA komplexov dostupných v databáze Protein Data Bank. Činí tak výpočtom interakčných energií v pároch aminokyselina – DNA báza metódami molekulovej mechaniky (MM). Získané párové geometrie sú podrobené analýze vyhľadávajúcej v konformáciach podobnosť, dávajúc našej sade kontaktov hierarchickú štruktúru. Biologický význam vybraných reprezentatívnych párov aminokyselina – báza je vyhodnotený porovnaním s konformáciami odpovedajúcimi energetickému minimu. Výsledky MM výpočtov sú porovnané s výpočtami elektrónovej štruktúry presnejšou metódou DFT-D.

Vztah mezi Bayesovským skórem a chemickou aktivitou

Autor: Jiří Novotný
Ročník: B3
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: doc. Daniel Svozil, Ph.D.

Naivní Bayesův klasifikátor je jedna z nejpoužívanějších metod pro tzv. binární klasifikaci, tedy zařazení objektů do jedné ze dvou tříd. Je to pravděpodobnostní metoda, která buduje predikční model na základě srovnání zastoupení jednotlivých rysů v datech dopředu zaklasifikovaných do příslušných tříd (trénovací množina). V naší práci se zabýváme klasifikací ligandů potenciálně aktivních (či neaktivních) na lidském estrogením receptoru α . Ligandy jsou popsány tzv. deskriptory, které postihují jejich fyzikálně-chemické vlastnosti (např. molekulová hmotnost či molární refraktivita) či strukturní vlastnosti (např. Morganovy otisky prstů). Datovou množinu jsme získali z volně dostupné databáze ChEMBL, která obsahuje kromě jednotlivých struktur též experimentálně změřené aktivity. Vstupní data jsou rozdělena v poměru 70:30 na trénovací a testovací množinu. Model je vytvořen z trénovacích dat a poté je otestován na testovací množině. Výsledkem Bayesovy klasifikace je předpovězená pravděpodobnost (skóre), se kterou je daný ligand aktivní. Cílem naší práce je ověřit, nakolik pravděpodobnost, že je daná látka aktivní, odpovídá její potenci, tj. jak moc pravděpodobnostní skóre koreluje s experimentálně naměřenou aktivitou.

Restaurování skleněné mozaiky z Jablonce nad Nisou

Autor: Ing. arch. Jan Černohorský
Ročník: B4
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Dr. Ing. Dana Rohanová

Předmětem restaurování byla skleněná mozaika, která byla původně instalována jako výzdoba části konchy venkovní hrobky v Jablonci nad Nisou. Jde o rohový objekt s půlkruhovou zaklenutou nikou o poloměru 1,5 m a výškou 3,2 m. Centrální část konchy zdobí kruhová galvanoplastika a klenba je ozdobena skleněnou mozaikou z osmi shodných dílů opakujícího se florálního motivu. Mozaika je tvořena několika základními barvami skleněných kamenů (*tesserae*): modrá, zelená, fialová, růžová a *tesserae* se zlatou fólií. *Tesserae* mají různou míru opacity. Pro docílení netransparentního, opakního vzhledu byly použity minerální pigmenty na bázi Pb-Sb nebo Pb-Sn minerálů. Restaurátorským záměrem bylo očistit jednotlivé skla, zrekonstruovat celý tvar zaklenuté mozaiky a doplnit původní motiv novými skleněnými kameny. Součástí záměru bylo provedení analýz materiálu a průzkumu stavu skleněných kamenů prostřednictvím optické mikroskopie, RTG difrakce a SEM/EDS. Mozaika bude v budoucnu umístěna v expozici Muzea skla a bižuterie v Jablonci nad Nisou nebo instalována zpět na původní místo hrobky.

Sekce : Restaurování skla a keramiky

Lazurované holby z 19. století - rekonzervační zásah

Autor: Pavla Glauningerová
Ročník: B4
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Zuzana Zlámalová Cílová, Ph.D.; Aranka Součková Daňková; Ing. Klára Drábková; Bc. Michaela Kněží Knížová

V rámci této práce byl proveden rekonzervační zásah na dvou skleněných nádobách zapůjčených z Vlastivědného muzea v Olomouci. Základním požadavkem bylo odstranění adheziva použitého při předchozím zásahu, jelikož působilo vlivem barevných změn rušivě, a doplnění chybějících skleněných částí předmětů. Předměty byly restaurovány dle předem schváleného záměru, který zahrnoval čištění předmětů od prachových částic a původního adheziva, opětovné slepení předmětů, doplnění ztrát a závěrečnou barevnou retuš. Zásah byl veden s ohledem na všechny zastoupené materiály (jedna holba byla opatřena kovovou montáží).

Samotné sklo bylo čištěno destilovanou vodou a acetonem. Kovová montáž byla čištěna 10% roztokem Chelatonu 3. V průběhu čištění byly odebrány vzorky skla z obou nádob, adhezivo a zbytky lazurovací směsi. Pro lepení a doplnění materiálových ztrát byla použita epoxidová pryskyřice Hxtal NYL-1. Doplnění ztrát bylo provedeno na dlahu ze silikonového kaučuku Lukopren N Super. Barevná retuš byla vytvořena roztokem Paraloidu B-67, který byl obarven práškovými barvivy Orasol dyes. Pro zrestaurované předměty byl navržen ochranný režim. Na základě výsledků chemických analýz byly zpřesněny údaje o těchto předmětech.

