

Sekce : Anorganická chemie

## **Syntéza bromderivátů grafenu**

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

Grafen a jeho deriváty patří v současnosti mezi nejintenzivněji studované materiály. Bromderiváty grafenu (bromgrafen) mohou sloužit v důsledku vysoké reaktivity C-Br vazby jako důležitý výchozí materiál pro další syntézy chemických derivátů grafenu.

Zavádění C-Br vazeb do struktury grafenu bylo prováděno za pomoci činidel známých pro standardní organické reakce ( $\text{Br}_2$ , HBr a  $\text{Br}_2/\text{Fe}$ ). Jako výchozí látka pro syntézu byl použit oxid grafitu připravený Hofmanovou a Hummersovou metodou. Syntéza byla prováděna za atmosférického tlaku pod refluxem reakčního činidla (5 hodin) a za vysokého tlaku v autoklávu ( $240\text{ }^\circ\text{C}/5$  hodin). Dva oxidy grafitu byly pro syntézu bromgrafenu použity z důvodů studia vlivu chemického složení oxidu grafitu na stupeň bromace připraveného bromgrafenu.

Syntetizované materiály byly studovány množstvím charakterizačních technik. Morfologie byla studována pomocí skenovací elektronové (SEM) a skenovací transmisní mikroskopie (STEM) a metodou AFM. Chemické složení bylo zjišťováno pomocí elementární spalovací analýzy, fotoelektronové spektroskopie (XPS) a. elektronové mikrosondy. Struktura připraveného materiálu byla dále charakterizována rentgenovou difrakcí a Ramanovou spektroskopií. Tepelná stabilita byla charakterizována vysokoteplotní Ramanovou spektroskopií a termickou analýzou.

Sekce : Anorganická chemie

## **Diazotace grafienu – příprava halogenderivátů**

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

Grafen je tvořen hexagonální sítí uhlíkových atomů spojených  $\text{sp}^2$  vazbami. Tento materiál vykazuje množství mimořádných elektrických, optických a mechanických vlastností. Díky mnoha unikátním vlastnostem může být v aplikacích od elektrochemických senzorů a mikroelektronických součástek až po kompozitní materiály.

Grafen tvořený sítí  $\text{sp}^2$  hybridizovaných atomů uhlíků vykazuje relativně nízkou reaktivitu. Pro zavedení funkčních skupin je nutné použít vysoce reaktivních sloučenin, jako jsou diazoniové soli aromatických sloučenin. Pro syntézu byl použit grafen získaný redukcí oxidu grafitu pomocí chemické redukce ( $\text{N}_2\text{H}_4$ ), termické redukce ( $\text{N}_2/\text{H}_2$  atmosféra) a plazmochemické redukce (mikrovlnné  $\text{H}_2$  plazma). Pomocí reakce grafenu s diazoniovou solí byly na grafen zavedeny různé funkční skupiny ( $-\text{NO}_2$ ,  $-\text{N}(\text{CH}_3)_2$ ,  $-\text{SO}_3\text{H}$ ,  $-\text{F}$ ,  $-\text{Cl}$ ,  $-\text{Br}$  a  $-\text{I}$ ). Modifikované vzorky grafenu byly charakterizovány pomocí SEM a AFM. Stabilita koloidních suspenzí modifikovaného grafenu byla měřena pomocí dynamického rozptylu světla zeta potenciálu. Strukturní a chemické vlastnosti byly měřeny pomocí Ramanovy spektroskopie, Fotoelektronové spektroskopie a elementární spalovací analýzy. Elektrochemické vlastnosti byly studovány pomocí cyklické voltametrie.

Sekce : Anorganická chemie

## **Hydrogenace oxidu grafitu nascentním vodíkem**

Autor: Alena Libánská  
Ročník: B2  
Ústav: Anorganické chemie  
Školitel: doc. Ing. Zdeněk Sofer, Ph.D.

Grafen a jeho hydrogenovaná modifikace – grafan jsou v současnosti intenzivně studované materiály. Při vytvoření C-H vazby na povrchu grafenu dochází k plynulé změně pásové struktury a zvýšení energie zakázaného pásu až po 3,4 eV pro čistý grafan. Vodíkem modifikovaný grafen je neobyčejně perspektivní materiál pro aplikace v mikroelektronice a optoelektronice.

Hydrogenace oxidu grafitu nascentním vodíkem je založena na reakci kovu se suspenzí oxidu grafitu v kyselině (případně hydroxidu). Uvolňující se vodík je extrémně reaktivní, přičemž dochází k redukci funkčních skupin na povrchu oxidu grafenu (karboxylové, epoxidové a ketonické skupiny). Při redukci dochází také k částečné hydrogenaci povrchu oxidu grafenu.

Syntetizovaný materiál byl charakterizován pomocí AFM, SEM a STEM. Chemické složení bylo studováno pomocí infračervené spektroskopie, fotoelektronové spektroskopie a elementární spalovací analýzy. Struktura syntetizovaného materiálu byla charakterizována pomocí Ramanovy spektroskopie a rentgenové difrakce. Přítomnost C-H vazby byla prokázána pomocí FT-IR spektroskopie a použitím deuteriem značených chemikálií s následným využitím jaderných analytických metod pro určení poměru vodíku a deuteria (RBS).

Sekce : Anorganická chemie

## **Syntéza grafenu redukcí CO<sub>2</sub> a jeho charakterizace**

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

Grafen má díky svým unikátním vlastnostem široké pole aplikací v oblasti elektrochemických senzorů, baterií a superkapacitátorů. Mezi nejdůležitější výjimečné vlastnosti patří vysoká elektrická vodivost, velký měrný povrch a rychlý heterogenní transfer elektronů z okolního prostředí. Obvyklými metodami přípravy těchto materiálů jsou tzv. "top-down" metody založené na oxidaci grafitu a následné exfoliaci a redukci oxidu grafitu.

Prezentovaná práce se zabývá syntézou grafenu pomocí redukce CO<sub>2</sub> za použití elektropozitivních prvků při vysoké teplotě (Li, Mg). Morfologie grafenu byla studována pomocí skenovací elektronové a skenovací transmisní mikroskopie. Struktura byla studována pomocí rtg. difrakce, Ramanovy spektroskopie a transmisní elektronové mikroskopie kombinované s elektronovou difrakcí (TEM/SAED). Syntetizovaný materiál vykazuje vysokou čistotu zejména s ohledem na koncentrace přechodných prvků obvykle přítomných v grafenu syntetizovaném "top-down" metodami. Nízká koncentrace kovových nečistot má zásadní vliv na elektrochemické vlastnosti. Pro studium elektrochemických vlastností byla použita metoda cyklické voltametrie s využitím různých redoxních sond jako hexakyanoželezitanový ion, hydrazin, hydrazinový ion a hydrazin.

Sekce : Anorganická chemie

## **Vliv žíhání na vlastnosti tenkých vrstev** **Er<sup>3+</sup>/Yb<sup>3+</sup>:LiNbO<sub>3</sub> připravených metodou sol-gel**

Autor: Dana Mikolášová  
Ročník: M2  
Ústav: Anorganické chemie  
Školitel: Ing. Kateřina Rubešová, Ph.D.

Byly připraveny tenké vrstvy LiNbO<sub>3</sub> dopovaného 0.5 mol% Er<sup>3+</sup> a 0.5 mol% Yb<sup>3+</sup> nanášením metodou spin-coating na safírové substráty (0001). Roztoky k nanášení byly připraveny v bezvodém prostředí jako roztoky 2-methoxyethoxidů přítomných kovů ve 2-methoxyethanolu. Vrstvy byly opakovaně nanášeny a zahřívány při 500 °C, kdy se rozkládá organická matrice, ale ještě nedochází k úplné krystalizaci fáze. Krystalizace byla prováděna buď na vzduchu, nebo v kyslíkové atmosféře při dvou teplotách - 800 a 1000 °C. Dále byl studován vliv tzv. rapid annealingu s nájezdem 55 °C/s na teplotu 1150 °C. U této metody se navíc srovnávaly vzorky, které předem prošly krystalizací na 800 °C a ty, které se rapidnímu žíhání podrobily přímo po nanášení spin-coatingem.

Při všech metodách krystalizace byly připraveny polykrystalické vrstvy krystalograficky orientované podle použitého substrátu bez přítomnosti sekundárních fází systému Li-Nb-O. Krystalizační teplota měla vliv na přítomnost jiných orientací LiNbO<sub>3</sub>. Na průběh luminiscenčních spekter erbia v IČ oblasti mělo největší vliv použití rapidního žíhání, kdy došlo k řádovému zvýšení intenzity nejsilnějšího lumiscenčního pásu na 1530 nm.

Sekce : Anorganická chemie

## **Oxidace uhlíkových nanotubic – syntéza nanopásků oxidu grafenu**

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

Oxidace uhlíkových nanotubic umožňuje syntézu grafenu a oxidu grafenu s definovanou topologií a získání nanostrukturovaného grafenu v podobě dlouhých pásků. Exfoliované uhlíkové nanotubice jsou perspektivní materiál pro aplikace v mikroelektronice.

Oxidace uhlíkových nanotubic je další možnou metodou vedoucí k získání takzvaného oxidu grafitu, který se dále používá pro syntézu grafenu top-down metodami. Oxidace nanotubiček byla provedena pomocí čtyř základních metod pro syntézu oxidu grafitu. Jednalo se o dvě chlorečnanové metody (Hofmanova - 65%HNO<sub>3</sub>-98%H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>-KClO<sub>3</sub>, Staudenmaierova-98%HNO<sub>3</sub>-98%H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>-KClO<sub>3</sub>) a dvě manganistanové metody (Hummersova -98%H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>-KMnO<sub>4</sub>- NaNO<sub>3</sub>, Tourova- 98%H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, 87%H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>, KMnO<sub>4</sub>). Při této oxidaci dochází k podélnému roztržení nanotubic a vytvoření dvojrozměrné struktury a též k navázání funkčních skupin především hydroxylových, karboxylových a epoxidových na povrch takto vzniklého grafenu. U oxidovaných nanotubic byla zkoumána povrchová struktura pomocí AFM, SEM a STEM. Existence jednotlivých skupin byla zjišťována FT-IR spektroskopií, fotoelektronovou spektroskopií XPS a cyklickou voltametrií. Koncentrace CHO/N byla měřena pomocí elementární spalovací analýzy. Struktura byla zkoumána Ramanovou spektroskopií.

Sekce : Anorganická chemie

## **Syntéza komplexů $\text{Fe}^{3+}$ s ligandy typu Schiffových bází z bezvodých prekurzorů**

Autor: Martin Pižl  
Ročník: B3  
Ústav: Anorganické chemie  
Školitel: Ing. Irena Hoskovicová, CSc.

Jedním z důležitých biogenních prvků je železo, které se může vyskytovat ve formě  $\text{Fe}^{2+}$  a  $\text{Fe}^{3+}$ . Zaměřili jsme se na studium interakce iontu  $\text{Fe}^{3+}$  s ligandy, které jsou podobné látkám v živých organismech. Pro studium byly použity ligandy odvozené od pyridoxal-5-fosfátu (PLP) či pyridoxal hydrochloridu (PL·HCl). Jejich interakcí s aminokyselinami vznikají iminy, tzv. Schiffovy báze. V našem případě jsme se zaměřili na pyridoxyl-alanin (PL-Ala).

Pro zjištění interakce  $\text{Fe}^{3+}$  s PL-Ala jsme použili metodu kontinuálních variací (tzv. Jobova metoda), rozpouštědlem byl methanol. Měření probíhala z neizolovaných i izolovaných Schiffových bází a jako zdroj  $\text{Fe}^{3+}$  byl použit  $\text{FeCl}_3 \cdot 6 \text{H}_2\text{O}$ . Za těchto podmínek se v roztoku tvoří komplex, v němž  $\text{Fe}:\text{L} = 1:2$ . Tento komplex jsme se pokusili izolovat, ale produkt obsahoval více Fe než by odpovídalo stechiometrii. Možnou příčinou nezdaru je přítomnost vody. Proto jsme se rozhodli nahradit  $\text{FeCl}_3 \cdot 6 \text{H}_2\text{O}$  bezvodým prekurzorem. Vybrali jsme  $\text{Fe}(\text{acac})_3$  (**1**) a  $\text{FeCl}_3 \cdot 2 \text{HMPA}$  (**2**). Nejprve jsme sledovali interakce s PL-Ala v methanolu Jobovou metodou. V obou případech jsme zjistili, že dochází k výměně původních ligandů za PL-Ala, poměr  $\text{Fe}^{3+}:\text{PL-Ala} = 1:2$ . Prekurzor (1) a prekurzor (2) jsme následně použili k syntéze komplexu  $\text{Fe}^{3+}$  s PL-Ala.

Sekce : Anorganická chemie

## **Studium fázových rovnováh v systému Bi-Sr-Co-O**

Autor: Jindřich Vítek  
Ročník: M1  
Ústav: Anorganické chemie  
Školitel: prof. Dr. Ing. David Sedmidubský, Ing. Ondřej Jankovský

Pseudobinární systémy Bi-Sr-O a Bi-Co-O jsou známy a popsány, zatímco kompletní popis systému Sr-Co-O dosud v literatuře chybí. Ani kvaternární systém Bi-Sr-Co-O nebyl doposud řádně prozkoumán. Tento systém je zajímavý hlavně tím, že se v něm nachází fáze  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Co}_{1,85}\text{O}_{8-\delta}$ , která je významná díky svým termoelektrickým vlastnostem. Tento směsný oxid kobaltu s misfitovou strukturou je schopen převádět tepelnou energii na elektrickou a tím pádem zvyšovat účinnost různých zařízení, kde dochází k tepelným ztrátám. V tomto kvaternárním systému byly identifikovány další čtyři fáze  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CoO}_{6-\delta}$ ,  $(\text{Bi}_{0,4}\text{Sr}_{0,45}\text{Co}_{0,15})\text{Sr}_2\text{CoO}_{5-\delta}$ ,  $\text{Bi}_{3,7}\text{Sr}_{11,4}\text{Co}_8\text{O}_{28-\delta}$  a  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sr}_{3+x}\text{CoO}_{6-\delta}$ , řada z nich vzniká až za teplot nad  $900^\circ\text{C}$ . Povedlo se tedy připravit čistou fázi  $(\text{Bi}_{0,4}\text{Sr}_{0,45}\text{Co}_{0,15})\text{Sr}_2\text{CoO}_{5-\delta}$  a fázi  $\text{Bi}_{3,7}\text{Sr}_{11,4}\text{Co}_8\text{O}_{28-\delta}$ . Dále se v některých z připravených vzorků objevila i fáze  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sr}_{3+x}\text{CoO}_{6-\delta}$ , tato fáze ale nebyla zatím připravena v čisté formě. Její příprava je předmětem dalšího výzkumu.

Vzorky o různém složení Bi-Sr-Co byly charakterizovány metodou rentgenové difrakce a fázovou analýzou se podařilo identifikovat jednotlivá pole stability v subsolidové oblasti a navrhnout výslednou podobu celého fázového diagramu.

Sekce : Anorganická chemie

## **Studium přípravy a vlastností skel obsahujících kovové nanočástice stříbra**

Autor: Bc. Soňa Vytykáčová  
Ročník: M2  
Ústav: Anorganické chemie  
Školitel: Ing. Blanka Švecová, Ph.D.

Skla obsahující kovové nanočástice mědi, stříbra a zlata byla dříve používána především k dekorativním účelům. Po vynálezu laseru se ukázalo, že tato skla mohou být použita i jako materiály pro nelineární optické členy (např. spínače nebo atenuátory).

V této práci jsem se věnovala studiu vzniku kovových nanočástic stříbra v silikátových sklech. Na základě naší předchozí studie jsem vybrala čtyři typy skel lišících se zejména obsahem jednomocného modifikátoru ( $\text{Na}_2\text{O}$ ). Skla byla dotována metodou iontové implantace nebo iontové výměny. V případě, že bezprostředně po dotaci nedošlo k nukleaci, byla dotovaná skla žíhána. U dotovaných skel byl studován nárůst optické absorpce v UV-VIS oblasti potvrzující přítomnost kovových nanočástic ve skle, pohyb iontu maticí skla a změna fotoluminiscenčních vlastností vypovídajících o oxidačním stavu iontů stříbra v závislosti na použité metodě, podmínkách dotace a složení skla. K nukleaci kovových nanočástic stříbra docházelo nejnázve ve skle BK7, do kterého byla provedena iontová výměna  $\text{Ag}^+ \leftrightarrow \text{Na}^+$  a které bylo dále žíháno.

Tato práce vznikla za přispění grantu GAČR P108/12/G108, SPIRIT č. 227012, programu CANAM a MOBILITY č. 7AMB12AT005.

Sekce : Anorganická technologie

## **Tvarování kryolitu**

Autor: Bc. Vojtěch Galek  
Ročník: M1  
Ústav: Anorganické technologie  
Školitel: Ing. Miloslav Lhotka, Ph.D.

Tvarování částic je v průmyslových technologiích velice důležitou operací. Aglomerační procesy zpravidla vedou kromě zvětšení částic ke zúžení distribuce velikosti částic a využívají prachový podíl, který je obvykle odpadem. Existuje mnoho metod k zvyšování velikosti částic např. vlhká granulace, fluidní granulace, extrudace, tabletizace, peletizace a další. V našem případě byla zvolena vlhká granulace, kde jako pojivo byly použity různé druhy vysokomolekulárních cukrů (alginátů). Jako modelová látka byl použit kryolit,  $\text{Na}_3\text{AlF}_6$ , který byl aglomerován na větší částice. Vlhkou granulací byly vytvořeny sférické částice kryolitu, které pak byly podrobeny síťové analýze. Postupným upravováním parametrů, jako je druh vysokomolekulárního cukru, geometrie dávkovacího zařízení a postup tvarování, byly stabilizovány rozměry částic z prvních provedených pokusů až na požadovanou velikost. Dalším sledovaným parametrem byl způsob promytí vzniklé částice a jeho vliv na spékavost částic. Cílem této práce bylo nalézt optimální podmínky pro vlhkou granulaci modelové látky, kryolitu, a následné použití této metody k tvarování speciálních látek.