Sekce : Restaurování skla a keramiky

Restaurování souboru renesančních pohárů z Bratislavy

Autor: Margarita Gorelikova
Ročník: B3
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Dr. Ing. Dana Rohanová

Cílem práce bylo zrestaurovat soubor renesančních pohárů s použitím moderních adheziv, zajistit stabilitu restaurovaných předmětů a provést analýzy. Pro zjištění složení skla a korozní vrstvy byla použita metoda SEM/EDS. Analýzou se potvrdilo, že soubor pohárů byl vyroben ze sodno-vápenatého skla. Základní složení skel z Bratislavy (obsah alkalických složek CaO a Na₂O) je blízké sklům označovaným jako Common glass a Vitrum Blanchum. Chemické složení těchto pohárů se liší pouze v obsahu MnO, Fe₂O₃ a MgO.

Sekce : Restaurování skla a keramiky

Restaurování pravěkých nádob doby bronzové

Autor: Doubravka Hajmanová
Ročník: B3
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Alexandra Kloužková Csc., Ljuba Svobodová

Předmětem restaurování byly pravěké nádoby lužické kultury, pocházející ze záchranného archeologického výzkumu na obchvatu Chrudimi z roku 2012. Nádoby byly nalezeny na nejlépe prozkoumaném nalezišti Vestec II. Jednalo se o okřín s oblým lomem, u něhož byla nalezena mísa sloužící k překrytí urny a okřín s ostrým lomem a rýhovanou výzdobou. Střepový materiál byl převzat ve formě „*in situ*“, ve výplni okřínu s oblým lomem byly nalezeny zbytky kostí a bronzová jehlice. Nádoby byly odpreparovány od výplně a byla provedena rekonstrukce s odebráním vzorků pro analýzy střepové hmoty. Veškeré zákroky byly provedeny v souladu s etikou restaurování za použití reverzibilních materiálů.

Sekce : Restaurování skla a keramiky

Rekonzervace souboru renesančního archeologického skla z Bratislavy

Autor: Dominika Lukšíčková
Ročník: B4
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Dr. Ing. Dana Rohanová

Soubor renesančního skla datovaný do 15. - 16. století pochází z archeologického výzkumu, který proběhl v roce 2001 v ulici Ventúrska 3, v Bratislavě. Číše, miska a torza číšek s filigránem byly v minulých letech již restaurovány, ale z důvodu nedostatečné soudržnosti, žloutnutí a degradace lepidel byla nutná jejich konzervace. Zjištění chemického složení, identifikace korozních vrstev skla a určení typologie těchto předmětů bylo dalším cílem práce. K identifikaci povrchových vad byla použita metoda optické mikroskopie a k určení prvkového složení skla a korozních vrstev skla elektronová mikroskopie (SEM/EDS). Z výsledků analýz vyplynulo, že se v tomto souboru vyskytují jak skla sodno-vápenatá, produkovaná v jižní Evropě (Benátky) tak i skla draselno-vápenatá, vyrobená ve střední Evropě (Čechy a Morava?).

Sekce : Restaurování skla a keramiky

Restaurování skleněného poháru s mincemi

Autor: Miroslava Špačková
Ročník: B4
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Zuzana Zlámalová Cílová, Ph.D.; Aranka Součková Daňková;
Ing. Klára Drábková

Předmětem restaurátorského zásahu byl skleněný pohár ve tvaru renesančních kovových pohárů. Ve spodní rozšířené části kupy předmětu jsou natavená očka, v kterých jsou zavěšeny mince (jedna mince při převzetí předmětu chyběla). V rámci restaurátorského průzkumu bylo studováno chemické složení skla metodou XRF a složení jednotlivých mincí metodou SEM/EDS. Na základě průzkumu byl navržen restaurátorský záměr navrhuující jednotlivé kroky zásahu. Vzhledem k možnosti demontáže mincí z poháru bylo sklo poháru i mince čištěny odděleně. Materiálové ztráty skleněného poháru byly doplněny a byla vytvořena i jedna kopie mince z epoxidové pryskyřice (pro doplnění celistvosti předmětu k výstavním účelům). Vzhledem ke snadné odnímatelnosti mincí, může být tato kopie kdykoliv z předmětu odstraněna.

Sekce : Restaurování textilu

Restaurování plesového vějíře

Autor: Helena Bradáčová
Ročník: B4
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Klára Drábková; Bc. Jana Bureš Víchová, DiS.

Plesový vějíř z Muzea hlavního města Prahy byl restaurován v rámci semestrální práce na VŠCHT Praha. Vějíř je datován na přelom 19. a 20. stol.

Bílý vějíř sestává z tkaniny nalepené na dřevěná žebra. Tkanina je v horní části zdobena našitou strojovou paličkovanou krajkou a v dolní části úzkým prýmkem. Na tkanině je namalován stylizovaný růžový květinový motiv, zdobený výšivkou kovovými flitry.

Byl proveden umělecko-historický průzkum, textilně technologický rozbor a identifikace adheziva infračervenou mikrospektroskopií.