Sekce : Anorganická technologie

## **Vysokoteplotní membránové palivové články s různým obsahem platiny na elektrodách**

Autor: Bc. Adam Giurg  
Ročník: M1  
Ústav: Anorganické technologie  
Školitel: Ing. Martin Paidar, Ph.D.

Membránové palivové články jsou známé použitím platinových katalyzátorů a jejich citlivostí na katalytické jedy. Jedním z možných způsobů zvýšení výkonu a zabránění otravě katalyzátoru oxidem uhelnatým je zvýšení provozní teploty nad 160 °C. Zvýšení teploty však vyžaduje použití nových druhů membrán. V této práci byla použita do vysokoteplotních membránových palivových článků membrána PBI (polybenzimidazol).

Tuto membránu jsem dopoval v koncentrované kyselině fosforečné po dobu 6 hodin. Na elektrody jsem impregnační nanosl katalyzátor na bázi platiny. Navážka platiny na elektrodách byla 0,33 mg/cm<sup>2</sup>; 0,59 mg/cm<sup>2</sup> a 1,35 mg/cm<sup>2</sup>. Po sestavení palivových článků s těmito elektrodami jsem měřil zátěžové křivky a impedanční spektra palivových článků při použití čistého kyslíku a vzduchu jako oxidačního činidla. Dále jsem sledoval dlouhodobou degradaci palivového článku v prostředí čistého kyslíku a vzduchu.

Se zvyšující navážkou platiny na elektrodě vykazuje palivový článek vyšší výkony, ale při určité navážce se výkon již nezvyšuje. Z hlediska výkonu je použití velkých navážek platiny zbytečné. Při použití vzduchu místo kyslíku je výkon palivového článku výrazně nižší, ale degradace palivového článku probíhá pomaleji.

Sekce : Anorganická technologie

## **Chování bipolárních iontově selektivních membrán ve vodném roztoku K<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>**

Autor: Tereza Jadrná  
Ročník: B3  
Ústav: Anorganické technologie  
Školitel: Ing. Martin Paidar, Ph.D.

Membránové procesy patří mezi moderní dynamicky se rozvíjející technologie nalézající stále širší průmyslové uplatnění. Je to dáno zejména jejich výjimečnými vlastnostmi, které umožňují v řadě případů nahradit investičně, či energeticky náročné technologie, popřípadě přispět k ochraně životního prostředí. Jednou z aktuálních inovací v elektromembránových technologiích je použití nového typu membrány tzv. bipolární iontově selektivní membrány.

Důležitou podmínkou vývoje a optimalizace tohoto druhu membrán je navržení vhodné metodiky jejich charakterizace. Jejím cílem bylo stanovit míru nežádoucího pronikání iontů vybranými bipolárními iontově selektivními membránami a ověřit použitelnost této metody k charakterizaci separačních schopností membrán. Experimenty byly provedeny ve dvoukomorové cele s katodovým a anodovým prostorem odděleným bipolární membránou. Pronikání iontů membránou bylo sledováno prostřednictvím záznamu změny pH roztoků v jednotlivých komorách cely, kdy míra změny pH odpovídá nedokonalosti bipolární membrány. Míra pronikání iontů byla kvantitativně stanovena prostřednictvím analýzy komorových roztoků metodou ICP-OES. Jako hlavní pronikající iont byl identifikován K<sup>+</sup>. Experimenty prokázaly vhodnost zvolené metody k charakterizaci bipolárních iontově selektivních membrán.

Sekce : Anorganická technologie

## **Elektrochemická výroba železanu**

Autor: Bc. Šárka Kubíková  
Ročník: M2  
Ústav: Anorganické technologie  
Školitel: Ing. Tomáš Bystroň, Ph.D.

Železany ( $\text{FeO}_4^{2-}$ ) se díky svému oxidačně redukčnímu potenciálu řadí mezi nejsilnější známá oxidační činidla. Tyto fialové krystalické látky mohou být využity jako ekologická oxidační činidla v oblastech čištění odpadních vod, purifikace plynů či jako katodový materiál v nových typech baterií. Železan draselný lze vyrábět dvěma základními způsoby, tj. chemickou či elektrochemickou syntézou. Nevýhodou chemické syntézy je velké množství odpadních roztoků a složité přečišťování produktu. Těmto problémům se lze vyhnout použitím elektrochemické syntézy využívající obětované anody. Jejimi nevýhodami jsou zejména vysoká spotřeba elektrické energie a tvorba pasivační vrstvy na povrchu elektrody.

Cílem této práce bylo nalézt optimální podmínky elektrochemické syntézy železanu v průtočném elektrolyzáru při použití obětované anody. Za tímto účelem byla provedena série elektrolyzů v roztoku 14 M KOH při různých teplotách a proudových hustotách. Jako anodový materiál byla testována nelegovaná ocel. Tento materiál byl vybrán na základě vhodného složení a nízké ceny. V průběhu elektrolyzy byla sledována koncentrace železanu v roztoku pomocí UV-VIS spektrofotometrie. Výsledky byly porovnány na základě proudových účinností, jež byly určeny z hodnot koncentrace a náboje prošlého elektrolyzérem.

Sekce : Anorganická technologie

## **Řídící děje při fotokatalytické oxidaci nízkých koncentrací hexanu a toluenu v plynné fázi**

Autor: Libor Obal  
Ročník: B3  
Ústav: Anorganické technologie  
Školitel: prof. Dr. Ing. Josef Krýsa, Ing. František Moulis

Těkavé organické látky (VOC) jsou skupinou polutantů, která snižuje kvalitu ovzduší jak ve venkovních, tak ve vnitřních prostorách již při nízkých koncentracích. Jednou z metod jejich eliminace ze vzduchu je fotokatalytická oxidace na oxidu titaničitém. Pro stanovení účinnosti fotokatalytické oxidace se využívá průtočných deskových fotoreaktorů (norma ISO 22197-3:2011). Cílem této práce bylo zjistit vliv tloušťky a geometrie fotoaktivní vrstvy  $\text{TiO}_2$  na rychlost odbourávání modelových VOC hexanu a toluenu za podmínek blízkých normovanému testování (průtok 0,5 l/min, koncentrace VOC 5 ppm, UV-A ozařování). Částicové porézní vrstvy s různou tloušťkou a velikostí geometrického povrchu byly připraveny nanesením komerčního  $\text{TiO}_2$  (P90, Degussa) na skleněné destičky. Při fotokatalytické degradaci obou modelových VOC bylo dosaženo srovnatelných maximálních konverzí (80 % pro hexan, 90 % pro toluen), které nezávisely na tloušťce fotoaktivní vrstvy. Bylo zjištěno, že konverze hexanu vztažená na jednotku plochy klesá se zvyšující se délkou vrstvy  $\text{TiO}_2$  ve směru toku plynu. To naznačuje, že rychlost fotokatalytického odbourávání hexanu je pro nízké koncentrace a průtoky plynu řízena rychlostí vnější difuze hexanu z objemu protékajícího plynu k povrchu  $\text{TiO}_2$  vrstvy ve fotoreaktoru.

Sekce : Anorganická technologie

## **Vysokoteplotní elektrolýza vody**

Autor: Bc. Petr Průša  
Ročník: M1  
Ústav: Anorganické technologie  
Školitel: Ing. Martin Paidar, Ph.D.

Vysokoteplotní elektrolýza vody je jednou z možností výroby vodíku a kyslíku, která je nyní ve fázi intenzivního vývoje. Proces probíhá při teplotách kolem 800-1000 °C. Vysoká teplota snižuje množství potřebné elektrické energie k rozkladu vodní páry a zvyšuje účinnost celého procesu. Jako elektrolyt se používá  $\text{ZrO}_2$  stabilizovaný  $\text{Y}_2\text{O}_3$  (YSZ), který je vodivý pro  $\text{O}^{2-}$  ionty. Na elektrolyt těsně přiléhají elektrody. V této práci jsem se zabýval přilnavostí anody k elektrolytu. Anoda je vyrobena buď z čistého LSM ( $\text{La}_{0,8}\text{Sr}_{0,2}\text{MnO}_3$ ) nebo ze směsi LSM a YSZ. Čistý LSM je vodivý především pro elektrony a oxidace  $\text{O}^{2-}$  iontů tak probíhá zejména na rozhraní elektroda/elektrolyt. Tlak vznikajícího kyslíku může nakonec odtrhnout elektrodu od elektrolytu a přerušit kontakt v celém systému. Ve směs LSM/YSZ je iontová vodivost výrazně vyšší, a oxidace tak může probíhat i v objemu anody. Tím se snižuje riziko odtržení elektrody. Přilnavost elektrody byla testována jejím cyklickým polarizováním v rozsahu potenciálu od -1V do +1V. Přilnavost elektrody jsem se snažil ovlivnit složením materiálu anody a také modifikací povrchu elektrolytu, na který jsem poté nanесl danou elektrodu. Připravené kompozity elektroda/elektrolyt vykazovaly po provedených 1800 cyklech stále vysokou aktivitu, což svědčí o dobré adhezi elektrody k elektrolytu.

Sekce : Anorganická technologie

## **Vliv materiálu katody na provozní podmínky alkalického elektrolýzoru**

Autor: Bc. Martin Roubalík  
Ročník: M2  
Ústav: Anorganické technologie  
Školitel: Ing. Martin Paidar, Ph.D., Ing. Karel Vazač

Výroba vodíku elektrolýzou vody naráží na překážky, které ji činí nekonkurenceschopnou oproti zavedeným způsobům výroby (např. parní reforming). Podíl elektrolyticky vyrobeného vodíku je velmi malý (cca 5 %). Jedinou průmyslově rozšířenou elektrolýzou vody je elektrolýza alkalická. I zde je ovšem snaha o modernizaci, která by vedla ke snížení nákladů na výrobu vodíku a širšímu uplatnění v praxi. Při modifikaci alkalické elektrolýzy byla nahrazena diafragma polymerní kationt selektivní membránou typu Nafion®. To vedlo ke snížení mezielektrodové vzdálenosti.

Další možností optimalizace alkalické elektrolýzy je nalezení vhodnějších elektrodových materiálů, které by dosahovaly vyšší katalytické aktivity a vykazovaly by nižší přepětí vzhledem k vyvíjeným plynům, což by vedlo ke snížení energetických nároků procesu.

V této práci byl konkrétně zkoumán materiál katody pomocí metody cyklické voltametrie. Zkoumány byly materiály nikl, nerezová ocel a ocel třídy 10. Nejlepší výsledky byly dosaženy na niklové katodě.



Sekce : Anorganická technologie

## **Různé metody přípravy katalyzátoru $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{CoO}_3$ pro vývoj kyslíku u alkalické elektrolýzy vody**

Autor: Bc. Martin Tkáč  
Ročník: M2  
Ústav: Anorganické technologie  
Školitel: Ing. Martin Paidar, Ph.D., Ing. Jaromír Hnát

V posledních letech vyvíjí mnoho vyspělých zemí snahu o snížení jejich závislosti na fosilních palivech. S touto snahou je spojen prudký nárůst využívání alternativních zdrojů energie, zejména sluneční a větrné. Tyto zdroje vykazují ovšem silnou závislost na aktuálních povětrnostních podmínkách. S jejich rostoucím instalovaným výkonem tak roste potřeba řešit otázku uskladnění přebytečné energie a její opětovné využití. Jako perspektivní nosič energie je považován vodík. Alkalická elektrolýza vody, využívající elektrickou energii z obnovitelných zdrojů pak představuje jednu z možností konverze elektrické energie do chemické energie vodíku. Mezi její výhody patří dlouholetá průmyslová praxe a oproti kyselé elektrolýze také možnost provozu bez platinových kovů. Na druhou stranu dosahuje alkalická elektrolýza nižší účinnosti. Proto je třeba nalézt vhodný neplatinový katalyzátor, který by tento proces zefektivnil. Cílem této práce je nalézt vhodný katalyzátor s perovskitickou strukturou, u které byly pozorovány slibné elektrokatalytické vlastnosti. Za tímto účelem byla připravena sada katalyzátorů o složení  $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{CoO}_3$ , lišící se metodou přípravy a teplotou výpalu. Tyto vzorky byly změřeny a vzájemně porovnány na rotační diskové elektrodě metodou tenkého filmu. Nejlepší výsledky vykazoval katalyzátor připravený postupem přes EDTA.

Sekce : Kovové materiály I.

## **Interakce kovových materiálů s roztokem dezinfekčního prostředku na bázi peroxidu vodíku**

Autor: Bc. Markéta Bláhová  
Ročník: M2  
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství  
Školitel: Ing. Milan Kouřil Ph.D.

Práce se zabývá korozním poškozováním systému teplé užitkové vody ve Fakultní nemocnici Motol v Praze. Potrubí je zde zhotoveno z mědi a část je z uhlíkové oceli se zinkovým povlakem. Do vody je navíc přidáván dezinfekční prostředek Sanosil Super 25 Ag, který obsahuje 50%  $\text{H}_2\text{O}_2$  a malá množství stříbra. Cílem této práce bylo prokázat, že nositelem agresivity vůči mědi je zvýšená oxidační schopnost prostředí a vůči zinkované oceli přítomnost iontů mědi. Rovněž byla navržena a ověřena korozní odolnost korozivzdorné oceli FeCr18Ni10 jako alternativní náhrady místo stávající mědi a zinkované oceli. V rámci této práce bylo studováno korozní poškození potrubí a korozní chování mědi, zinku, uhlíkové oceli a oceli FeCr18Ni10. Korozní chování bylo posuzováno na základě elektrochemických měření, měřen byl polarizační odpor, korozní potenciál a anodické části potenciodynamických křivek. Měřeno bylo v prostředí vzorků vod s přidavkem dezinfekčního prostředku i bez něj. Výsledky práce ukázaly, že nositelem agresivity vůči mědi je skutečně zvýšená oxidační schopnost prostředí a vůči zinkované oceli přítomnost měďnatých iontů v rozvodu teplé užitkové vody. Korozivzdorná ocel FeCr18Ni10 se ukázala jako vhodná alternativa do prostředí vody s dezinfekčním prostředkem Sanosil Super 25 Ag.

Sekce : Kovové materiály I.

## **Příprava nanočástic železa metodou selektivního loužení**

Autor: Filip Brabec  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství  
Školitel: Ing. Alena Michalcová, Ph.D.

Nanočástice železa je slibným materiálem, jejichž kompaktizací by mohl vzniknout materiál s výbornými mechanickými vlastnostmi. V této práci byla testována možnost přípravy železných nanočástic metodou selektivního loužení hliníkové, měděné a stříbrné matrice. Byla zkoumána závislost fázového složení vzniklých nanočástic na tepelném zpracování slitin a na teplotě loužícího procesu. Bylo prokázáno, že nejvhodnější slitinou pro přípravu železných nanočástic je AlFe11. Rozpouštění hliníkové matrice v roztoku hydroxidu sodného probíhá relativně snadno a rychle, vzniklé odpadní roztoky nejsou toxické a jejich zpracováním je možné práškový získat oxid hlinitý.

Sekce : Kovové materiály I.

## **Vliv postupu zpracování na vlastnosti zinku**

Autor: Matěj Člupek  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství  
Školitel: prof. Dr. Ing. Dalibor Vojtěch

Cílem práce je navrhnout způsob zpracování pro čistý zinek bez přítomnosti dalších legujících prvků. Takto vhodně zpracovaný zinek by se do budoucna mohl uplatnit jako biodegradovatelný materiál pro medicínské aplikace. Při teplotním režimu 300 °C byla metodou ECAP upravena struktura čistého zinku v litém stavu. Operační režimy se lišily počtem průtahů přes profil. Následně byla zdokumentována struktura získaného materiálu, tvrdost a mechanické vlastnosti (tlaková a tahová zkouška). Získané hodnoty byly porovnány s litým a extrudovaným zinkem.

Sekce : Kovové materiály I.

## **Příprava slitiny WE43 mechanickým legováním**

Autor: Iva Fialová  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství  
Školitel: Ing. Alena Michalcová, Ph.D.

Hořčík je biodegradovatelný materiál, který koroduje v lidském těle a poté je snadno vyloučen z těla ven. Korozí implantátu doprovází uvolňování plynného vodíku, které tělo do určité míry dokáže absorbovat. Příliš vysoká korozní rychlost je jeden z důvodů, který zatím brání rozšíření hořčíku v medicíně. V současné době je testován jako materiál dočasných implantátů do lidského těla (stenty, šrouby pro fixace kostí). Výhodou je, že se jeho mechanické vlastnosti blíží vlastnostem lidské kosti.

Slitina WE43 obsahuje příměsi vzácných zemin (92,5%Mg, 3%Nd, 4%Y, 0,5%Zr). Je to slitina se zvýšenou pevností, s dobrými mechanickými vlastnostmi a také dobrou odolností vůči vysokým teplotám. Již dlouhou dobu se používá v leteckém a automobilovém průmyslu. WE43 zpracovaná průtlačným lisováním má zvýšené korozní vlastnosti, proto by byla vhodná pro použití v medicíně. Dalšího zlepšení mechanických vlastností je možné očekávat přípravou slitiny mechanickým legováním, které by vedlo ke vzniku velmi jemnozrnného materiálu.

Sekce : Kovové materiály I.

## **Struktura a vlastnosti porézních biomateriálů na bázi titanu**

Autor: Anna Knaislová  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství  
Školitel: doc. Ing. Pavel Novák, Ph.D.

Porézní kovové materiály jsou velmi perspektivním materiálem pro implantáty z důvodu nižší hustoty a snazšího zakotvení kostní tkáně. Rovněž lze vhodným podílem pórů upravit mechanické vlastnosti implantátu na hodnoty blízké lidské kosti. Cílem této práce bylo připravit porézní kovové biomateriály na bázi slitin titanu s definovanou pórovitostí pro chirurgické a dentální aplikace. Práškovou metalurgií s využitím reaktivní sintrace byly z prášků křemíku a titanu připraveny porézní slitiny Ti-Si. Předchozím výzkumem bylo zjištěno, že reakcí titanu s křemíkem vznikají porézní materiály bez nutnosti přídavku pórotvorných činidel. V této práci byla zkoumána příčina vzniku pórů při reaktivní sintraci pomocí termické analýzy a rentgenové difrakční analýzy vzorků slinovaných při zvolených teplotách. Pórovitost a mechanické vlastnosti těchto materiálů byly porovnány s porézním titanem, který byl vyroben s využitím přídavku pórotvorných látek.

Sekce : Kovové materiály I.

## **Vlastnosti porézního železa připraveného metodou práškové metalurgie**

Autor: Adéla Krásná  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství  
Školitel: Ing. Jaroslav Čapek

V poslední době roste zájem o vstřebatelné ortopedické implantáty. Středem tohoto zájmu jsou především kovové materiály, jelikož ve srovnání s nekovovými materiály dosahují lepších mechanických vlastností. Vedle hořčíku a jeho slitin, které jsou velmi intenzivně zkoumány, je v poslední době věnována pozornost také materiálům na bázi železa. Takové materiály degradují v tělním prostředí výrazně pomaleji než materiály na bázi hořčíku, což je výhodné pro některé aplikace, např. tzv. augmentace. Čisté železo však v tělním prostředí vykazuje příliš nízkou korozní rychlost. Tu lze zvýšit buď legováním (Mn, Ag, atd.), nebo zavedením porozity do materiálu. Implementace porozity vede nejen ke zvýšení korozní rychlosti, ale umožňuje také transport tělních tekutin k tkáni a prorůstání nové tkáně do implantátu. Přítomnost porozity navíc snižuje modul pružnosti materiálu, čímž dochází k jeho přiblížení k modulu pružnosti lidské kosti a tím i ke zvýšení mechanické biokompatibility.

V této práci byly metodou práškové metalurgie připraveny vzorky porézního železa o různé porozitě a následně byla studována jejich struktura a vybrané mechanické vlastnosti.

Sekce : Kovové materiály I.

## **Vliv tepelného a mechanického zpracování na vlastnosti slitiny Mg-4Y-3RE**

Autor: Bc. Vojtěch Kučera  
Ročník: M1  
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství  
Školitel: Ing. Jiří Kubásek

Vzhledem k nízké hustotě a relativně vysokému poměru pevnosti k hmotnosti jsou slitiny hořčíku moderními materiály pro aplikace v automobilovém a leteckém průmyslu. S hořčíkovými materiály je rovněž v dnešní době počítáno pro výrobu biodegradovatelných implantátů, které se odbourávají samovolně v organismu a mohou v některých případech značně usnadnit celý proces léčby např. zlomenin kostí. Základní problematikou hořčíku zůstávají nízké mechanické vlastnosti především za zvýšených teplot a vysoká korozní rychlost v agresivních prostředích obsahujících chloridové ionty. Zlepšení požadovaných vlastností je možné obecně dosáhnout vhodným legováním. Mezi používané legující prvky se řadí i kovy vzácných zemin (Y, Nd, Dy, Gd, atd.). Jednou z komerčně vyráběných slitin obsahujících tyto prvky je slitina WE43 (Mg-4Y-3RE). V této práci byl pozorován vliv kombinace vhodného tepelného a mechanického zpracování na strukturu, mechanické vlastnosti a korozní odolnost slitiny. Mechanické zpracování bylo prováděno dopředným protlačováním s extruzním poměrem 10 při teplotě 400 °C. U vybraných vzorků byla rovněž provedena oxidace za různých podmínek a sledován její vliv na korozní chování materiálu v roztoku 9g/l NaCl.

Sekce : Kovové materiály I.

## **Vlastnosti rychle ztuhlé slitiny Zn-Mg**

Autor: Markéta Machová  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství  
Školitel: prof. Dr. Ing. Dalibor Vojtěch

Cílem práce bylo připravit jemnozrnnou slitinu Zn-Mg pro biomedicínské aplikace. Slitina s 1,6 hm.% Mg v litém a extrudovaném stavu byla již otestována jako vhodný kandidát pro přípravu biodegradovatelných fixačních elementů. Dalším zjemněním struktury by mělo být dosaženo lepších mechanických vlastností a přijatelnějších hodnot korozní rychlosti. Metodou melt spinning byla připravena slitina Zn-1,6Mg v podobě rychle ztuhlého pásku. Rozemletý pásek byl kompakťován při teplotě 20 °C. Dále pak byla provedena extruze materiálu při teplotě 350 °C. Mikrostruktura byla zdokumentována pomocí světelného mikroskopu. Tvrdost byla měřena Vickersovou metodou. Z mechanických vlastností byla stanovena hodnota meze kluzu a meze pevnosti v tlaku. Získané hodnoty byly porovnány s litým a extrudovaným stavem této slitiny.

Sekce : Kovové materiály I.

## **Porézní slitiny hořčíku pro implantáty**

Autor: Bc. Pavel Salvetr  
Ročník: M1  
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství  
Školitel: doc. Ing. Pavel Novák Ph.D.

Výjimečné vlastnosti hořčíkových slitin, jako jsou biodegradabilita a nízká hustota, zaručují těmto slitinám vhodnost k použití v medicíně jako kostních implantátů. Dosud se k tomuto účelu využívaly hlavně slitiny titanu, kobaltu a korozivzdorné oceli. Nad uvedenými materiály vítězí hořčíkové slitiny svými mechanickými vlastnostmi, které se více podobají lidským kostem a současně umožňují omezit množství operací, protože dojde k samovolnému odkorodování implantátu. Čistý hořčík ale nedosahuje požadovaných mechanických vlastností ani korozní odolnosti. Z tohoto důvodu se hledají prvky, jejichž přídavek by tyto vlastnosti hořčíku zvýšil na přijatelné hodnoty. V této práci byly zkoumány vlivy legujících prvků (hliníku, zinku a yttria) na mechanické vlastnosti, korozní odolnost, tvar a velikost pórů ve struktuře slitin hořčíku. Kromě legujících prvků bylo do vzorků přidáváno pórotvorné činidlo, které mělo za úkol vytvořit ve struktuře hořčíkových slitin póry s průměrem větším než 200 μm. Takto velké póry dovolují kostním buňkám vrůstat do implantátu a umožnit jeho postupné nahrazení kostí. Všechny vzorky byly připraveny metodou práškové metalurgie.

Sekce : Kovové materiály I.

## **Struktura a vlastnosti rychle ztuhlých slitin Al-Si-Fe a Al-Si-Fe-Ni**

Autor: Andrea Školáková

Ročník: B3

Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství

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

Hliníkové slitiny mají široké uplatnění v aplikacích, kde jsou dlouhodobě vystaveny zvýšeným teplotám, zejména se jedná o písty a bloky spalovacích motorů. Vynikají především dobrou slévateľností, nízkou hmotností a tepelnou vodivostí. Nevýhodou je naopak nízká tepelná stabilita, což značí, že tyto materiály ztrácejí své dobré mechanické vlastnosti se zvyšující se teplotou.

Rychlým chlazením taveniny lze získat prášky nebo tenké pásy s velmi jemnou strukturou a nerovnovážným fázovým složením. Zhutněním těchto prášků lze získat materiály s vlastnostmi zcela odlišnými od slitin používaných v současnosti. V případě slitin hliníku je možné takto vyrobit slitiny s mnohem vyšší pevností a tepelnou stabilitou než u dosavadních slitin.

V této práci byly studovány slitiny Fe<sub>7</sub>AlSi<sub>12</sub> a Fe<sub>4</sub>AlSi<sub>12</sub>Ni<sub>3</sub> připravené metodou melt spinning, kterou se vyrábějí rychle ztuhlé pásy rychlostí chlazení 10<sup>3</sup>-10<sup>5</sup> K/s. Struktura materiálů byla studována elektronovou mikroskopií a dále byla testována mikrotvrdost při laboratorní teplotě a po žhání při různých teplotách.

Sekce : Kovové materiály I.

## **Příprava intermetalických fází Fe-Al mechanickým legováním**

Autor: Bc. Milan Valalik

Ročník: M1

Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství

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

Intermetalické fáze Fe-Al jsou perspektivní materiály pro použití za vysokých teplot. Většímu rozšíření těchto materiálů dosud brání nízká houževnatost při pokojové teplotě a problematická výroba. Jednou z možností řešení těchto problémů je technologie práškové metalurgie využívající mechanického legování. Cílem této práce bylo popsat mechanismus vzniku intermetalických fází v tomto systému při mechanickém legování a na základě toho optimalizovat podmínky přípravy. Pro kompaktizaci připravených prášků byla úspěšně otestována metoda „Spark Plasma Sintering“.

Sekce : Kovové materiály II.

## **Příprava a vlastnosti kompozitních materiálů s hořčíkovou matricí a hydroxyapatitem**

Autor: Drahomír Dvorský  
Ročník: B3  
Ústav: 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 matricí. 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 a velikostí částic výztuže vhodnou kombinací metod mletí, lisování, reaktivní sintrace a extruze. Cílem práce je získat kompozitní materiál s rovnoměrně rozptýlenými jemnými částicemi hydroxyapatitu, který se vyznačuje vhodnými mechanickými vlastnostmi a zlepšenou korozní odolností.

Sekce : Kovové materiály II.

## **Příprava slitiny Mg-Zn mechanickým legováním a následnou kompaktizací metodou SPS**

Autor: Michaela Fousová  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství  
Školitel: Ing. Jaroslav Čapek

Slitiny hořčíku nabývají v poslední době stále většího významu. Jedná se o materiály s nízkou hustotou a dobrými mechanickými vlastnostmi, které mohou být dále zlepšeny zjemněním mikrostruktury či přípravou struktury amorfní. Mezi systémy, které mají tendenci tvořit amorfní strukturu, patří systém Mg-Zn. Amorfní a nanostrukturované materiály se obvykle připravují metodami rychlého tuhnutí, což je u výše zmíněného systému kvůli vysoké reaktivitě hořčíku s kyslíkem a dusíkem velmi náročné. Dalším možným postupem přípravy takových materiálů je mechanické legování.

Cílem této práce bylo připravit práškovou slitinu Mg50Zn50 metodou mechanického legování a zjistit vliv doby mletí na její fázové složení. Vybraný mechanicky legovaný prášek byl následně kompaktizován metodou „spark plasma sintering“ (SPS). Takto připravený vzorek byl následně charakterizován (fázové složení, mikrostruktura a tvrdost). Na základě získaných výsledků byly navrženy modifikace postupu, které by měly vést k lepším vlastnostem kompaktizovaných vzorků.

Sekce : Kovové materiály II.

## **Vliv parametrů na účinnost cementačního srážení Cd z výluhů Zn/MnO<sub>2</sub> baterií a jejich optimalizace**

Autor: Jaroslav Gubiš  
Ročník: M2  
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství  
Školitel: doc. Ing. Jitka Jandová, CSc.

Na základě experimentálních měření byly stanoveny parametry zásadně ovlivňující účinnost cementačního srážení Cd ze síranových výluhů po hydrometalurgickém zpracování odpadních zinko-chloridových a alkalických Zn/MnO<sub>2</sub> baterií. Pro vyhodnocení vlivu jednotlivých parametrů (přebytek srážecího činidla, teplota a pH) byl použit faktoriálový design se 3 faktory na 2 úrovních. Získané parametry byly optimalizovány simplexovou metodou. Závěrem byl sledován vliv stanovených parametrů na kinetiku cementace Cd z výluhů po loužení elektrodové hmoty oddělené ze směsi zinko-chloridových a alkalických baterií

Sekce : Kovové materiály II.

## **Korozní vlastnosti slitiny titan-molybden pro medicínské aplikace**

Autor: Vojtěch Hybášek  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství  
Školitel: Ing. Hynek Moravec

Mezi hlavní výhody  $\beta$ -slitin titanu, oproti  $\alpha$  a  $\alpha+\beta$  materiálům, patří modul pružnosti bližící se kortikální kosti, lepší korozní odolnost a absence alergenních prvků.

Cílem práce bylo zkoumání korozních vlastností slitiny Ti15Mo a příprava nanostruktury na jejím povrchu. Nanostrukturováním se vytváří povrch s modifikovanými vlastnostmi, předpokládán je nárůst bioaktivity.

Korozní vlastnosti byly testovány základními elektrochemickými metodami. Měřeny byly časové závislosti samovolného korozního potenciálu a potenciodynamické křivky v prostředích modelujících tělní tekutiny - fyziologický roztok s různým pH, PBS. Nanostrukturování probíhalo v roztocích H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> s fluoridem sodným a síranu amonného s fluoridem amonným. Souběžně proběhlo metalografické hodnocení vzorků.

Korozní chování slitin odpovídalo očekávatelné stabilní pasivitě, nanostruktura ve formě trubek se vytvářela pouze na lokalizovaných částech povrchu.



Sekce : Kovové materiály II.

## **Vlastnosti hořčíkových slitin s přidavky germania**

Autor: Tomáš Kovalčík  
Ročník: M2  
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství  
Školitel: Ing. Jan Šerák, Ph.D.

V této práci je řešena problematika zvyšování odolnosti komerčních hořčíkových slitin proti tečení, respektive stability mechanických vlastností za zvýšených teplot pomocí legování germaniem.

K experimentům byly použity komerční slitiny AJ61 (Mg-Al-Sr), AZ31 (Mg-Al-Zn), EZ33 (Mg-RE-Zn), MRI153 (Mg-Al-Ca-Sr) a WE43 (Mg-Y-RE). Do těchto slitin byly legovány germaniem v 2 a 5 hm. %. Na všech materiálech byla zdokumentována mikrostruktura pomocí světelné mikroskopie a skenovací elektronové mikroskopie, naměřeny tvrdosti podle Vickerse a Brinella a provedeny mechanické zkoušky při 20 °C, 150 °C a 200 °C.

Z výsledků vyplývá, že vliv germania je u komerčních slitin proměnný. Lze však říci, že u slitin méně odolných vysokým teplotám – AJ62 a AZ31 má germanium obecně pozitivní vliv. Naopak u slitin odolnějších vysokým teplotám – zejména WE43 má germanium vliv negativní.

Sekce : Kovové materiály II.

## **Získávání Li a Rb z cinvalditu modifikovanou sádrovou metodou**

Autor: Martin Libich  
Ročník: M1  
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství  
Školitel: Ing. Hong Vu, Ph.D.

Z cinvalditového koncentráту získaného z gravitačních odpadů po těžbě Sn-W rud na Cínovci se dají extrahovat Li a Rb spékáním koncentráту se  $\text{Ca(OH)}_2$  a  $\text{CaSO}_4$ , a následným vyluhováním získaných spečenců ve vodě, tzv. sádrovou metodou. Cílem práce je zjistit možnost náhrady  $\text{Ca(OH)}_2$  za  $\text{CaCO}_3$  při spékání a určit optimální podmínky pro extrakci Li a Rb tímto modifikovaným postupem. Bude sledován vliv hmotnostního poměru cinvalditového koncentráту :  $\text{CaSO}_4$  :  $\text{CaCO}_3$ , teploty a doby spékání na fázové složení a na účinnost extrakce Li a Rb ze vzniklých spečenců.

Sekce : Kovové materiály II.

## **Vlastnosti slitin MgGdY pro použití za zvýšených teplot**

Autor: Jiří Příbyl  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství  
Školitel: Ing. Jan Šerák, Ph.D.

Použití běžných komerčních hořčíkových slitin je obvykle omezeno pouze pro použití za běžných teplot. Při zvýšených teplotách (již nad 150 °C) dochází k výraznému poklesu mechanických vlastností těchto slitin. Proto je snaha vyvíjet nové hořčíkové slitiny se zvýšenou stabilitou za zvýšených teplot. V této práci byly studovány slitiny MgGd<sub>2</sub>Y<sub>2</sub>Zn<sub>1</sub>Zr<sub>0,2</sub>, MgGd<sub>1</sub>Y<sub>1</sub>Ca<sub>2</sub>Zn<sub>1</sub>Zr<sub>0,2</sub> a MgGd<sub>2</sub>Y<sub>2</sub>Ca<sub>2</sub>Zr<sub>0,2</sub>. Byla studována mikrostruktura, mechanické vlastnosti v tlaku a teplotní stabilita slitin při teplotě 250 °C.

Sekce : Kovové materiály II.

## **Příprava a vlastnosti nanokrystalického železa**

Autor: Květa Stehlíková  
Ročník: B2  
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství  
Školitel: Ing. Alena Michalcová, Ph.D.

Selektivním loužením hliníkové matrice slitiny AlFe<sub>11</sub> byl připraven nanoprášek železa. Vzniklý nanoprášek byly následně kompaktizovány metodou Spark Plasma Sintering (SPS) při teplotě 650 a 850 °C. Teplota 650 °C by měla dostatečná ke kompaktizaci železa, což bylo prokázáno kompaktizací hrubozrnného železa s velikostí částí do 212 μm. Vzorky připravené z nanočástic železa byly tvořeny převážně magnetitem, ačkoliv je prokázáno, že prostředí v zařízení na SPS je velmi redukční. Proto byl testován vliv přídavku dalších (redukčních) prvků - Al a C - do sintrovaného nanoželeza. Metalograficky byla zkoumána mikrostruktura připravených vzorků a jejich fázové složení bylo určeno pomocí difrakce rentgenova záření.