Vzhledem k poškození tkaniny vějíře bylo přistoupeno k podlepení a list musel být demontován z žebířů vějíře. Pro podlepení tkaniny byly zkoušeny jako podpůrný materiál hedvábná krepelína Usavelon a japonský papír a různá adheziva. Nejvhodnější pro podlepení tkaniny vějíře se ukázal Klucel G (hydroxypropylcelulóza), aplikován přímo za mokra na krepelínu.

Chybějící část žebra byla doplněna zadavatelem z lipového masivu a barevně sladěna. Krajky byly demontovány a prány ve vodní lázni s detergentem Syntaponem L, důkladně propláchnuty s posledním proplachem v destilované vodě. Sušeny naplocho s vypíchanými pikotkami. Po zpětném přišítkování krajek ke tkanině vějíře byl list přilepen k žebřím 8% roztokem Klucelu G ve vodě.

Sekce : Restaurování textilu

Konzervování nosítek ze sbírek Pražského hradu

Autor: Aneta Dušková

Ročník: B2

Ústav: Chemické technologie restaurování památek

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

Konzervování nosítek bylo provedeno v Restaurátorských dílnách Pražského hradu. Cílem zásahu bylo připravit nosítka na výstavu „Zapřažená krása“ (20. 8. – 19. 10. 2014). Nejprve byl proveden podrobný materiálový a textilně technologický průzkum. Na základě výsledků průzkumu pak bylo přistoupeno ke konzervování jednotlivých částí nosítek. Čalouněný interiér byl čištěn dvěma typy čisticích prostředků (Perlozou a Tepurem), u nichž byl porovnán výsledek čištění. Během čištění se velmi osvědčila houba Wallmaster, která má široké využití. Zvláštností byly dva nalezené kusy tkaniny v sedáku.

Sekce : Restaurování textilu

Restaurování hedvábných svatebních střevíčků

Autor: Andrea Malinovská

Ročník: B3

Ústav: Chemické technologie restaurování památek

Školitel: Bc. Jana Bureš Víchová, DiS., restaurátorka s licencií MK ČR

Restaurování hedvábných svatebních střevíčků proběhlo v roce 2013 v rámci Semestrálních prací II a III v restaurátorských dílnách VOŠTŘ, Praha 1, U Půjčovny 9. Jedná se o pár ručně šitých bot typu slipry (balerínky, piškoty) datovaných kolem poloviny 19. století. Střevíčky jsou ušity ze vzorované hedvábné textilie krémové barvy s rostlinnými a geometrickými motivy a podšity textilií z lýkových vláken. Na nártu každé z bot je mašle krémové barvy tvořená ze čtyř smyček. Stélky, patěnky a podešve jsou vyrobeny z usní.

Střevíčky byly nejprve čištěny mechanicky pomocí vysavače s jemným odtahem. Mašle byly demontovány a čištěny mokrou cestou ve vodní lázni Syntaponu L, usušeny a vyrovnány restaurátorskou špachtlí. Svrchní tkanina a dostupné části podšívky byly čištěny houbou Wallmaster. Patěnky a stélky byly čištěny 1% roztokem ALVOL OMK aplikovaným ve formě pěny, odstávající části stélek byly přilepeny 20% kožním klijem. Uvolněné a flotující nitě svrchní tkaniny byly přišity k podšívce, větší dírký od hmyzu na svrchní tkanině byly podloženy plombami z hedvábné tkaniny a zajištěny skeletovacím stehem. Mašle byly po čištění naaranžovány a přišity na původní místo. Do bot byly vytvořeny vhodné vycpávky a následně byly uloženy do krabice z pH neutrálního kartonu.

Sekce : Restaurování textilu

Soubor fragmentů textilií z archeologického nálezu **Salmovský palác**

Autor: Dominika Nagyová
Ročník: B3
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.

Práce pojednává o konzervování fragmentů z archeologického výzkumu v Salmovském paláci z roku 2009 (majitel: Správa Pražského hradu). Fragmenty jsou datovány do poloviny 17. století – 1. poloviny 20. století. Jedná se o menší kusy převážně vlněných (ojediněle hedvábných) tkanin a pletenin. Postup konzervování byl započat mikrobiologickým průzkumem a dezinfekcí. Následovalo čištění mokrou cestou v podobě několikanásobných proplachů, čímž byly odstraněny nánosy hlíny i dezinfekční prostředek. Po čištění byly fragmenty sušeny ve vodorovné poloze na vypnuté síti a podle potřeby byly některé fragmenty dodatečně vyrovnány studenou parou ultrazvukového zvlhčovače. Dále byl proveden textilně-technologický průzkum (identifikace vláken optickou mikroskopií, dostava v osnově a útků, u pletenin hustota oček, rozměry fragmentů atd.), technická a fotografická dokumentace. Soubory byly vloženy do polyethylenových sáčků po více kusech dle vazeb a vloženy do krabic z pH neutrálního papíru. Doporučené podmínky expozice a depozice byly zvoleny podle obecných požadavků pro textilní materiály.

Sekce : Restaurování textilu

Restaurování křestního čepečku

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

Restaurování čepečku proběhlo v akademickém roce 2013/2014 v rámci předmětu Semestrální práce. Čepeček je zhotoven z krémové hedvábné tkaniny, podšívka je rovněž hedvábná. Čepeček je zdobený kovovou výšivkou a krajkou a obsahuje několik vrstev lněných výstužných materiálů. Bylo nutné přichytit uvolněnou výšivku, zaskletovat drobné perforace ve vrchní tkanině a podložit trhliny v podšívce. Čepeček byl čištěn pouze suchou cestou. Během restaurování byl předmět fotodokumentován a na závěr byly doporučeny vhodné podmínky uložení a expozice.