Sekce : Kovové materiály II.

## **Příprava nanokrystalického niklu**

Autor: Petra Svobodová  
Ročník: M2  
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství  
Školitel: Ing. Alena Michalcová, Ph.D.

Předmětem této práce je příprava nanokrystalického niklu. Prvním úkolem byla charakterizace vlastností a struktury práškového niklu připraveného selektivním loužením slitiny AlNi20 (slitina připravena metodou melt spinning) v roztoku hydroxidu sodného (za daných koncentrací a teplot) a dále příprava a charakterizace niklového „bulků“ připraveného metodou Spark Plasma Sintering (SPS) při daných teplotách.

Byla provedena analýza vzorků rastrovacím (SEM) a transmisním (TEM) elektronovým mikroskopem (struktura a morfologie), fázové složení a velikost vznikajících částic byla určena pomocí rentgenová difrakční spektroskopie (XRD), byla měřena mikrotvrdosti a byla provedena obrazová analýza k určení pórovitosti připravených „bulků“.

Dalším krokem bude charakterizace magnetických vlastností (měření magnetizačních křivek) nanočástic niklu a jejich závislost na podmínkách přípravy.

Sekce : Kovové materiály II.

## **Chování slitin Fe-Cr v silně oxidačním prostředí**

Autor: Vladimír Vojtěch  
Ročník: B2  
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství  
Školitel: Ing. Jiří Rapouch

Materiály používané pro konstrukci komponent energetických zařízení musí splňovat požadavky na dostatečnou odolnost vůči tečení a oxidaci za zvýšených teplot. Velmi často jsou pro tyto účely používány vhodně legované a tepelně zpracované chromové oceli. V prostředí přehřáté páry nebo vody nadkritických parametrů dochází k vytvoření silně oxidačních podmínek, ve kterých u těchto ocelí hrozí nebezpečí přechodu některých legujících prvků do vyšších oxidačních stupňů (Cr, Mo) ve formě těkavých nebo rozpustných sloučenin. K podobnému jevu dochází u legovaných ocelí také ve vodných elektrolytech s vysokou oxidační schopností, a to mechanismem transpasivního rozpouštění.

V této práci bylo sledováno transpasivní chování ocelí s obsahem 9 – 28 % Cr pomocí expozičních zkoušek za teplot 20 – 220 °C. Zjištěné korozní rychlosti byly doplněny o měření polarizačních křivek v různých prostředích. Získané výsledky ukazují na rozdílnou teplotní závislost korozní rychlosti slitin v prostředích s různou oxidační schopností.

Sekce : Kovové materiály II.

## **Hodnocení náchylnosti kovových biomateriálů k nerovnoměrným formám koroze**

Autor: Bc. Jiří Vystrčil  
Ročník: M2  
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství  
Školitel: doc. Ing. Luděk Joska, CSc.

Práce byla zaměřena na studiu korozního chování komerčně dostupných slitin niklu a kobaltu užívaných v bioaplikacích. Byla studována náchylnost k nerovnoměrným formám koroze a posouzen vliv mikrostruktury na charakter korozního napadení. Korozní chování slitin bylo hodnoceno v modelových tělních tekutinách s použitím elektrochemických technik. Materiály s výjimkou niklové slitiny s obsahem ceru vykazovaly dobrou korozní odolnost při potenciálech odpovídajících oxidačně redukčním potenciálům prostředí lidského organismu. Výrazná korozní aktivita niklové slitiny s obsahem ceru byla dána přítomností neúšlechtilé fáze bohaté na cer. Bylo prokázáno, že mikrostrukturní heterogenita studovaných materiálů má vliv na korozní chování.

Sekce : Kovové materiály III.

## **Náchylnost beta slitin titanu k nerovnoměrnému koroznímu napadení**

Autor: Adriana Bernatíková  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství  
Školitel: Ing. Jaroslav Fojt

V implantologii běžně využívané slitiny titanu vykazují vysokou korozní odolnost a jsou bioinertní. Jejich mechanické vlastnosti však neodpovídají mechanickým vlastnostem kostí. Z tohoto důvodu jsou vyvíjeny beta slitiny titanu, které se svým chováním, zejména modulem pružnosti, kosti blíží. Korozní odolnost těchto materiálů je v prostředí lidského těla na srovnatelné a vyšší úrovni v porovnání s čistým titanem. Konstrukční řešení některých implantátů zahrnuje stíněné prostory, které mohou být centrem pro vznik štěrbinové koroze. Práce byla zaměřena na studium náchylnosti beta slitin titanu k nerovnoměrnému koroznímu napadení. Pro výzkum byly použity slitiny Ti-35Nb-2Zr, Ti-35Nb-2Zr-0,4O a Ti-36Nb-6Ta. Náchylnost ke štěrbinové korozi byla hodnocena na základě snímání potenciodynamických závislostí na vzorcích s vytvořenou štěrbinou. Pro měření byl použit fyziologický roztok (9 g/l NaCl) a, vzhledem k možnému použití materiálů v dentální implantologii, fyziologický roztok s různými obsahy fluoridových iontů. Zkoumané materiály vykazovaly vysokou korozní odolnost. Ani v jednom ze studovaných případů nedošlo ke vzniku lokalizovaného korozního napadení.

Sekce : Kovové materiály III.

## **Stanovenie koróznej rýchlosti uhlíkovej ocele zvitkovým testom v anoxických elektrolytoch za zvýšenej teploty**

Autor: Bc. Michal Červenák  
Ročník: M1  
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství  
Školitel: Ing. Milan Kouřil, Ph.D.

Rádioaktivny odpad a vyhorené jadrové palivo sa v Českej republike plánuje trvalo uskladniť v hlbinnom geologickom úložisku. V rámci obalového súboru budú v kontakte ílovitá hornina - bentonit a kontajner z kovového materiálu s dostatočnou koróznou odolnosťou - uhlíková oceľ. Vzhľadom k anoxickým podmienkam, ktoré po čase v úložisku nastanú, by mala oceľ korodovať veľmi nízkou koróznou rýchlosťou. Na testovanie koróznej odolnosti uhlíkovej ocele bol zvolený zvitkový test, ktorý vedie k urýchleniu ustálenia podmienok expozície veľkého povrchu ocele voči malému objemu elektrolytu. Oceľové zvitky boli exponované v modelových bentonitových vodách s rôznym zložením, vďaka čomu bol posúdený vplyv zloženia na koróznou odolnosť ocele. Takisto bol posúdený vplyv teploty a trvania expozície. Tiež boli merané hodnoty pH pre odhadnutie priebehu koróznych reakcií. Zvitkový test sa pri práci overil a jeho aplikovaním boli určené korózne rýchlosti na úrovni nízkych jednotiek  $\mu\text{m}\cdot\text{a}^{-1}$ .

Sekce : Kovové materiály III.

## **Vliv legujících prvků na strukturu a vlastnosti intermetalik Fe- Al-Si vyrobených práškovou metalurgií**

Autor: Adrián Gonda  
Ročník: M2  
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství  
Školitel: doc. Ing. Pavel Novák, Ph.D.

Práca sa zameriavala na materiály použiteľné pre vysokoteplotné aplikácie. Materiály vhodné pre vysokoteplotné použitie musia odolávať oxidácii v koróznom prostredí za vysokej teploty a zároveň musia byť schopné znášať mechanické napätie. Konkrétne v tejto práci boli skúmané materiály na baze FeAl<sub>48</sub>Si<sub>7</sub>, FeAl<sub>33</sub>Si<sub>7</sub>, FeAl<sub>18</sub>Si<sub>7</sub> a FeAl<sub>20</sub>Si<sub>20</sub>. U týchto materiálov bola prvotne sledovaná tvrdosť, pórovitosť a štruktúra. Následne boli zvolené dva základné materiály FeAl<sub>33</sub>Si<sub>7</sub> a FeAl<sub>20</sub>Si<sub>20</sub>, ktoré boli legované 10 hm. % Cr, Ni, Cu a Nb.. V rámci ďalšej časti práce boli pozorované vlastnosti pripravených materiálu, a to štruktúra, tvrdosť, pórovitosť a odolnosť voči cyklickej oxidácii. Výsledky skúšok boli porovnané so základnými zliatinami FeAl<sub>33</sub>Si<sub>7</sub> a FeAl<sub>20</sub>Si<sub>20</sub>. Bolo zistené že legujúce prvky výrazne zvyšujú pórovitosť a následkom zvýšenej pórovitosti klesá tvrdosť a odolnosť voči cyklickej oxidácii. Najlepšie odolával voči oxidácii základný materiál FeAl<sub>20</sub>Si<sub>20</sub> a FeAl<sub>20</sub>Si<sub>20</sub>Cr<sub>10</sub>.

Sekce : Kovové materiály III.

## **Chemicko - tepelné úpravy nanostrukturovaných povrchů**

Autor: Kateřina Chotová  
Ročník: M1  
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství  
Školitel: Ing. Hynek Moravec

Titan a jeho slitiny tvoří významnou část materiálů používaných v medicíně při konstrukci ortopedických a dentálních implantátů. Vhojování implantátu může být někdy obtížným a zdoluhavým procesem. Jedno z mnoha řešení této situace spočívá v tvorbě nanostrukturovaného povrchu elektrochemickou oxidací v prostředí obsahujícím fluoridové ionty. Vhodnou volbou expozičních podmínek vznikne na povrchu vrstva uspořádaných trubiček, jejichž rozměry se pohybují na úrovni desítek až stovek nanometrů. Vlastnosti povrchu lze dále upravovat.

Cílem práce bylo aplikovat různé chemické a tepelné úpravy na vytvořenou nanostrukturu tak, aby došlo ke zlepšení bioaktivity. Chemické úpravy spočívaly v alkalizaci a v úpravě chemického složení povrchu trubiček. Dále byl testován vliv tepelného zpracování. Zvýšení bioaktivity bylo hodnoceno z pohledu interakce modifikovaných nanostruktur s modelovou tělní tekutinou.

Chemické modifikace byly hodnoceny z hlediska úspěšnosti obohacení nanostruktury o vybrané prvky a následného chování v modelové tělní tekutině. V tomto případě se podařilo vytvořit prekursor pro precipitaci kostních apatitů. Tepelným zpracováním bylo docíleno změn v krystalické struktuře, které po expozici v modelové tělní tekutině vedly k vyloučení vrstvy sloučeniny obsahující vápník a fosfor v poměru odpovídajícím kostním apatitům.

Sekce : Kovové materiály III.

## **Struktura a vlastnosti slitin Ni-Al-X**

Autor: Jan Janoušek  
Ročník: B2  
Ústav: Ústav kovových materiálů korozního inženýrství  
Školitel: doc. Ing. Pavel Novák, PhD.

Slitiny Ni-Al mají přijatelné mechanické vlastnosti, obzvláště tvrdost a ořezuvzdornost, které si zachovávají i za extrémních teplot. Mohou se uplatnit např. při výrobě částí automobilových motorů, které jsou vystaveny vysoké teplotě a odolávají abrazi. Mezi hlavní nevýhody patří jejich křehkosti za pokojových teplot, což je obecná nevýhoda intermetalických fází.

V této práci byly slitiny Ni-Al vyráběny práškovou metalurgií a byly zkoumány možnosti zlepšení materiálových vlastností legováním železem, chromem, mědí, křemíkem a titanem. Byla zkoumána mikrostruktura, oxidační odolnost při 1000 °C a tvrdost.

Sekce : Kovové materiály III.

## **Vlastnosti slitin MgGe a AlGe pro použití za zvýšených teplot**

Autor: Vít Jonák  
Ročník: B2  
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství  
Školitel: Ing. Jan Šerák, Ph.D.

Použití běžných komerčních hořčíkových slitin je obvykle omezeno pouze pro použití za běžných teplot. Při zvýšených teplotách (již nad 150 °C) dochází k výraznému poklesu mechanických vlastností těchto slitin. Proto je snaha vyvíjet nové hořčíkové slitiny se zvýšenou stabilitou za zvýšených teplot. V této práci byly studovány binární slitiny Mg-Ge a Al-Ge. Byla studována mikrostruktura a teplotní stabilita slitin při teplotě 250 °C.

Sekce : Kovové materiály III.

## **Výroba rychle ztuhlých slitin Al-Fe z recyklovaných surovin**

Autor: Bc. Jan Kříž  
Ročník: M2  
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství  
Školitel: doc. Ing. Pavel Novák, Ph.D.

Tato práce se zabývá možností výroby slitin na bázi Al-Fe z recyklovaných surovin. Cílem práce je nejprve vyrobení slitin, které budou simulovat materiál vzniklý recyklací reálného hliníkového odpadu, kterým mohou být například bloky spalovacích motorů se zatavenou litinovou vložkou nebo písty osazené litinovými kroužky. Takto vzniklá slitina byla přetavena a rychle ochlazená metodou melt spinning. Byly popsány rozdíly v mikrostruktuře, fázovém složení a tvrdosti mezi slitinou v litém stavu a materiálem získaným rychlým tuhnutím.

Sekce : Kovové materiály III.

## **Vlastnosti kvazikrystalické fáze Al-Cu-Fe**

Autor: Jan Mlynár  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství  
Školitel: doc. Ing. Pavel Novák, Ph.D.

Kvazikrystaly, za jejichž objev byla udělena v roce 2011 Nobelova cena, jsou v poslední době v popředí zájmu vědců díky své struktuře. Dosud je však velmi málo informací o vlastnostech těchto sloučenin. Proto bylo cílem této práce připravit kompaktní materiál na bázi kvazikrystalické fáze  $\text{Al}_{60}\text{Cu}_{30}\text{Fe}_{10}$  a popsat její vlastnosti. Vzorky byly vytvořeny mechanickým legováním a získané prášky byly následně kompaktizovány metodou SPS („Spark Plasma Sintering“). Byla studována hustota, tvrdost a tepelná stabilita připraveného kompaktního materiálu při teplotách 300 – 500 °C. Byl popsán vliv částečné náhrady železa niklem a chromem na stabilitu kvazikrystalické fáze a na výsledné vlastnosti připraveného materiálu.

Sekce : Kovové materiály III.

## **Vývoj porézních biomateriálů na bázi slitin Ti-Si**

Autor: Bc. Matyáš Peterka  
Ročník: M1  
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství  
Školitel: doc. Ing. Pavel Novák, Ph.D.

Porézní kovy a slitiny jsou velmi perspektivním materiálem pro implantáty z důvodu nižší hustoty a snazšího zakotvení kostní tkáně. Rovněž lze vhodným podílem pórů upravit mechanické vlastnosti implantátu na hodnoty blízké lidské kosti. Cílem této práce bylo připravit porézní kovové biomateriály na bázi slitin Ti-Si s definovanou pórovitostí pro chirurgické a dentální aplikace. Slitiny byly připravovány práškovou metalurgií s využitím reaktivní sintrace. Pro srovnání byly připraveny rovněž lité neporézní slitiny Ti-Si. Byla popsána závislost pórovitosti na složení slitiny a na podmínkách přípravy. Byly stanoveny mechanické a korozní vlastnosti připravených slitin.

Nejlepších výsledků dosahovala slitina TiSi10 připravená při teplotě 900 °C, lisovacím tlaku 612 MPa, s rychlým ohřevem a dobou slinování 2 hodiny. Taková slitina se vyznačovala nejvyšší pórovitostí, vhodnou velikostí pórů a dobrými mechanickými vlastnostmi. Naopak slitina TiSi5 z důvodu nedostatečné pórovitosti vyhodnocena jako méně vhodná.

Sekce : Kovové materiály III.

## **Korozní chování dentálních slitin s obsahem stříbra**

Autor: Eva Průchová  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství  
Školitel: doc. Ing. Luděk Joska, CSc

Předmětem práce bylo studium korozního chování stříbra a běžně používaných dentálních slitin s jeho obsahem v prostředích modelových slin. Ústní prostředí je relativně agresivní. Korozí stimulují jak chloridové ionty, tak ionty thiokyanatanové, které jsou přítomny v kuřáckých slinách. Uvolňování rozpustných korozních produktů stříbra, nejčastěji ve formě komplexních sloučenin, může vést ke vzniku pigmentace měkkých tkání – tzv. amalgam tattoo. Podobný problém může nastat v případě kosmetiky i textilu obsahujících „nanostříbro“ s cílem dosažení antibakteriálních účinků. V takovém případě může dojít k pigmentaci kůže a vzniku tzv. argyrií.

Na základě výsledků lze konstatovat, že stříbro i jeho slitiny podléhaly v modelech slin korozí. Dentální slitiny s vysokým obsahem stříbra nejsou proto, pokud by měly být v přímém kontaktu se slinami, pro použití v ústní dutině vhodné.



## Oltářní kříže

Autor: Michal Horníček

Ročník: B4

Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství

Školitel: Ing. Šárka Msallamová, Jaroslav Prášil restaurátor s licencií



Cílem práce bylo restaurování dvou oltářních křížů z 19. století. Materiál použitý k výrobě křížů je litina s lupínkovým grafitem s perliticko-feritickou matricí. Předměty byly sestaveny z více dílů, které byly vyrobeny technikou odlévání. Šelaková povrchová úprava obou křížů byla značně poškozena a lokálně podkorodována. U prvního oltářního kříže došlo nevhodným mechanickým zacházením ke zlomení kříže a pravé ruky Krista. Druhotná oprava byla provedena svářením. Zlacení povrchu u prvního z křížů nebylo prokázáno. U druhého oltářního kříže bylo zjištěno, že předmět byl lokálně pozlacen plátkovým zlatem. Původní zlacení bylo v minulosti překryto směsí šelaku a mosazného prášku. U obou křížů byla tryskáním odstraněna poškozená povrchová úprava a korozní produkty. Dále byly vyrovnány mechanické deformace a tanátováním byly stabilizovány zbylé korozní produkty železa na jejich povrchu. Druhotný svar prvního kříže byl nahrazen nerezovými čepy a zpevněn dvousložkovým epoxidovým lepidlem s kovovým plnivem. U druhého oltářního kříže byla sjednocena barevnost původního zlacení směsí šelaku a mosazného prášku. Vzhled nepozlacených povrchů obou křížů byl sjednocen směsí jemně mletého jílů a etanolu a zakonzervován matným damarovým lakem. Na závěr byl navržen vhodný režim pro uložení obou křížů s ohledem na jejich využití v liturgické praxi.

## Archeometalurgický průzkum produktů přímé redukce železa z rud

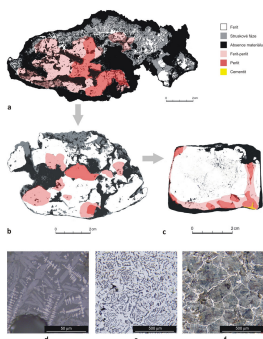
Autor: Jiří Kmošek

Ročník: B4

Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství

Školitel: Ing. Jiří Děd CSc.

Práce se zabývá vyhodnocením experimentálně získaných produktů z přímé redukce železa z rud v replice železářské pece z doby laténské. Pro rozbor železné lupy, kovářsky zpracovaných



polotovarů, železářské strusky a železné rudy byla použita optická a elektronová mikroskopie, optická emisní a RTG fluorescenční analýza, elektronová mikroanalýza a RTG difrakční analýza. Bylo zjištěno, že produktem tavby je železná lupa s nehomogenní distribucí uhlíku, s oblastmi čistého feritu, feriticko-perlitickými oblastmi (odhadované množství 0,2 % C) a oblastmi podeutektoidní oceli (cca 0,5 % C). V překovaném polotovaru železná lupa byl dokumentován zvýšený obsah uhlíku a výskyt ledeburitické struktury. Významnou strukturní fází přímo redukovaného železa jsou struskové vměstky, obsahujících wüstit, fayalit a amorfni skelnou fázi.

**Obr. 1:** (a) řez metalograficky zkoumané části železné lupy; (b) řez metalograficky zkoumané části výkovku z první fáze kování; (c) řez metalograficky zkoumané části vykovaného polotovaru; (d) struktura struskového vměstku z železné lupy: wüstit (světle šedá), fayalit (středně šedá), amorfni skelná fáze (tmavě šedá); (e) feriticko-perlitická struktura oceli železné lupy (přibližně 0,2 % C); (f) perliticko-feritická struktura oceli železné lupy (přibližně 0,5 % C).

Sekce : Kovové materiály - restaurování

## **Restaurování mešního kalichu s původní povrchovou úpravou**

Autor: Tomáš Mori  
Ročník: B2  
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství  
Školitel: Ing. Šárka Msallamová, Jaroslav Prášil, restaurátor s licencií



Mešní kalich, 19. století, stav po restaurování.

Předmětem restaurování byl kalich z 19. století, který patří k liturgickým předmětům králové-hradeckého biskupství. Skládá se z pěti částí (kupy, koše, ořechu, menšího zdobného dílu a nohy), které jsou navzájem spojeny matkou s podložkou zesponu nohy. Kalich je zdoben jednoduchými zdobnými prvky, především kanelurami. Pomocí přenosného XRF analyzátoru Delta a rastrovacího elektronového mikroskopu TESCAN VEGA 3 s EDS analyzátozem OXFORD Instruments INCA 350 bylo zjištěno následující prvkové složení. Většina dílů je mosazná s povrchovou úpravou stříbření (s velkým podílem zlata), kromě kupy, která je z pozlaceného stříbra. Z metalografických výbrusů a jiných indicií se dá usuzovat povrchová úprava pokovení žárovou metodou. Restaurátorské práce v sobě zahrnovaly pouze odstranění nečistot, mastnot a korozních produktů. Korozní produkty byly odstraněny roztokem 5% kyseliny sírové s přídavkem thiomocoviny. Nakonec byl povrch předmětu konzervován Paraloidem B72 v toluenu a byl navržen ochranný režim památky s ohledem na její uložení a opětné užívání během církevních obřadů.

Sekce : Kovové materiály - restaurování

## **Korozní produkty olova a jejich hydrofobní/ hydrofilní vlastnosti**

Autor: Kristýna Strachotová  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství  
Školitel: Ing. Šárka Msallamová

I přes uložení olověných památek v regulovaných podmínkách depozitářů, dochází k jejich koroznímu napadení, které je dáno interakcí těkavých organických látek (především organických kyselin) a olova. Jejich zdrojem jsou archiválie, dřevo, olejové a emulzní barvy, lepidla, plasty, lepenkové ochranné obaly aj. Pro studium vlastností korozních produktů  $PbCO_3$ ,  $PbS$ , jejich směsí,  $PbO$ , olovnatých solí karboxylových kyselin a jejich vlivu na korozní rychlost olova byly použity předkorodované olověné kupóny.  $PbCO_3$  byl získán pomocí 1mol  $Na_2CO_3$ ,  $PbS$  působením 0,1mol  $Na_2S$ . Roztoky byly nanášeny nátěrem a exponovány při 50°C a RV 80% 1 týden.  $PbO$  byl vytvořen expozicí olověného kupónu při  $t=300^\circ C$  po 3 dny. Jako zdroj těkavých organických kyselin byla použita lepenková krabice. Pomocí XRD analýzy a Ramanovy spektroskopie byly identifikovány vzniklé korozní produkty a pomocí GDS analýzy byly stanoveny tloušťky jejich vrstev. Nově vzniklá korozní vrstva olovnatých solí karboxylových kyselin ( $C>4$ ) zvyšuje drsnost povrchu a ve srovnání s vrstvou anorganických korozních produktů vykazuje, díky přítomnosti delších nepolárních uhlíkových řetězců v molekule, výrazně vyšší hydrofobicitu. Měření  $R_p$  korozních produktů ukázalo, že korozní vrstva olovnatých solí karboxylových kyselin nemá, i přes své hydrofobní vlastnosti, vliv na korozní rychlost olova.

Sekce : Kovové materiály - restaurování

## **Mosazný lustr**

Autor: Lukáš Vágner

Ročník: B4

Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství

Školitel: Ing. Šárka Msallamová, Jaroslav Prášil, restaurátor s licenci

Mosazný lustr ve stylu Art-deco byl pravděpodobně vyroben v 30. letech 20. století. Všechna tři ramena byla odlita z mosazi ( $\text{CuZn26Pb12}$ ), tělo lustru bylo vyráběno kovotlačením z mosazného plechu ( $\text{CuZn36}$ ). Povrch byl patinován a některé plochy a hrany leštěny. Chemické složení patiny a použitého kovu bylo určeno SEM Tescan Vega 3 s EDS analyzátozem Oxford Instruments INCA 350. Na několika lokálních místech se vyskytovalo korozní napadení, které v některých případech porušovalo souvislou vrstvu umělé patiny. V několika místech se nacházely mechanické deformace. Restaurátorské práce spočívaly v mechanickém odstranění nečistot a korozních produktů. Deformované části byly temperovány pro odstranění vnitřního pnutí a vyrovnány. Podle původního složení patiny byly vybrány patinovací lázně, které sloužily k jejímu lokálnímu obnovení. Zašlé leštěné plochy byly znovu mechanicky vyleštěny. Ocelové spojovací části byly stabilizovány a nakonzervovány mikrokrystalickým voskem rozpuštěným v technickém benzínu. Pohledové plochy byly ošetřeny akrylátovým lakem Paraloid B48. Po zhotovení nové elektroinstalace byly nainstalovány vhodné skleněné koule. Závěrem byl navržen vhodný ochranný režim, který zohlednil možnost opětovného používání lustru.

Sekce : Kovové materiály - restaurování

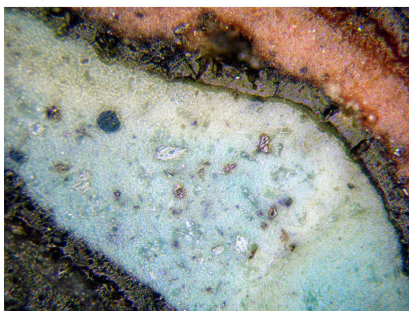
## **Litínové sloupy plzeňského nádraží Jižní předměstí**

Autor: Bc. Eva Voráčová

Ročník: M1

Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství

Školitel: Ing. Jiří Děd, CSc.



Obr. 1: Stratigrafie vrstvy nátěru na hlavici sloupu – modrá vrstva odpovídá původnímu nátěru.

Před rekonstrukcí plzeňského nádraží Jižní předměstí byly z litinových sloupů zastřešení nástupiště, datovaných do roku 1904, odebrány dva fragmenty ozdoby hlavic, u nichž byla provedena analýza chemického složení, metalografická analýza a stratigrafická analýza nátěrového systému.

Ozdoby hlavic byly odlity z eutektické litiny s lupínkovým grafitem, se zvýšeným obsahem fosforu a křemíku. Obsah síry odpovídá litině vyrobené v koksové

kuplovně. Dohledán byl i výrobce sloupů - Škodovy závody Plzeň, které zmíněný typ pece na počátku 20. století pro tavení litiny používaly. Fázové složení litiny je tvořeno perlitickou strukturou s fosfidovým ternárním eutektikem, které je složeno převážně z fosfidu železa. Uhlík se ve slitině vyskytuje převážně jako grafit, což je příčinou ne příliš zřetelného zvýraznění karbidu železa po leptání alkalickým pikrátem. Stratigrafickou analýzou (obr. 1) bylo zjištěno, že barva původního nátěru byla modrá. Plnivo tohoto nátěru je tvořeno síranem barnatým a oxidem zinečnatým, barvicí složku nátěru se použitou metodou nepodařilo identifikovat. Barva sloupů po rekonstrukci je tmavě hnědá a tedy neodpovídá původnímu vzhledu. Zjištěné skutečnosti poukazují na důležitost provedení svědomitého restaurátorského průzkumu před rekonstrukcí památek.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

## **Snížení výluhu alkálií z vnitřních povrchů farmaceutických obalů**

Autor: Bc. Lucie Čermáková  
Ročník: M1  
Ústav: Skla a keramiky  
Školitel: prof. Ing. Aleš Helebrant, CSc., Ing. Helena Hradecká

Skleněné obaly určené pro farmacii musí vykazovat dostatečně vysokou chemickou odolnost, která je dána limitními hodnotami výluhu alkálií z vnitřního povrchu těchto obalů podle standardní autoklávné zkoušky proti vodě (1h, 121 °C). Lahvičky malých objemů mívají často vzhledem k nevýhodnému poměru S/V nadlimitní výluhy alkálií, proto bývá jejich použití pro farmaceutické účely problematické. Předložená práce se proto zabývá provedením dezalkalizačních úprav vnitřních povrchů tří typů malých skleněných obalů (objem do 30 ml) s následným testováním upravených vzorků podle výše uvedené zkoušky. K dezalkalizaci bylo použito jednak loužení pomocí roztoků (HCl za laboratorní resp. zvýšené teploty 80 °C a destilovaná voda při 80 °C, doba loužení byla vždy 24h), jednak byla provedena úprava pomocí plynného HCl, vzniklého rozkladem  $\text{NH}_4\text{Cl}$  za teploty 450 °C v peci. Celkové množství alkálií ve výluzích bylo stanoveno titračně, množství Na bylo stanoveno pomocí AAS. Výsledky ukázaly, že všechny typy úprav za zvýšených teplot vedou k dostatečnému snížení alkálií v povrchu, pouze úprava za laboratorní teploty neměla požadované účinky. Nejvýrazněji byly alkálie odstraněny pomocí  $\text{NH}_4\text{Cl}$ , takto upravené lahvičky vykazovaly v závislosti na tvaru 10-20x nižší výluh Na oproti neupraveným vzorkům.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

## **Elastické vlastnosti porézní $\text{Al}_2\text{O}_3$ a $\text{ZrO}_2$ keramiky za vysokých teplot**

Autor: Jakub Černý  
Ročník: M1  
Ústav: Skla a keramiky  
Školitel: Doc. Dr. Dipl.-Min. Willi Pabst

Práce se zabývá přípravou porézní  $\text{Al}_2\text{O}_3$  a  $\text{ZrO}_2$  keramiky a následnou charakterizací jejich elastických vlastností v závislosti na pórovitosti a teplotě. Metodou lití keramických suspenzí byly připraveny vzorky v rozsahu pórovitosti 2-69 %. Jako pórotvorné činidlo byl použit bramborový škrob. Navíc byly metodou uniaxiálního lisování granulovaných směsí připraveny vzorky v rozsahu pórovitosti 1-49 % (v tomto případě byl jako pórotvorné činidlo použit rýžový škrob). Výsledky elastických měření ukázaly, že závislost Youngova modulu na pórovitosti lze u obou materiálů, pokud byly vypáleny na dostatečně vysokou teplotu (1600 resp. 1500 °C), popsat (v relativně dobrém přiblížení) exponenciálním vztahem. Na základě stanovených hodnot Youngova modulu pružnosti bylo dále prokázáno, že od teploty nad 1100 °C pro  $\text{Al}_2\text{O}_3$  resp. 1200 °C pro  $\text{ZrO}_2$  Youngův modul pružnosti výrazně klesá. Tento jev je spojený s anelastickým chováním, které se objevuje při těchto teplotách. Teplotní závislost Youngova modulu lze proložit empirickou fitovací rovnicí, jejichž průběh je evidentně nezávislý na pórovitosti. Proto bylo možné získat z naměřených teplotních závislostí (po normalizaci) referenční křivky, které jsou charakteristické pro daný materiál (ale nezávislé na pórovitosti).

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

## **Tvorba antibakteriálních vrstev metodou sol-gel na titanu a jeho slitinách s křemíkem**

Autor: Martin Černý  
Ročník: B3  
Ústav: Skla a keramiky  
Školitel: Ing. Diana Horkavcová PhD.

Titan se dnes hojně využívá při výrobě tělních implantátů a to z důvodu velmi dobré biokompatibility v organismu a výborných mechanických vlastností. Pro ještě lepší integraci titanu v těle se uvažuje o pórovitých strukturách, které by umožnily prorůstání kostních buněk skrz implantát a zajistili by tak jeho dokonalou fixaci. Tyto vlastnosti by mohly naplnit slitiny titanu s křemíkem.

Jednou z příčin špatného přijetí implantátu může být infekce. Tomuto problému se dá zabránit vylepšením vlastností titanu a to tvorbou antibakteriální vrstvy, která brání usazení bakterií na povrchu. V mém případě se jedná o vrstvy, obsahující stříbro ve formě  $\text{AgNO}_3$  a  $\text{Ag}_3\text{PO}_4$ , vytvořené metodou sol-gel na titanu a slitinách titanu s křemíkem ( $\text{TiSi}_5$ ,  $\text{TiSi}_{10}$ ). Měly by se tak kombinovat obě preferované vlastnosti – porézní struktura slitiny titanu s antibakteriálními účinky. Účinnost této vrstvy byla ověřena 24 hodinovým testem na bakteriích *E. coli*.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

## **Skla $\text{PbCl}_2\text{-Sb}_2\text{O}_3\text{-ZnO}$ pro fotoniku**

Autor: Drahomír Dvorský  
Ročník: B3  
Ústav: Laboratoř anorganických materiálů  
Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Kloužek, CSc.; Ing. Petr Kostka, Ph.D.

Přidávání těžkých kovů do skel se obvykle využívá k zvýšení jejich brilanosti, indexu lomu. To souvisí s velikostí a polarizovatelností elektronového obalu těžkých kovů. Vysoká relativní atomová hmotnost těžkých kovů zároveň snižuje fononovou energii materiálu a posouvá dlouhovlnnou hranu propustnosti k delším vlnovým délkám. Skla oxidů těžkých kovů mají tuto hranu posunutou oproti konvenčním sklům na bázi  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{B}_2\text{O}_3$  nebo  $\text{P}_2\text{O}_5$  výrazně dál, k 6-8  $\mu\text{m}$ . V této práci byl ověřen obor sklotvornosti v systému  $\text{PbCl}_2\text{-Sb}_2\text{O}_3\text{-ZnO}$ . U připravených vzorků skel byly pomocí termické analýzy měřeny charakteristické teploty  $T_g$ ,  $T_x$ ,  $T_p$ , u vytemperovaných a vybroušených vzorků byl stanoven obor optické propustnosti. U vzorků byla změřena hustota hydrostatickou metodou.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

## **Vliv povrchové úpravy nanoprášky na mikrotvrdost skla Float**

Autor: Tereza Chomyšínová  
Ročník: M1  
Ústav: Skla a keramiky  
Školitel: Ing. Miroslav Rada, CSc.

Cílem této práce bylo navrhnout zařízení a vypracovat metodiku pro aplikaci nanoprášků na povrch vzorků skla Float. Na základě této metodiky byl upraven povrch vzorků nanoprášky  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$  a  $\text{ZrO}_2$  a následně byl vyšetřen vliv jejich koncentrace na mikrotvrdost skla.

Pro dané zařízení byly stanoveny tyto doporučené experimentální podmínky: tryska v podobě síta o průměru ok 0,063 mm, vzdálenost vrchní hrany vzorků od trysky 3 cm, optimální množství suspenze 2 ml a teplota nanášení 605 °C.

Bylo zjištěno, že se zvyšující se koncentrací použitých nanoprášků se zlepšují hodnoty mikrotvrdosti. Nejlepších výsledků bylo dosaženo při použití  $\text{TiO}_2$ , zatímco  $\text{Al}_2\text{O}_3$  a  $\text{ZrO}_2$  zlepšily mikrotvrdost vzorků méně. Pro necínovou stranu vzorků byly při všech experimentech získány vždy vyšší hodnoty zlepšení mikrotvrdosti než pro stranu cínovou.