Sekce : Restaurování textilu

Restaurování dámské zástěry

Autor: Bc. Kateřina Pavlasová
Ročník: B4
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Bc. Jana Bureš Víchová, Dis., Ing. Markéta Škrdlantová Ph.D.

Dámská pasová zástěra přírodní bílé barvy z majetku VŠCHT Praha, byla restaurována v rámci semestrální práce na Vyšší odborné škole textilních řemesel a střední umělecké škole textilních řemesel v Praze.

Před restaurováním byla provedena fotodokumentace, historický průzkum a textilně technologický průzkum. Na základě výsledků průzkumu byl sestaven postup restaurování.

Zástěra byla bělena vodným roztokem tetrahydridoboritanu sodného, sušena a žehlena. Poté byla zástěra celoplošně zpevněna – podložena krepelínou přišitou předním stehem. Následovala konsolidace drobných poškození – přišití odpárané krajky, podložení a obkroužkování vázací stuhy, lokální vložení krepelíny do pasového límce, přichycení pasového límce, skeletování vypadaných útkových nití, přišití vytrženého rohu kapsy, povolení (vypárání) původní opravy s následným skeletováním (z důvodu autentičnosti bylo několik původních oprav ponecháno).

Na závěr byl předmět adjustován, a byly navrženy vhodné podmínky uložení a expozice.

Sekce : Restaurování textilu

Konzervování výšivky

Autor: Markéta Riegerová
Ročník: B4
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Bc. Jana Bureš Víchová, Dis., Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.

Konzervování hedvábné výšivky proběhlo v rámci semestrální práce v akademickém roce 2013/2014. Výšivka pochází ze sbírek Muzea hlavního města Prahy a svou datací spadá do 1. poloviny 19. století. Výšivka byla podrobena textilně-technologickému rozboru. V rámci konzervátorského zásahu byla výšivka odlepena od kartonové desky, čištěna na vakuovém stole a vyrovnána pomocí vyhřívané restaurátorské špachtle. Výšivka byla adjustována do pasparty z nekyselého kartonu a melinexové fólie.

Sekce : Restaurování textilu

Možnosti adjustace v restaurování textilu

Autor: Michaela Ševčíková
Ročník: B3
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Bc. Jana Bureš Víchová, Dis., Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D., Bc. Lucie Radoňová

Práce se zabývá možnostmi uložení předmětů z textilních materiálů. Každý předmět je jedinečný, a proto je nutné zhodnotit jeho specifika, na jejichž základě lze vytvořit vhodnou adjustaci. Práce představuje několik konkrétních příkladů a to:

1. vytvoření paspart pro ploché archeologické textilní fragmenty
2. vytvoření paspar pro 3D archeologické textilní fragmenty
3. vytvoření krabice s podstavcem pro sokolský čepec

Práce probíhaly v rámci semestrální práce IV. v dílnách Správy Pražského hradu a v rámci letní praxe 2012/2013 v restaurátorských dílnách Muzea hlavního města Prahy.

Sekce : Restaurování textilu

Soubor fragmentů usní z archeologického nálezu Salmovský palác – odpadní jímka (druhá část)

Autor: Mgr. Michaela Závadská
Ročník: B2
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Bc. Jana Bureš Víchová, DiS., Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.

Konzervování druhé části fragmentů usní a textilií, vyzvednutých při záchranném archeologickém výzkumu Salmovského paláce, provedl v roce 2014 kolektiv studentek VŠCHT Praha v rámci předmětu „Semestrální práce II“. Značně poškozené a vyschlé fragmenty usní byly znečištěny, deformovány a mikrobiálně napadeny. Usně byly nejprve desinfikovány. Čištění, měkčení a sušení usní bylo přizpůsobeno míře jejich poškození. První skupina fragmentů byla ošetřena pomocí opakovaných buničinových zábalů se 75% isopropylalkoholem s přídatkem 1% glycerinu. Druhá skupina byla čištěna pomocí aktivní pěny 1% roztoku Flavolu (vodný roztok kokosdimethylaminoxidu). Třetí skupina byla čištěna v lázni demineralizované vody. Odstranění přebytečné vlhkosti a měkčení fragmentů druhé a třetí skupiny zajistil čtrnáctidenní ponor do 30% lázně glycerinu v etanolu. Byl proveden rozbor a technická dokumentace usní. Na základě získaných poznatků byly navrženy podmínky pro expozici a deponování. Fragmenty byly po skupinách vloženy do PE sáčků a společně pak umístěny do krabice z nekyselého kartonu.

Sekce : Technologie restaurování anorganických nekovových materiálů

Studium složení a projevů koroze archeologických skel z jižní Moravy

Autor: Bc. Alena Csöszová
Ročník: M2
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Dr. Ing. Dana Rohanová

Cílem práce bylo prozkoumat chemické složení a projevy koroze na souboru vzorků archeologického skla z hlediska makroskopického i mikroskopického pozorování (optický mikroskop) a metodami prvkové analýzy (XRF a SEM-EDS). Vzorky skla pocházely ze záchranného archeologického výzkumu odpadních jímek z Kroměříže, Mikulova a Veselí nad Moravou. Vzorky skel byly většinou datovány do konce 16. stol. - začátku 17. stol. Na vzorcích byly pozorovány prakticky všechny projevy koroze a to iridiscence, exfoliace, matnění, důlková koroze, druhotné znečištění železitými usazeninami a precipitace korozních produktů.