Dále byl stanoven vliv zatížení indentoru v rozmezí 10 g – 100 g na výsledné zlepšení mikrotvrdosti.

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

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

## **Špeciálne sklá v systéme $\text{PbCl}_2\text{-TeO}_2\text{-WO}_3$**

Autor: Martin Klůčka  
Ročník: B3  
Ústav: Laboratoř anorganických materiálů  
Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Kloužek, CSc.; Ing. Petr Kostka, Ph.D.

Témou práce je hľadanie a následné skúmanie nových skiel v systéme  $\text{PbCl}_2\text{-TeO}_2\text{-WO}_3$ , vhodných pre použitie v infračervenej optike a fotonike. Prvým krokom práce bolo nájdenie oblastí sklotvornosti v študovanom systéme a určenie vhodnej teploty tavenia pre rôzne zloženia skiel. Premiešané a vysušené zmesi surovín boli po dobu 8 minút tavené v elektrickej peci a odliate do mosadznej formy s izbovou teplotou. Vzorky boli vizuálne testované na prítomnosť kryštálov pomocou optického mikroskopu. Z fyzikálnych vlastností bola stanovená hustota hydrostatickou metódou, teplota skelnej transformácie pomocou termickej analýzy, po vybrúsení a vyleštení bol zmeraný index lomu a transmisné spektrá vo viditeľnej a infračervenej oblasti. Vybrané vzorky boli dopované erbiom a u nich boli merané ich fotolumiscenčné vlastnosti.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

## **Studium kinetiky krystalizace leucitu pomocí simultánní termické analýzy**

Autor: Iva Štampochová

Ročník: M1

Ústav: Skla a keramiky

Školitel: Ing. Alexandra Kloužková, CSc., Ing. Petra Zemenová

Náplní práce je syntéza tetragonálního leucitu krystalizací amorfního prekursoru a stanovení kinetických parametrů procesu krystalizace pomocí termických analýz.

Experimentální práce spočívala v přípravě amorfního leucitového prekursoru za hydrotermálních podmínek při teplotě 150 °C a čase 90 minut. Amorfni produkt syntézy byl následně kalcinován za konstantních teplot v různých časových intervalech, tak aby byly připraveny prášky s různým obsahem tetragonálního leucitu. Hlavním úkolem bylo vyhodnocení kinetických parametrů pomocí izokonverzních metod. K výpočtu byly použity krystalizační křivky získané termickými analýzami (STA). Hodnoty aktivační energie byly sledovány v závislosti na podmínkách syntézy prekursoru, pro prekursor připravený z roztoku hydroxidu draselného o koncentraci 2,5 mol/l byly hodnoty aktivační energie v rozsahu 364,58 – 404,33 kJ/mol.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

## **Úprava povrchu Ti implantátu za účelom jeho rýchleho vhojenia**

Autor: Barbara Černická

Ročník: M1

Ústav: Skla a keramiky

Školitel: Dr. Ing. Dana Rohanová

Nanášanie bioaktívnych vrstiev na inertný kovový substrát (Ti) s využitím bioaktívneho skla, keramiky 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, sklokeramických materiálov a bioaktívnej „keramiky“ HA a TCP vo forme práškov. Experiment prebiehal formou *in vitro* testu za statických podmienok. Pripravené vzorky boli exponované po dobu 14 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  $\text{Ca}^{2+}$  a  $(\text{PO}_4)^{3-}$  iónov vo výluhoch. Na základe získaných dát bola potvrdená resorbovateľnosť a bioaktívne chovanie vápenato-fosforečných keramických materiálov (TCP a HA). Sodno-vápenaté sklo oneskorilo indukciu HAp fáze oproti referenčnej podložke Ti-BIO o niekoľko dní. V prípade sklokeramických materiálov (PIG 3 a PIG 10) sa ich bioaktívne chovanie nepotvrdilo.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

## **Lisování práškových materiálů a jejich charakterizace**

Autor: Tereza Hoskovcová  
Ročník: M2  
Ústav: Skla a keramiky  
Školitel: Ing. Eva Gregorová, CSc.

Práce se zabývá přípravou korundových, zirkoničitých  $\text{ZrO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$  kompozitních tablet (AZ50) s řízenou pórovitostí metodou uniaxiálního lisování při tlaku 50 a 100 MPa. Na použité prášky byla aplikována obrazová analýza a bylo zjištěno, že údaje o velikosti granulí  $\text{Al}_2\text{O}_3$  neodpovídají údajům výrobce a jsou o polovinu menší (cca 90  $\mu\text{m}$ ). Nalisované tablety byly charakterizovány pevností v příčném tahu. Stanovené pevnosti se pohybovaly v rozsahu 270 - 824 kPa a 275 - 1203 kPa pro tablety lisované tlakem 50 respektive 100 MPa, přičemž platí, že  $\sigma_{\text{Al}_2\text{O}_3} < \sigma_{\text{AZ50}} < \sigma_{\text{ZrO}_2}$ . Řízení pórovitosti bylo provedeno metodou parciálního slinování v rozsahu teplot 1050-1600 °C.  $\text{Al}_2\text{O}_3$  slinuje pozvolna v teplotním intervalu 1150-1600 °C (pórovitost 42-3%) zatímco u  $\text{ZrO}_2$  (pórovitost 54-2%) se prudce snižuje pórovitost v rozsahu teplot 1050-1250 °C na hodnotu cca 5 %. Kompozit AZ50 v teplotním intervalu 1150-1550 °C (pórovitost 42-3%) slinuje pozvolna jako  $\text{Al}_2\text{O}_3$ . Velikost propojovacích krčků stanovená rtuťovou porozimetrií je 0.11  $\mu\text{m}$  u  $\text{Al}_2\text{O}_3$  a 0.08  $\mu\text{m}$  u  $\text{ZrO}_2$  při teplotě 1150 °C a se vzrůstající teplotou klesá. Naměřené hodnoty tepelných vodivostí u  $\text{Al}_2\text{O}_3$  se pohybují v rozmezí 4.9-33.5  $\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$  a u  $\text{ZrO}_2$  0.61-3.04  $\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ .

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

## **Skelné luminofory pro LED zdroje**

Autor: Miroslava Hujová  
Ročník: M1  
Ústav: Skla a keramiky  
Školitel: Dr. Ing. Martin Míka

Technologie LED se v 21. století setkala se všestranným využitím nejenom jako zdroj osvětlení veřejných prostranství či obydlí, ale našla své místo také v medicíně. Pokud má tento zdroj snadno nastavitelnou vlnovou délkou světla, pak má velký potenciál zejména pro léčbu rakoviny v kombinaci s fotosenzitivními látkami či pro léčbu buněk postižených Alzheimerovou chorobou stimulujícími světelnými impulzy. Náš výzkum je zaměřen na vytvoření luminoforu, který při excitaci modrou LED emituje teplé žluté světlo. Tento výzkum řeší problém moderních LED světel, která trpí nedostatkem červené, tudíž teplé složky světelného spektra. Jako velmi nadějný materiál jsme vyvinuli skelný luminofor na bázi sodnozinečnatohliníkokřemičitého skla obsahující europium a stříbro. Zjistili jsme, že temperováním těchto skel v rozpětí 500-650 °C po různou dobu je možné měnit vlnovou délku světla emitovaného luminoforem. Během temperování dochází ve sklech k redukci iontů  $\text{Ag}^+$  na  $\text{Ag}^0$  a k postupnému shlukování těchto nanočástic do klastrů, jež výrazně absorbují modré světlo a předávají absorbovanou energii atomům europia. Bylo pozorováno, že klastry  $\text{Ag}^0$  samy emitují zelené světlo a atomy Eu světlo červené. Nastavením teploty a doby temperování je možné vytvořit sklený luminofor s emisním spektrem zahrnujícím modrou, zelenou i červenou složku světla o požadované intenzitě.



Sekce : Anorganické nekovové materiály II

## **Ovlivnění stanovení velikosti částic metodou laserové difrakce měřicími parametry přístroje**

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

Práce se zabývá měřením distribuce velikosti částic práškových materiálů různých tvarů (kulaté, protáhlé, destičkové částice) a velikostí na přístroji Analysette 22 NanoTec (Fritsch, SRN). Je zaměřena na posouzení vlivu změn nastavení měřících parametrů přístroje (počet měřících poloh, rozsah měření, charakter konečné distribuční křivky) na konečné distribuční křivky. Pro vyhodnocení byla ve všech případech použita Fraunhoferova aproximace.. Bylo prokázáno, že stanovené hodnoty distribuce jsou nezávislé na počtu měřících poloh přístroje. Jako optimální počet měřících poloh se jeví hodnota 3. Měřící rozsah je nutno nastavovat dostatečně široký, aby nedocházelo k ovlivnění krajních hodnot distribučních křivek. Fraunhoferova aproximace může selhávat u částic s velikostí pod 1  $\mu\text{m}$ . Přístroj Analysette 22 NanoTec umožňuje relativní posouzení tvarových faktorů měřených částic.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

## **Testování roztoku SBF s pufrům HEPES**

Autor: Jitka Kulhavá  
Ročník: M1  
Ústav: Skla a keramiky  
Školitel: Dr. Ing. Dana Rohanová

Cílem práce bylo zjistit, zda nově vyvinutý roztok, který simuluje anorganickou část lidské tělní tekutiny (tzv. Simulated Body Fluid – SBF) a obsahuje pufr HEPES, dokáže udržet pH na fyziologické hodnotě (cca 7,4) po celou dobu *in vitro* testu. Pro srovnání byly testy provedeny i v původně používaném roztoku SBF, kde se k pufrování využívá látka TRIS. Výsledky statického testu, kde byly testovány materiály hydroxyapatit (HA) a  $\beta$ -trikalcium fosfát (TCP), ukázaly, že v roztoku SBF+HEPES se hodnota pH v průběhu experimentu také zvyšuje, ale mírněji než v roztoku SBF+TRIS. Srovnáme-li množství a rychlost odčerpávání  $\text{Ca}^{2+}$  a  $\text{PO}_4^{3-}$  iontů a hmotnostní přírůstky materiálů po expozici v obou roztocích, můžeme konstatovat, že použití rozdílných pufrůvacích systémů nemá vliv na výsledek testu. Rozdíly se projevily v krystalové struktuře nově se tvořící Ca/P fáze (metoda BET a SEM/EDS). V roztoku SBF+HEPES se tvoří částice s menším specifickým povrchem, větších rozměrů, zatímco v SBF+TRIS se vytvářejí částice s velkým specifickým povrchem. Pufr HEPES na rozdíl od TRISu lépe udržuje hodnotu pH, a tak by mohl být vhodnějším pufracím činidlem pro testování bioaktivity materiálů.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

## **Nová slitina TiSi10 a hledání způsobu přípravy bioaktivního povrchu**

Autor: Pavlína Rybová

Ročník: M2

Ústav: Skla a keramiky

Školitel: Dr. Ing. Dana Rohanová, konzultant: Doc. Ing. Pavel Novák, PhD

V rámci této práce byly testovány vzorky nově připravené slitiny TiSi10. Cílem práce bylo najít vhodné činidla a postup vedoucí k tvorbě celistvé vrstvy Ca-P fáze na povrchu nové slitiny. Za tímto účelem byly vzorky nejprve louženy v koncentrovaných kyselinách (HCl nebo  $\text{H}_3\text{PO}_4$ ) a poté 24 hodin v 10M roztoku NaOH. Takto upravené povrchy byly dále exponovány po dobu 24 hodin v prekalciфикаčním roztoku SCS2 (Supersaturated Calcification Solution). Pro vyhodnocení výsledků byla použita gravimetrie, optická mikroskopie a elektronová mikroskopie (SEM). Po prekalciфикации v roztoku SCS2 se na površích Ti a slitiny TiSi10 vytvořila vrstvička jehlicovitých krystalků OCP (oktalcium fosfát). Po srovnání vzorků loužených v HCl a  $\text{H}_3\text{PO}_4$ , můžeme konstatovat, že pro chemickou úpravu se zdá být vhodnější úprava kyselinou fosforečnou. Po expozici v roztoku SCS2 se na vzorcích TiSi10 vytvořila velmi jemnozrnná struktura nové Ca-P fáze, která pokrývala rovnoměrně celý povrch vzorku. V případě použití HCl vznikly několikanásobně větší jehlicovité krystalky a pokrytí povrchu tudíž nebylo tak celistvé.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

## **Interkalace komplexu candesartanu cilexetilu s karboxymethyl- $\beta$ -cyklodextrinem do Mg-Al hydrotalcitu**

Autor: Tereza Houšková

Ročník: B3

Ústav: Ústav chemie pevných látek

Školitel: doc. Ing. František Kovanda, CSc.

Zabudováním léčiv do pevných nosičů může být pozitivně ovlivněna jejich stabilita i farmakokinetické vlastnosti. Antihypertenzivum candesartan cilexetil (CC) je proléčivo velmi špatně rozpustné ve vodě. Jeho rozpustnost lze významně zlepšit vytvořením inkluzního komplexu s karboxymethyl- $\beta$ -cyklodextrinem (CMCD). Cílem práce byla příprava Mg-Al hydrotalcitu interkalovaného komplexem CC-CMCD. Komplex byl připraven smísením roztoku CC v methanolu a sodné soli CMCD ve vodě a následným odpařením rozpouštědel. Pro interkalaci komplexu rozpuštěného ve vodě byla použita aniontově-výměnná reakce s Mg-Al hydrotalcitem v dusičnanové formě. V pevné fázi bylo imobilizováno více jak 90 % léčivé látky přítomné v roztoku a prášková rentgenová difrakční analýza potvrdila interkalaci organických složek do mezivrství hostitelské struktury. Po smísení připraveného produktu s mikrokrytalickou celulórou byly připraveny tablety a provedeny disoluční testy v roztoku HCl o  $\text{pH}=1$  a ve fosfátovém pufru o  $\text{pH}=7,5$ . Pro srovnání byly disoluční testy provedeny rovněž s tabletami obsahujícími komplex CC-CMCD.

Sekce :        Analýza a vlastnosti léčiv

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

Autor:        Lenka Libosvárová  
Ročník:       B3  
Ústav:        Ústav chemie pevných látek  
Školitel:      Prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc.

V prezentované práci bude představena a diskutována metoda obrazové analýzy. Obrazová analýza je jednou z používaných metod stanovení distribuce velikosti částic účinných látek. Velikost částic je důležitý parametr farmaceuticky aktivních substancí (API), jelikož významně ovlivňuje výrobu a chování pevné lékové formy.

Metoda obrazové analýzy je rozdělena do několika kroků. V první části je třeba pořídit mikroskopický snímek vzorku studovaného materiálu. Dalším bodem je označení jednotlivých částic na snímku a získání údajů - délkových parametrů a poměrových ukazatelů - pro výpočet distribuce velikosti částic. Závěrečným krokem analýzy je vyhodnocení získaných údajů do histogramu distribuce velikosti částic pomocí aproximací na geometrická tělesa.

Právě způsob aproximace bývá nejčastěji označován jako slabý článek popisované metody, a proto bude v prezentované práci důsledně diskutován. Volba vhodné aproximace, délkových parametrů a poměrových ukazatelů vede k minimalizaci chyby a přesnějším výsledkům distribuce velikosti částic.

Sekce :        Analýza a vlastnosti léčiv

## **Technologie odstraňování fosfátů z odpadních vod**

Autor:        Bc. Lenka Holcová  
Ročník:       M1  
Ústav:        Ústav chemie pevných látek  
Školitel:      doc. Ing. Barbora Doušová, CSc.

Fosfor je významným biogenním prvkem. Jeho sloučeniny se účastní významných 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. Avšak velký obsah fosforečnanů v odpadních vodách 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 pomocí adsorpce na modifikovaný materiál na bázi hlinitokřemičitanů. Experimentálně získaná data jsou vyhodnocována na základě adsorpčních modelů (Langmuirova izoterma). Nedílnou součástí práce je také sledování stability fosfátem vysyceného sorbentu v přirozeném prostředí podle ČSN.

Sekce :        Analýza a vlastnosti léčiv

## **Využití rehydratovaných kaolinů k dekontaminaci oblastí zatížených toxickými oxoanionty**

Autor:        Bc. Petra Houdková  
Ročník:       M1  
Ústav:        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 chloridem železnatým, jako jedna z možností eliminace těchto látek z odpadních vod.

Jako sorbent byl použit kaolin Sedlec Ia upravený rehydratační metodou. Tepelnou úpravou (dehydroxylací) při 550 °C byl přírodní kaolin převeden na metakaolin, ze kterého byl následnou rehydratací v autoklávu v 0,6 M roztoku  $\text{FeCl}_2$  získán kaolin modifikovaný ionty Fe, a tedy selektivní k anionickým kontaminantům. Na takto upravené kaoliny byly sorbovány oxoanionty  $\text{As}^{\text{III}}$ ,  $\text{As}^{\text{V}}$ ,  $\text{Se}^{\text{IV}}$ ,  $\text{Se}^{\text{VI}}$  a  $\text{Sb}^{\text{V}}$  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

## **Využití annealovaného škrobu pro pevné lékové formulace**

Autor:        Bc. Veronika Sieberová  
Ročník:       M1  
Ústav:        Ústav chemie pevných látek  
Školitel:     prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc.

Annealing je metodou tepelné úpravy škrobu ve vodě. Suspenze škrobu, s více jak 60 hm.% vody, se udržuje po určitý časový interval při teplotě, která je vyšší než teplota skelného přechodu škrobu, ale zároveň nižší než počáteční teplota mazovatění. Vlivem tohoto procesu dochází ke změnám ve fyzikálně-chemických vlastnostech škrobu. Mezi tyto změny může patřit zvýšení granulární stability, kvality krystalické části granulí, snížení možnosti bobtnání granulí, zvýšení teploty mazovatění a zúžení jeho teplotního profilu. Tyto modifikace mohou být přínosně využity při formulaci pevné lékové formy.