Analýzy ukázaly, že většina skel byla draselno-vápenatých, tedy domácí provenience. Kromě gotického skla z Veselí nad Moravou datované do 2. pol. 13. stol, byla skla vyrobena renesanční a některé i pokročilou barokní technologií (bez přídavku bukového popela). Zajímavé bylo, že typologicky prokazatelně barokní poháry a džbány z Kroměříže (datovány do 2. pol. 17. stol. až počátku 18. stol.) byly vyrobeny, v té době již zastaralou, gotickou technologií. Tomu odpovídalo i výrazné zkorodování nádob (totální vylouhování alkalických složek z objemu skla), stejné, jako jsme pozorovali na gotickém skle z Veselí nad Moravou.

Sekce : Technologie restaurování anorganických nekovových materiálů

Vliv různých abrazivních materiálů na povrch skla

Autor: Bc. Kateřina Kočí
Ročník: M1
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Zuzana Zlámalová Cílová, Ph.D

Mechanické metody čištění skla, konkrétně pomocí abrazivních materiálů, nejsou v restaurátorské praxi příliš běžné. Přesto byly využity při posledním zásahu na mozaice Posledního soudu na katedrále sv. Víta v Praze. Cílem této práce bylo zjistit, zda je vhodné opakovaně používat otryskávání povrchu skla za účelem odstranění korozních vrstev. Rovněž byl studován vliv chemického složení abrazivních materiálů i samotných vzorků v souvislosti s vlastnostmi skla. Pro experimentální práci byly použity dva typy abrazivních materiálů (Crushed glass a balotina) o různých velikostech a čtyři typy vzorků skla; dva typy sodno-vápenatého skla (A a B) a modelové sklo olovnaté a draselno-vápenaté. Vzorky skel byly charakterizovány metodami XRF, OM a SEM a po otryskání byly zkoumány jejich vybrané vlastnosti. Na základě získaných výsledků byla modelová skla otryskána materiálem Crushed glass. Rovněž byla měřena drsnost povrchu a mikrotvrdost vzorků. Jako nejvhodnější z abrazivních materiálů bylo vyhodnoceno Crushed glass (64 μm), avšak ani tento materiál není vhodný pro odstraňování korozních produktů na skle (konkrétně na mozaice Posledního soudu na chrámu Sv. Víta v Praze), neboť ani u něj není splněna základní podmínka otryskávání a to, že otryskávací materiál by měl vykazovat nižší tvrdost, než materiál otryskávaný.

Sekce : Technologie restaurování anorganických nekovových materiálů

Konsolidace pískovců modifikovanýchmi organokřemičitany

Autor: Bc. Jan Krejčí
Ročník: M2
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: doc. Ing. Petr Kotlík, CSc.; Ing. Adéla Peterová

Jedním ze zásadních problémů při použití organokřemičtanů (esterů kyseliny křemičité) pro konsolidaci anorganických stavebních materiálů je praskání výsledného gelu oxidu křemičitého. Praskání, ke kterému dochází vlivem vnitřního napětí vzniklého v důsledku odparu reakčních produktů, lze zabránit přidávkou nanočástic. Práce se zabývá konsolidací dvou nejobvyklejších druhů pískovců (Hořícký, Božanovský) modifikovanýchmi organokřemičitany. Jako konsolidační prostředek byl použit oligomerní tetraethoxysilan (Dynasylan 40) katalyzovaný dibutylcindiacetátem (DBCDA). Směsi byly modifikovány přidávkou 0; 5 a 10 hm. % nanočástic SiO₂ (60-70nm).

Sekce : Technologie restaurování anorganických nekovových materiálů

Hodnocení skleněných předmětů vykazujících tzv. crizzling

Autor: Kateřina Mlsnová
Ročník: B3
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Zuzana Zlámalová Cílová, Ph.D.

Poškození v důsledku koroze skla může mít mnoho podob a jedním z nich je crizzling. Tento termín označuje síť prasklin v povrchu předmětu, doprovázenou odlupováním šupinek zkorodovaného skla - tak dochází ke ztrátě materiálu až celkovému rozpadu předmětu.

Tento jev je popisován hlavně u sodno-draselných skel z období baroka, ale můžeme jej nalézt i na předmětech z období mladších např. 19. století.

Práce se zabývá dokumentací stavu předmětů se známkami crizzlingu a to především pomocí optické mikroskopie. Na základě výsledků optického pozorování a odborné literatury jsou předměty zařazeny do skupin podle různé míry prokorodování a tedy ohrožení. Dále jsou studovány korozní produkty na povrchu skla metodou SEM/EDS a XRD. Předměty jsou čištěny destilovanou vodou a celý proces je kontrolován. Výsledky analýz získaných roztoků doplňují údaje o složení korozních produktů. Podle získaných informací budou doporučeny postupy čištění pro restaurátorskou praxi a navrženy podmínky uložení předmětů.