Cílem této práce bylo upravit fyzikální vlastnosti vybraných škrobů pomocí annealingu a otestovat vliv těchto vlastností na rychlost uvolňování účinné látky z lékové formy se škrobovým základem. Annealingu byly podrobeny 4 běžné (bramborový, kukuřičný, pšeničný a rýžový) a jeden modifikovaný škrob (diškrobofosfát). Z původních i upravených škrobů společně s účinnou látkou (kyselinou acetylsalicylovou) byly připraveny tablety pro disoluční testy. Porovnáním disolučních profilů acetylsalicylové kyseliny byl vyhodnocen vliv změny vlastností škrobu na uvolňování účinné látky.

Sekce :        Analýza a vlastnosti léčiv

## **Nanozeolitové částice v alkalicky aktivovaných aluminosilikátech**

Autor:        Bc. Michal Šuhájek  
Ročník:       M1  
Ústav:        Ústav chemie pevných látek  
Školitel:      Ing. David Koloušek, CSc.

Předmětem práce byla příprava geopolymerní matrice, jejíž složení umožňuje vznik zeolitu A (poměr Si:Al = 1). Matrice o složení  $\text{SiO}_2$ : 1,5  $\text{Al}_2\text{O}_3$ : 0,7  $\text{Na}_2\text{O}$  +  $\text{H}_2\text{O}$  byla hydrotermálně alterována při 90 °C při různých expozičních časech (2-24 hodin). Bylo prokázáno, že množství zeolitu A se v produktech zvyšovalo s prodlužujícím se časem experimentu. Maximální obsah byl při dané teplotě zjištěn po 14 hodinové expozici. V delších experimentech byl zjištěn vznik hydroxysodalitu, který je kineticky stabilní fází. Zeolit A je významný díky svému skeletárnímu poměru Si:Al svojí vysokou iontově-výměnnou kapacitou. Navíc ss-NMR společně s měřením CEC (kationtově výměnné kapacity) poukázala na možnou přítomnost nanozeolitových částic v připravených preparátech, přestože XRPD odpovídala množství zeolitu A v nejlepším vzorku maximálně ze 40%.

Sekce :        Analýza a vlastnosti léčiv

## **Strukturní řady solvátů dihydro- $\alpha$ -ergokryptinia mesylátu**

Autor:        Bc. Tereza Kohoutová  
Ročník:       M2  
Ústav:        Ústav chemie pevných látek  
Školitel:      Ing. Jan Čejka, Ph.D.

Ergotoxiny, námelové alkaloidy produkované houbou paličkovcí nachovou jsou ve formě kapek a tablet používány k léčbě stařecké demence, Alzheimerovy choroby, při profylaxi migrény a hyperprolaktinémii. V předchozí práci se podařilo připravit a vyřešit struktury dvou solvátů: Dihydro - $\alpha$ -ergokryptinium mesylát monohydrát acetonitril solvát a dihydro- $\alpha$ -ergokryptinium mesylát monohydrát tetrahydrofuran solvát. Značná část struktury dihydro- $\alpha$ -ergokryptinia mesylátu je tvořena aminokyselinami, proto byly pro kokrystalizační screening jako kokrystalizační partner vybrány právě aminokyseliny. V průběhu testování kokrystalizačních možností se podařilo připravit několik solvátů a to: Dihydro- $\alpha$ -ergokryptinium mesylát monohydrát butylacetát solvát a dihydro- $\alpha$ -ergokryptinium mesylát monohydrát. Struktury byly vyřešeny programem Sir 92 a upřesněny programem Crystals.

Sekce :        Analýza a vlastnosti léčiv

## **Příprava fotosenzitizátorů na bázi molybdenových klastrů**

Autor:        Bc. Tereza Pastýřková  
Ročník:       M2  
Ústav:        Ústav chemie pevných látek  
Školitel:     doc. Ing. František Kovanda, Csc.

Fotosenzitizátory jsou sloučeniny excitující po ozáření molekulární kyslík na vysoce reaktivní singletový kyslík ( $^1\text{O}_2$ ), který je schopen ničit nádorové buňky. Práce se zabývá molybdenovými klastry  $[\text{Mo}_6\text{L}_8\text{L}_a^6]^{2-}$ , kde  $\text{L}^i$  a  $\text{L}^a$  jsou vnitřní a apikální halogenidové ligandy. Záměnou apikálních ligandů lze připravit klastry s různými fotofyzikálními vlastnostmi. Ze série syntetizovaných klastrů obecného složení  $[\text{Mo}_6\text{L}_8\text{L}_a^6]^{2-}$  byly pro další testy vybrány produkty, kdy na klastry byly jako apikální ligandy navázány adamantankarboxylové nebo thiokyanátové skupiny. U obou produktů byla ověřena stabilita ve vodném prostředí, která je předpokladem pro případnou aplikaci při fotodynamické terapii. Dostatečně vysoká koncentrace klastrů byla ve vodných roztocích zjištěna i po 5 dnech. Kluster s adamantankarboxylovými ligandy je ve vodě špatně rozpustný, a proto bylo nutné připravit jeho inkluzní komplex s dimethyl- $\beta$ -cyklodextrinem. Thiokyanátový kluster se podařilo interkalovat do struktury Mg-Al hydrotalcitu, což by mohlo vést ke zvýšení jeho stability.

Sekce :        Analýza a vlastnosti léčiv

## **Stabilita přírodně vázaného železa v jílech a jejich sorpční vlastnosti**

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

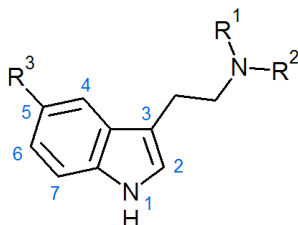
Jílové minerály se vyznačují nízkými hodnotami  $\text{pH}_{\text{ZPC}}$ , proto jsou známé jako selektivní sorbety kationtů. Cílem práce je ověřit možnost využití železa vázaného ve struktuře jílu ke zvýšení sorpční účinnosti materiálů vůči kontaminantům aniontové povahy.

Experimenty jsem prováděla s pěti typy jílových minerálů, které jsem nejprve třepala v různých agresivních roztocích a poté měřila koncentrace vyloučeného železa. To se v materiálech vyskytuje ve formě oxidů nebo oxidů hydroxidů železa, jejichž uvolněním ze struktury vznikají reaktivní částice  $\text{Fe}^{\text{III}}$  tvořící nová adsorpční místa pro sorpci toxických oxoaniontů. Pro sorpční testy jsem používala roztoky arsenu a antimonu o koncentraci  $10 \text{ mg l}^{-1}$ . Sorpce jsem provedla i na původních materiálech a následně jsem určila, o kolik procent se změnila sorpční účinnost na loužených jílových minerálech.

Z naměřených dat vyplynulo, že se nejvíce železa uvolnilo z jílu loužených v kyselém prostředí ( $\text{pH} = 1,1$ ), a tudíž bylo dosaženo nejvyšší sorpční účinnosti. Naopak alkalické prostředí ( $\text{pH} = 8,3$ ) vede ke snížení sorpční kapacity sledovaných jílu. Z hlediska materiálů bylo železo nejstabilnější v kaolinitech, kde se vyskytuje převážně v krystalické formě. Nejvíce železa se uvolňovalo ze struktury bentonitu.

## Syntéza haptenu drog odvozených od tryptaminu

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



Skupina I:  $R^1 = \text{CH}_3$ ,  $R^2 = (\text{CH}_2)_3\text{COOH}$ ,  
 $R^3 = \text{H}$  nebo  $\text{OCH}_3$

Skupina II:  $R^1 = R^2 = \text{CH}_3$ ,  $R^3 = \text{CH}_2\text{COOH}$

Tryptaminy tvoří skupinu přírodních a syntetických halucinogenních drog, které jsou ve velké míře zneužívány. Jejich detekci v tělních tekutinách uživatelů i rychlý screening přírodních materiálů by

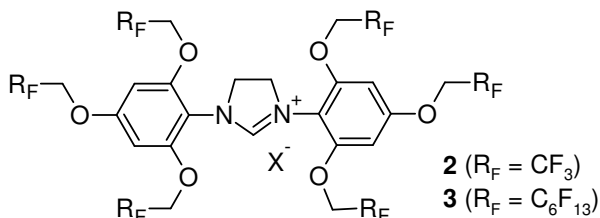
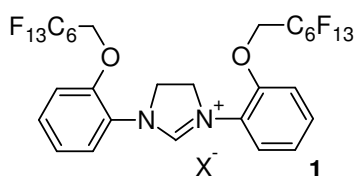
velmi zjednodušily imunochemické testovací kity. Protilátky, jež jsou základem těchto kitů, se získávají imunizací laboratorních zvířat konjugáty aktivní látky s BSA (hovězí sérový albumin). Pro přípravu konjugátu je nutné drogu modifikovat C2-C4 spojkou zakončenou karboxylovou funkcí, přes kterou je pak navázána na koncovou aminoskupinu lysinu. Byly připraveny dvě skupiny haptenu s odlišným umístěním spojky. Skupina I nese spojkou na aminoskupině tryptaminu a skupina II v poloze 5 indolového skeletu.

## Příprava dihydroimidazoliových solí modifikovaných polyfluoralkylovými řetězci

Autor: Iveta Klimánková  
 Ročník: M1  
 Ústav: Organické chemie  
 Školitel: Ing. Markéta Rybáčková, Ph.D.

Cílem mé práce byla příprava modifikovaných dihydroimidazoliových solí, které by sloužily jako intermediáty pro syntézu fluorových NHC ligandů. Tyto ligandy lze využít například pro přípravu analog Grubbových a Hoveydoových-Grubbových katalyzátorů metateze alkenů. V práci jsem studovala možnosti využití oxymethylenové spojky pro oddělení deaktivujícího vlivu perfluorovaného řetězce.

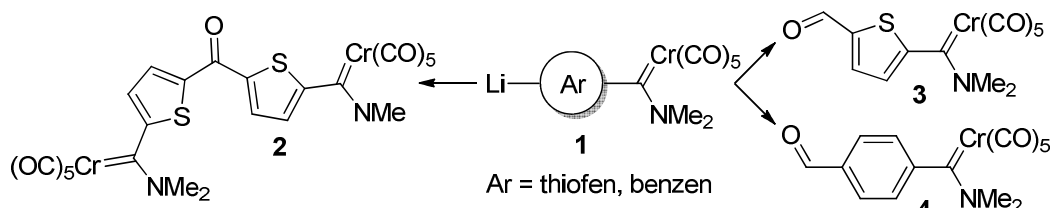
V první části práce jsem získala bis(polyfluoralkylovanou) dihydroimidazoliovou sůl **1** tříkrokovou syntézou, a to reakcí 2-aminofenolu s 1,2-dibromethanem na *N,N*-bis(2-hydroxy-fenyl)ethan-1,2-diamin, následnou polyfluoralkylací 1*H*,1*H*-perfluorheptyl-nonaflátem a závěrečnou cyklizací pomocí triethyl-orthoformiátu. Při přípravě intermediátů pro dihydroimidazoliové soli **2**, **3** jsem v druhé části práce vyšla z 1,3,5-trifluor-2-nitrobenzeny, který jsem příslušným fluorovaným alkoholátem substituovala do 3. stupně.



## Příprava funkcionalizovaných Fischerových komplexů chromu

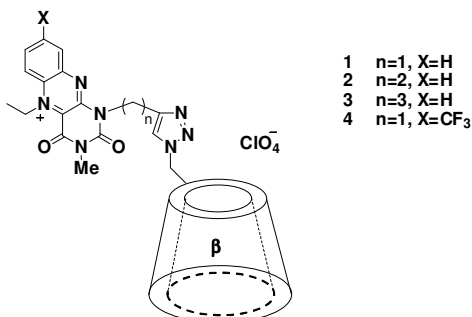
Autor: Hana Váňová  
 Ročník: M1  
 Ústav: Organické chemie  
 Školitel: Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D.

Fischerovy karbenové komplexy jsou sloučeniny, které nachází četné aplikace v přípravách složitých organických molekul. Nabízí zajímavé transformační schopnosti a uplatňují se při fotochemických a redoxních reakcích či při syntéze přírodních biologicky aktivních látek a léčiv. Tato práce se zabývá přípravou funkcionalizovaných Fischerových karbenových a biskarbenových komplexů s využitím reaktivity metalovaných karbenových komplexů **1**. Lithiované karbenové komplexy **1** lze snadno převést např. na biskarbenový komplex **2**. Reakcí **1** s DMF byly získány aldehydy **3,4**, u kterých byla testována reaktivita při kondenzačních reakcích.



## Konjugát flavinu s cyklodextrinem připravený s využitím „click chemistry“: Nový katalyzátor pro enantioselektivní oxidace

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



Příprava opticky čistých sulfoxidů oxidací prochirálních sulfidů patří mezi velmi žádané procesy ve farmaceutickém průmyslu. Vhodnými organokatalyzátory pro enantioselektivní sulfoxidace peroxidem vodíku se ukázaly být konjugáty složené ze dvou jednotek – flaviniové soli představující redoxní systém a cyklodextrinu, zajišťujícího stereoselektivitu reakce. Katalyzátor, jehož dvě části jsou spojeny amidovou vazbou umožňuje téměř kvantitativní konverze a enantioselektivitu až 80 % u aromatických a až 91 % u alifatických substrátů. Nově vypracovaný

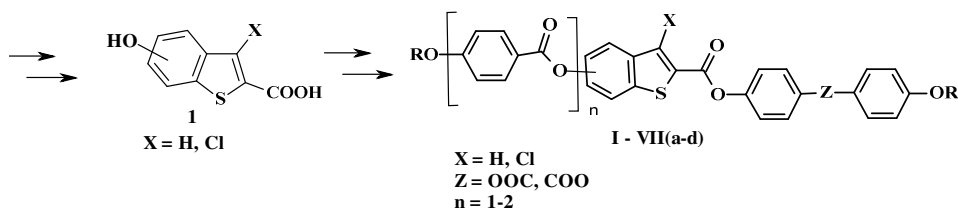
postup využívá ke spojení dvou jednotek „click chemistry“, což značně zjednodušuje syntézu konjugátu. Byla připravena řada katalyzátorů **1-4**, lišících se délkou spojky a dále substitucí alloxazinového jádra, jejichž aktivita a enantioselektivita byla studována na modelových substrátech.



## Substituovaný benzo[*b*]thiofen: centrální jádro kapalně krystalických materiálů

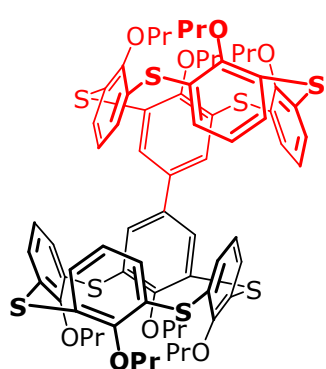
Autor: Tomáš Hodík  
Ročník: M1  
Ústav: Organické chemie  
Školitel: Ing. Václav Kozmík, CSc.

Pro syntézu kapalně krystalických materiálů je nejdůležitějším prvkem centrální jádro. V návaznosti na naše předchozí zkušenosti se syntézou heterocyklických sloučenin jsme vypracovali syntézu jádra na bázi disubstituovaného, případně trisubstituovaného benzo[*b*]thiofenu **1**. Tato jádra byla následně použita pro syntézu kapalných krystalů kalamitického a především lomeného tvaru s využitím esterových spojek. Ve své práci se zabývám jak syntézou derivátů benzo[*b*]thiofenu a cílených potenciálních mesogenů, tak i studií mesomorfního chování ve vztahu ke struktuře produktů.



## Metalace thiocalix[4]arenu

Autor: Filip Botha  
Ročník: M2  
Ústav: Organické chemie  
Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.



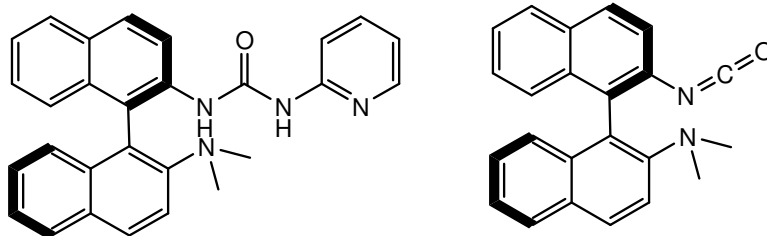
Thiocalix[*n*]areny jsou heterocyklická analoga calixarenů „klasických“, která disponují unikátní prostorovou strukturou a komplexními vlastnostmi. Přítomnost čtyř atomů síry namísto methylenových můstků způsobuje zcela neobvyklé chování při elektrofilních substitucích. Přímé zavedení substituentu do *meta*-polohy na aromatické jádro tak umožňuje elegantní tvorbu inherentně chirálních sloučenin s potenciální aplikací v asymetrické katalýze či enantioselektivním rozpoznávání neutrálních molekul a iontů.

Prezentovaná práce se zabývá merkurací thiocalix[4]arenového skeletu, imobilizovaného v *kónické* a *1,3-střídavé* konformaci. Organortuťnaté intermediáty jsou využity k syntéze složitějších inherentně chirálních i achirálních supramolekulárních systémů v palladiem katalyzovaných homo- a cross-couplingových reakcích a také pro halogeno-demerkurační reakce.

## Příprava potenciálního organokatalyzátoru na bázi 1,1'-binaftalen-2,2'-diaminu

Autor: David Just  
Ročník: M1  
Ústav: Organické chemie  
Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.