Sekce : Technologie restaurování anorganických nekovových materiálů

Vliv přídavku plastifikátoru na malty s románským cementem

Autor: Magdaléna Nováková
Ročník: B3
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Michal Novák, Ph.D.

Přídavkem plastifikátoru do maltové směsi je možné zlepšit její zpracovatelnost, případně při zachování stejné zpracovatelnosti snížit nezbytné množství záměsové vody. To by se mělo kladně projevit na vlastnostech připravených vzorků.

Práce se zabývá vlivem přídavku plastifikátoru na maltovou směs vhodnou k doplňování kamene, kde pojivem je románský cement a vápenný hydrát v hmotnostním poměru 3:1. Byly připraveny tři směsi s přídavkem různých typů komerčních plastifikátorů a směs bez přídavku plastifikátoru. U připravených směsí byla provedena rozlivová zkouška. Poté byly připraveny vzorky a ponechány ke zrání po dobu 1 měsíce. Na stárnutých vzorcích budou následně provedeny mechanické zkoušky, bude stanovována odolnost vůči krystalizaci solí, paropropustnost a další vlastnosti. Cílem práce je určit, zda se vlastnosti směsí s plastifikátorem významně liší od směsi bez přídavku plastifikátoru.

Sekce : Technologie restaurování anorganických nekovových materiálů

Germánská pec z Obříství

Autor: Karolína Pánová
Ročník: B3
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Alexandra Kloužková, CSc.

Práce se zabývá charakteristikou nálezu germánské keramické pece s fragmenty střepů z obce Obříství z archeologického průzkumu z roku 2011. Velké množství velmi různorodých keramických střepů (více než 300 kusů), které pocházely z mnoha kusů nádob, bylo nalezeno v zásypu germánské pece. Byla provedena charakteristika vybraných střepů podle vzhledu, případné dekorace, parametrů střepových hmot (měření nasákavosti, objemové hmotnosti), chemického a mineralogického složení (XRD, XRF) a barevnosti (reflexní spektrofotometrie). Následně bylo provedeno hodnocení chemického a mineralogického složení jednotlivých vrstev samotné pece. Výsledky mineralogických analýz byly porovnány s geologickým charakterem okolí místa nálezu.

Sekce : Technologie restaurování anorganických nekovových materiálů

Vliv oxidačně-redukčních podmínek na barevnost kopií historického vitrážového skla

Autor: Bc. Kristýna Rysová
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Dr. Ing. Martin Míka

Cílem práce je určení vlivu oxidačně-redukčních podmínek během tavby na výslednou barevnost kopií historických vitráží z kostela sv. Bartoloměje v Kolíně z 2. poloviny 14. století. Byly připraveny kopie skel dle chemického složení původních vitráží. Nejprve byla skla utavena za oxidačních podmínek, kdy ale barevnost kopií neodpovídala barevnosti původních skel. Proto byly kopie modrého skla utaveny znovu při postupné změně oxidačně-redukčních podmínek. Redukční podmínky se zajišťovaly zvyšováním množství uhlíku, který byl přidáván do sklářského kmene v množství 2 a 6 hmot.%. Rovněž byl měněn průběh tavení skla, kdy k dosažení vysoce redukčních podmínek se kmen vložil do kelímku najednou na začátku tavby a nebyl míchán. Kelímek byl přikryt víčkem. Tak se zabránilo přístupu kyslíku k tavenině. Tímto postupem byla při přidání 6 hmot. % uhlíku do kmene připravena kopie modrého vitrážového skla o požadované barvě.

Sekce : Technologie restaurování anorganických nekovových materiálů

Tmely pro doplňování pískovce

Autor: Bc. Olga Tomanová
Ročník: M2
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Michal Novák, Ph.D.

Jako románský cement jsou označovány nízkopálené přírodní cementy, které se během 19. století rozšířily po celé Evropě. Obliba románského cementu úzce souvisela se stavením rozmachem ve velkých městech jako je Vídeň, Berlín nebo Praha. Toto hydraulické pojivo se vyznačuje rychlou dobou tuhnutí, které umožňuje využití na různé dekorativní prvky fasád. Pro románský cement je také charakteristická jeho příjemná okrová barva a malty z něj mají vysokou pevnost, tvrdost a houževnatost. Na počátku 20. století se stal oblíbenější portlandský cement a románský cement postupně upadal v zapomnění. Proto nejsou dnes jeho vlastnosti zcela probádané a pro jeho bezpečné využití v památkové péči je třeba se jim věnovat.

V této práci jsou použity tmely na bázi románského cementu pro doplnění pískovce. Porovnávány jsou směsi s různou granulometrií; hrubší pro doplňování větších objemů a jemnější pro menší povrchové opravy. Jako plnivo je užít barevně neutrální Sklopísek Střepeč a kopaný písek ze Zahrádek u České Lípy. U připravených vzorků budou zkoumány mechanické vlastnosti, paropropustnost, odolnost vůči krystalizaci solí a další vlastnosti významné z hlediska použití těchto malt pro doplňování pískovce.

Sekce : Technologie restaurování organických materiálů

Vplyv odkyslenia papiera na stabilitu akvarelov

Autor: Bc. Zuzana Bodíková
Ročník: M2
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: doc. Dr. Ing. Michal Ďurovič

Pri konzervovaní a reštaurovaní papiera sa ako jeden z postupov spomalenia degradácie materiálu používa odkyslenie papiera. Odkysľovací prostriedok však prichádza do kontaktu nielen s podkladovým materiálom, ale aj s farebnou vrstvou tvoriacou obraz.

Cieľom práce bolo zhodnotiť vplyv odkysľovacích prostriedkov (MMMK, Bookkeeper, hydrogénuhličitan horečnatý a vápenatý) na pigmenty a papiere používané pre akvarel, pomocou vyhodnotenia celkovej farebnej diferencie ΔE^* vo farebnom priestore CIELab a porovnaním UV-VIS spektier. Diskutované boli pigmenty Pruská modrá a Brazílske drevo na ručnom a drevitom papieri.

Všetky odkysľovacie prostriedky upravili pH do optimálnej oblasti, avšak vo všetkých prípadoch došlo k zmene farebnosti, či už po samotnom odkyslení alebo po umelom starnutí pri 80°C a 65 % RH po dobu 30 dní. Vo väčšine prípadov bola táto zmena významná ($\Delta E^* = 1,5-3,0$) a veľmi významná ($\Delta E^* = 3,0-6,0$), v niektorých prípadoch až veľmi silná ($\Delta E^* = 12$ a viac).

Z toho vyplýva, že všetky odkysľovacie prostriedky stabilizujú papierovú podložku, avšak negatívne ovplyvňujú výslednú farebnosť výtvarného diela.

Sekce : Technologie restaurování organických materiálů

Vlastnosti pružných tmelů

Autor: Bc. Tereza Horáková
Ročník: M1
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Vítězslav Knotek, Ph.D., Ing. Irena Kučerová, Ph.D., Ing. Adéla Peterová, Bc.

Jednou skupinou používaných stavebních tmelů jsou pružné tmely na bázi polymerů. Tyto tmely jsou díky své elasticitě schopny měnit tvar a rozměry, aniž by se prasklina jimi zatmelená stala netěsnou.

V této práci byly testovány hybridní jednosložkové pružné tmely, které by mohly být vhodné pro tmelení pohyblivých prasklin na památkách v exteriéru. Pro srovnání byly současně testovány tmely silikonové. Byly sledovány aplikační vlastnosti tmelů, vliv simulovaných podmínek umělého stárnutí na stabilitu vzorků tmelů nanesených na skleněnou nebo cementovou podložku a ovlivnění cementového materiálu v důsledku aplikace tmelící hmoty.

Sekce : Technologie restaurování organických materiálů

Biocidy na bázi nanostříbra – účinnost a vliv na hedvábí

Autor: Bc. Jan Krejčí
Ročník: M2
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.; Ing. Klára Drábková

Jednou z možností jak chránit památkové objekty před biologickým napadením nebo likvidovat biologické napadení je použití nanosuspenzí stříbra. Nanosuspenze stříbra lze připravit redukcí z roztoku dusičnanu stříbrného (borohydridem či redukujícími cukry) nebo elektroliticky. Práce zkoumá biocidní účinek nanosuspenzí stříbra na tři druhy plísní - Cladosporium, Aspergillusniger, Penicilliumbrevicompactum. Dále se věnuje vlivu těchto prostředků na degradaci hedvábí. Byly testovány nanosuspenze stříbra o různých koncentracích připravené redukcí borohydridem sodným nebo xylózou a komerční nanosuspenze stříbra připravená elektroliticky.

Sekce : Technologie restaurování organických materiálů

Umělé stárnutí celulózových a lignocelulózových materiálů

Autor: Martina Nováková
Ročník: M1
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: doc. Dr. Ing. Michal Ďurovič

Podstata umělého stárnutí spočívá v úpravě podmínek prostředí, kterému je vzorek exponován, tak, aby se dlouhodobý proces degradace materiálu uspíšil. Práce studuje vliv různých metod umělého stárnutí na vybrané mechanické, chemické a optické vlastnosti vzorků ručního a strojního dřevitého papíru. Umělé stárnutí bylo provedeno 5 způsoby, a to suchým teplem při teplotě 105 °C, dále při teplotě 80 °C za 7% relativní vlhkosti, vlhkým teplem při 80 °C za 65% relativní vlhkosti, vystavením vzorků atmosféře NO₂ a světelným stárnutím UV-A zářením. Měřeno bylo tržné zatížení, tržná délka, tažnost, odolnost proti přehýbání, hodnota pH studeného výluhu papíru, parametry barvového prostoru CIE $L^*a^*b^*$, reflektance, vypočten byl poměrový faktor K/S a dekolorační číslo. Na obou vzorcích celulózových a lignocelulózových podložek byla vyhodnocována jejich odolnost proti stárnutí.

Vliv alkalické rezervy v lepence na korozní agresivitu vůči olovu

Autor: Kristýna Strachotová
Ročník: M1
Ústav: 148
Školitel: Ing. Milan Kouřil, Ph.D.

Zhoršující se stav olověných předmětů uložených v depozitářích muzeí (za regulovaných podmínek) je výsledkem tzv. nemoci olova. Tento jev je způsoben citlivostí olova na těkavé organické sloučeniny (VOC), které jsou do atmosféry depozitáře uvolňovány degradací organických materiálů (zejména obalovými materiály, které jsou olověnému předmětu nejbližší) a projevuje se vznikem korozních produktů, které mají formu bílého nepřílnavého prášku a nemají tedy ochranný charakter.

Obalové materiály jsou většinou na bázi papíru, jehož hlavní složky jsou celulóza, hemicelulóza a lignin. Procesy degradace papíru jsou dány zejména zvýšenou vlhkostí v materiálu a kyselými látkami v atmosféře (kyselá hydrolýza), oxidačním činidlem atmosférickým kyslíkem (oxidace) nebo světlem (fotodegradace).

Složení a rychlost emise VOC závisí na chemické povaze papíru, stupni a způsobu degradace. Alkalická rezerva pomáhá v papíru vytvořit neutrální až bazické pH vyvažováním kyselého vlivu některých složek obsažených v papíru (plnidla, klíždla, barviva), neutralizuje vzdušné kyselé polutanty (SO_2 , oxidy dusíku atd.) a tím zpomaluje degradaci papíru a snižuje uvolňování VOC do atmosféry.

Vliv ionizačního záření na celulózové a lignocelulózové materiály

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

Ozáření celulózových a lignocelulózových materiálů γ zářením je jednou z možností odstranění jejich biologického napadení. Výhodou této metody je hloubkový a homogenní účinek γ záření a možnost rychlého ošetření velkého množství materiálu. Nevýhodou je riziko významné degradace papíru vlivem příliš vysoké ozařovací dávky.

Tato práce se zabývala vlivem γ záření na vlastnosti vybraných druhů papíru – dřevitého papíru, ručního klíženého papíru a ručního neklíženého papíru. Vzorky papírů byly ozářeny dávkami 2,4; 5,2; 5,9 a 10,9 kGy a následně podrobeny umělému stárnutí (suchým, nebo vlhkým teplem). Byly studovány optické, chemické a mechanické vlastnosti vzorků před ozářením, po ozáření a po umělém stárnutí. Optické vlastnosti (barevnost a reflektivita) byly měřeny u všech druhů papírů. U ručního klíženého a dřevitého papíru bylo měřeno pH studeného výluhu. U ručního neklíženého papíru byl stanovován průměrný polymerační stupeň celulózy. U dřevitého papíru byly sledovány mechanické vlastnosti (tržné zatížení, tržná délka, tažnost, odolnost v přehýbání).

Vlivem záření dochází ke zhoršení některých vlastností papíru (např. mechanických vlastností, poklesu průměrného polymeračního stupně celulózy, změně optických vlastností).

Vliv anorganických solí na dřevo

Autor: Bc. Olga Tomanová
Ročník: M2
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Irena Kučerová, Ph.D.

Mnoho historických krovů bylo ošetřeno protipožárními a biocidními nátěry. Chemikálie, obsažené v těchto přípravcích, způsobily jejich nevratné poškození. Nátěry na bázi amonných solí zapříčinily rozvlákňování povrchové vrstvy dřeva a také korozi kovových komponentů. Rozvlákňování se projevuje dřevěným chmýřím na povrchu dřeva, sníženými hodnotami pH a zvýšeným obsahem vlhkosti u povrchové vrstvy. Mechanismus rozvlákňování není doposud známý, výsledky této práce by měly k objasnění přispět.

V rámci laboratorního projektu byly zkoumány vzorky z krovu Malostranské mostecké věže a z krovu domu na rohu ulice U Půjčovny a Jeruzalémské v Praze. Obě konstrukce byly v minulosti ošetřeny ochrannými nátěry. O vzorků byly stanoveny hodnoty pH vodného výluhu, obsah vlhkosti a obsah popela. U předem přečištěného dřeva byl stanoven obsah ligninu a celulózy. Dále byly využity metody: optická mikroskopie, infračervená spektroskopie a rentgenová difrakce.

Anotace došlé po termínu:

Sekce : Anorganická chemie

Protibalistické keramické materiály připravované plazmovou depozicí

Autor: Bc. Radek Brodil
Ročník: M2
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: doc. Ing. Vlastimil Brožek, DrSc.

Na materiály a technologie používané pro balistickou ochranu jsou kladeny vysoké nároky. A stejně tak, jako se vyvíjí hrozby, vznikají i nové materiály a způsoby jejich uplatnění, zejména za účelem ochrany před projektily s vysokou kinetickou energií.

Porovnávání užité vlastnosti jednotlivých složek kompozitních balisticky odolných materiálů jsou například tvrdost a houževnatost. Ačkoliv jednotlivé mechanické vlastnosti jsou si nepřímo úměrné, je potřeba vhodnou kombinací složek dosáhnout kompozitu jak povrchově tvrdého, tak i odolného lomu a šíření trhlin. To vše pokud možno s co nejnižšími náklady, minimální hmotností a při zachování pohyblivosti chráněné osoby v případě osobní balistické ochrany.

Keramické pancéřové materiály poskytují vyšší hodnoty tvrdosti v porovnání s ocelí použitou v jádrech podkaliberních průbojných střel, určených k překonávání překážek z houževnatých materiálů, jako jsou třeba ocelové pancéřové pláty. Nevýhodou slinutých keramických materiálů byla jejich křehkost, vedoucí k malé odolnosti vůči vícenásobným zásahům a hrubému zacházení. Použitím technologie WSP lze připravit keramické vrstvy s matricí z houževnatého kovu. Při dosažení dobré adheze je kompozit s touto vrstvou tvrdý i houževnatý zároveň.