Katalýza pomocí malých organických molekul je rozvíjející se významný obor novodobé chemie. Tato práce se zabývá syntézou derivátů močoviny s využitím monosubstituovaného binaftalenového skeletu. Vzniklé deriváty by mohli představovat potenciální katalyzátory, které by mohly zvýšit rychlost a výtěžek u různých reakcí a vést k čistým stereoisomerům. Důležitým faktorem ovlivňující vlastnosti katalyzátoru je substituent na močovině. Substituenty používané obvykle v dané problematice jsou omezeny komerční dostupností isokyanátů. Proto byl připraven *N,N*-dimethyl-1,1'-binaftyl-2-amino-2'-isokyanát díky němuž je možno použít jakýkoliv dostupný amin, například 2-aminopyridin.

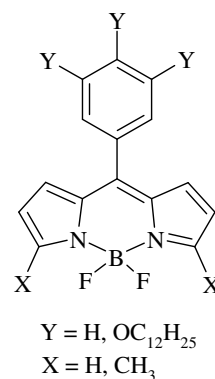


## BODIPY barviva pro studium buněčných membrán

Autor: Bc. Tereza Prausová  
Ročník: M2  
Ústav: Organické chemie  
Školitel: prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.  
Konzultant: Mgr. Marek Cebecauer, PhD., Mgr. Piotr Jurkiewicz, Ph.D.

Tato práce je zaměřená na syntézu BODIPY sloučenin (4,4-difluor-4-bora-3a,4a-diaza-s-indacen), které se využívají pro studium syntetických materiálů a biologických struktur. V současnosti se tyto látky využívají i pro studium lipidových dvojvrstev. V těchto látkách se využívá jev rotace fenylové skupiny v poloze *meso* fluoroforu BODIPY.

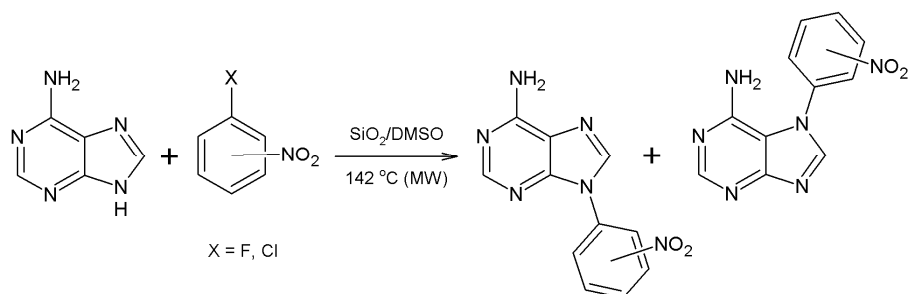
Byly syntetizovány mono-, di- a trisubstituované benzaldehydy a ty pak následně byly použity k syntéze příslušných BODIPY barviv. Dále byly charakterizovány fluorescenční vlastnosti a lokalizace BODIPY barviv v lipidové dvojvrstvě. Cílem mé práce byla příprava molekulárních BODIPY rotorů, které by zjišťovaly organizovanost membrán. Čím více je membrána uspořádaná, tím méně volnosti rotor má a tím méně rotuje. Rotace fluoroforu způsobuje snížení fluorescence a ještě větší prodloužení doby vyhasínání. Tento rozdíl je nejvíce patrný mezi kapalnou a gelovou fází. Pozornost se soustředila na charakter a počet alkoxylových řetězců připojených k benzenovému jádru v *meso*-poloze BODIPY.



## Přímá arylace adeninu fluor- a chlornitrobenzeny – vliv mikrovln

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

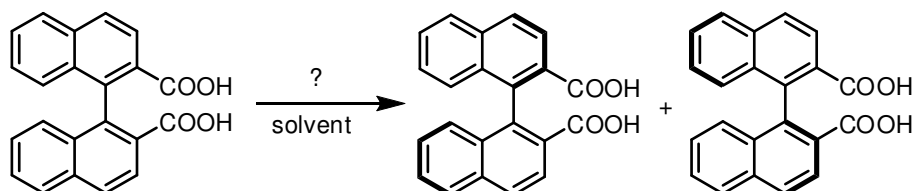
Přímá arylace adeninu fluor- a chlornitrobenzeny poskytuje směs *N*7 a *N*9 substituovaného adeninu. Tyto deriváty byly pomocí  $\text{H}_2/\text{Pd}$  zredukovány na příslušné aminofenyladeniny. *N*7 isomery, které jsou jinými syntetickými postupy velmi těžko dostupné, mohou být využity jako standardy pro analýzy DNA-aduktů při biologickém monitorování, zatímco *N*9 isomery jsou považovány za látky s potenciální biologickou aktivitou. Působení mikrovln se při reakcích s chlornitrobenzeny projevilo signifikantním zvýšením reakční rychlosti, přičemž poměr isomerů *N*9/*N*7 zůstal zachován.



## Nové pokusy štěpení racemátu kyseliny 1,1'-binaftalen-2,2'-dikarboxylové

Autor: Ondřej Kollár  
 Ročník: M2  
 Ústav: Organické chemie  
 Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.

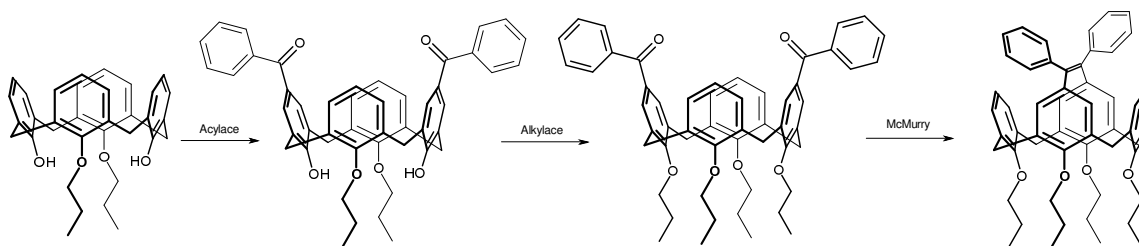
Kyselina 1,1'-binaftalen-2,2'-dikarboxylová představuje vzhledem k přítomnosti axiálně chirálního skeletu binaftalenu vhodný precursor, který lze využít v celé řadě příprav chirálních látek. Širšímu použití této kyseliny ovšem brání nízký výtěžek štěpení racemátu, což zvyšuje i cenu této látky. Dosud bylo popsáno štěpení racemátu kyseliny zejména pomocí sekundárních aminů, například cyklohexylethylaminu, nebo alkaloidu chininu. Kromě zmíněných aminů žádná z publikovaných metod nedosahuje uspokojivého výtěžku štěpení. Zkoušeny jsou proto nové přístupy ke štěpení racemátu kyseliny, jejichž výsledky budou diskutovány.



## Syntéza *p*-acylcalix[4]arenů a rigidizace calixarenového skeletu McMurryho reakcí

Autor: Bc. Jan Skácel  
 Ročník: M2  
 Ústav: Organické chemie  
 Školitel: doc. Ing. Jan Budka, PhD.

*p*-Acylované deriváty calixarenů v minulosti nebyly využívány jako substráty pro další transformace především z důvodu jejich obtížné přípravy. V mé prezentaci představím dvě nově vyvinuté syntézy těchto derivátů, které jsou snadno proveditelné a poskytují vynikající výsledky. Tyto deriváty byly použity k rigidizaci calixarenového skeletu pomocí intramolekulární McMurryho reakce. Tato transformace poskytla sérii unikátních struktur, které budou dále studovány.

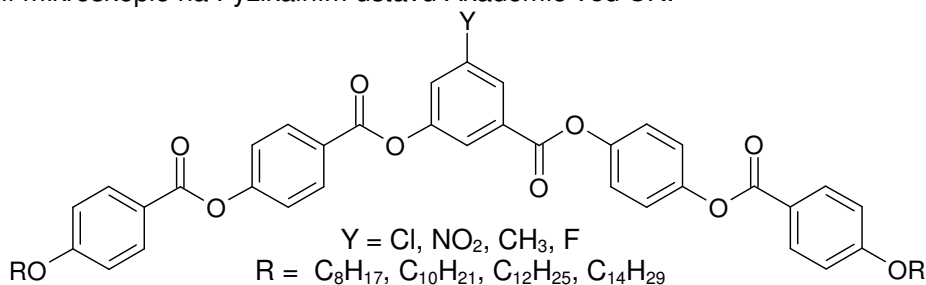


## Syntéza nových lomených kapalných krystalů na bázi 5-substituované-3-hydroxybenzoové kyseliny

Autor: Helena Skopalová  
 Ročník: M2  
 Ústav: Organické chemie  
 Školitel: prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

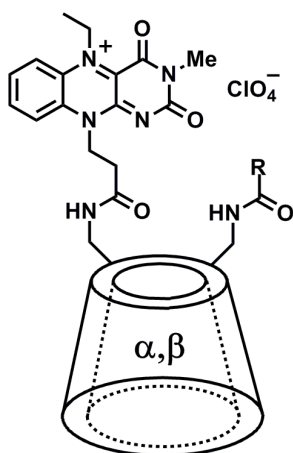
Kapalné krystaly nacházejí své uplatnění především v optoelektronických aplikacích. V posledních letech došlo k prudkému rozvoji intenzivního výzkumu zejména v oblasti lomených kapalných krystalů, neboť bylo prokázáno, že vykazují makroskopickou chiralitu, a to i bez přítomnosti chirálního prvku v molekule.

V rámci této práce byly připraveny čtyři série látek, lišící se navzájem charakterem laterálního substituentu. V rámci každé série byly vlastnosti jednotlivých materiálů dále modifikovány použitím různé délky terminálních alkoxylových řetězců. Byly rozpracovány další dvě série látek, lišící se orientací esterových spojek v prodlužujících ramenech. Mesomorfní vlastnosti cílových materiálů byly studovány pomocí diferenční skenovací kalorimetrie a optické polarizační mikroskopie na Fyzikálním ústavu Akademie věd ČR.



## Flavin-Cyklodextrinové katalyzátory odvozené od disubstituovaných cyklodextrinů

Autor: Jan Zelenka  
 Ročník: M1  
 Ústav: Organické chemie  
 Školitel: doc. Ing. Radek Cibulka, Ph.D., Mgr. Tomáš Kraus, Ph.D.



Flaviniové a pyrimidinové soli jsou účinnými katalyzátory oxidace sulfidů na sulfoxidy s využitím peroxidu vodíku, nebo kyslíku, jako stechiometrického oxidačního činidla. Dříve připravené flavin-cyklodextrinové konjugáty patří mezi nejúspěšnější organokatalyzátory enantioselektivních oxidací sulfidů na sulfoxidy. Předpokládaný mechanismus enantioselektivní oxidace spočívá v komplexaci substrátu do kavity cyklodextrinu, která je inherentně chirální.

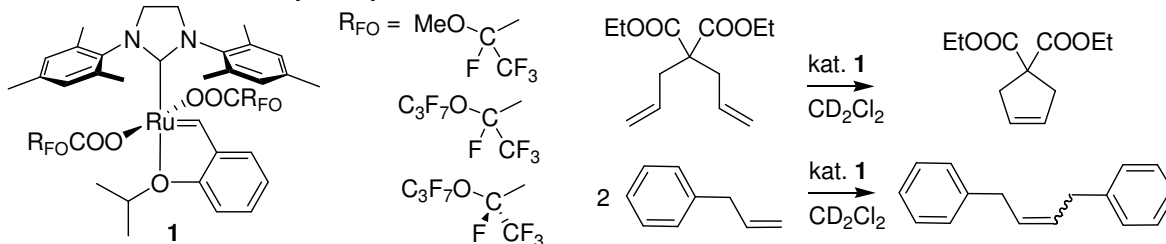
Jednou z možných cest zvýšení účinnosti flavin-cyklodextrinových katalyzátorů při enantioselektivních oxidacích je modifikace cyklodextrinového skeletu. Cílem mé práce je vyvinout metodu přípravy disubstituovaných cyklodextrinových podjednotek umožňujících jednoduché připojení jednak aktivní katalytické jednotky, flavinu či pyrimidinu, a rovněž další chirální skupiny zvyšující stereodiskriminaci při katalyzovaných reakcích.

Sekce : Organická chemie M2

## Příprava polyfluorovaných rutheniových katalyzátorů pro enantioselektivní metateze

Autor: Lucie Rathouská  
 Ročník: M2  
 Ústav: Organické chemie  
 Školitel: doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

V naší laboratoři se zabýváme syntézou rutheniových katalyzátorů modifikovaných perfluoralkylovými řetězci. V první fázi své práce jsem substituovala chloridové ligandy Hoveydových-Grubbsových katalyzátorů 2. generace racemickými polyfluoropolyoxaalkanoáty. Reaktivitu a chemoselektivitu připravených katalyzátorů jsem studovala na metatezi s uzavřením cyklu a zkřížené metatezi modelových substrátů. Připravené katalyzátory mají výrazně nižší aktivitu než výchozí komerční katalyzátor, ale naproti tomu mají mnohem vyšší chemoselektivitu, která snižuje zastoupení vedlejších produktů. V poslední části práce jsem rezolucí získala enantiomerně čisté polyfluoropolyoxaalkanoáty a z nich následně připravila chirální rutheniové katalyzátory.

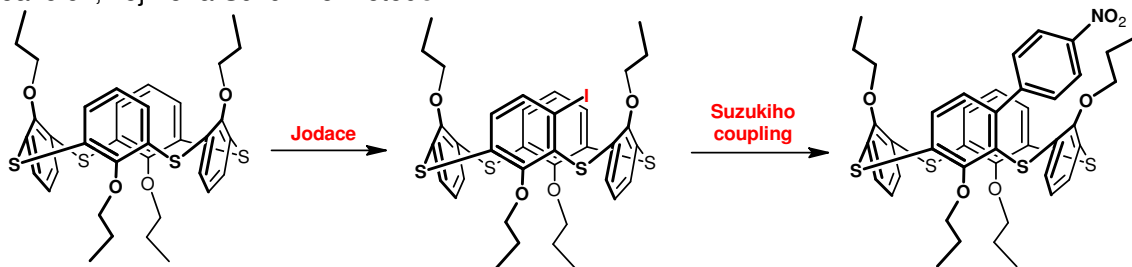


## Syntéza inherentně chirálních thiacalix[4]arenů pro cross-couplingové reakce

Autor: Jan Lukášek  
 Ročník: M2  
 Ústav: Organické chemie  
 Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

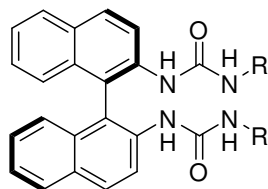
Thiacalixareny jsou sírná analoga klasických calixarenů, které tvoří společně s cyklodextriny, porfyriny a fullereny základní pilíře moderní supramolekulární chemie. Zajímavou modifikací horního okraje thiacalix[4]arenu je zavedení jedné či více funkčních skupin do *meta*-polohy, čímž získáme z původně achirální látky inherentně chirální derivát.

Dosud byly syntetizovány pouze thiacalix[4]areny s halogeny v *para*-poloze, zatímco tato práce se zabývá přípravou nových *meta*-substituovaných inherentně chirálních derivátů. Bude diskutována regioselektivita halogenační reakce (*para*- vs. *meta*-substituce) v závislosti jak na typu použitého halogenačního činidla, tak i konformaci thiacalix[4]arenu (*kónická* vs. *1,3-střídavá*). Tyto nově připravené látky slouží ke studiu reaktivity při cross-couplingových reakcích, zejména Suzukiho metodě.



## Ligandy na bázi binaftalenu pro enantiomerní komplexaci

Autor: Michal März  
 Ročník: M2  
 Ústav: Organické chemie  
 Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.



R= různé arylové zbytky

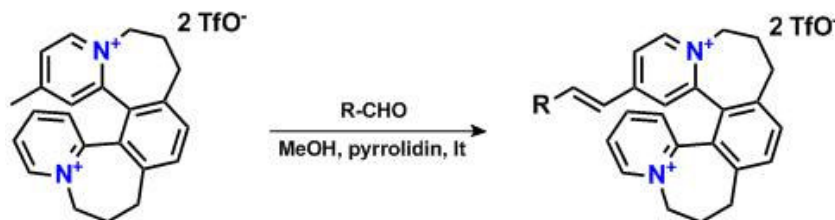
Deriváty močoviny a thiomčoviny jsou pro svoji schopnost interakce s jinými organickými sloučeninami využívány jako ligandy pro komplexaci. Po zavedení binaftalenového skeletu na molekulu močoviny vznikají chirální sloučeniny, a proto je zajímavé zabývat se syntézou těchto derivátů. Práce se věnuje

přípravě různých strukturních derivátů binaftalenových močoviny. Tyto močoviny byly pak dále využívány k enantioselektivní komplexaci chirálních látek a ke kinetické resoluci.

## Syntéza substituovaných [5]helquatů a testování jejich fotokatalytické aktivity

Autor: Pavel Švec  
 Ročník: M1  
 Ústav: Organická chemie, Organická chemie a biochemie AV ČR, v.v.i.  
 Školitel: Mgr. Filip Teplý, Ph.D.

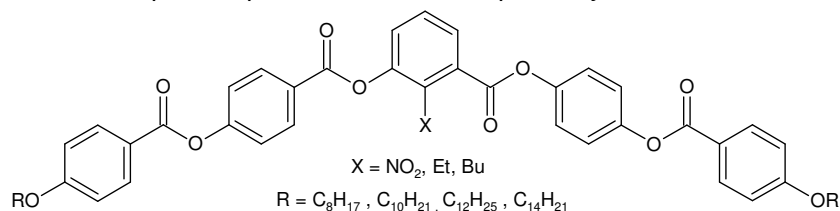
Helquaty, jak už jejich název odvozený od pojmenování „helikální extendovaný diquat“ napovídá, nesou strukturní motivy helicenů a viologenů a kombinují tak vlastnosti dvou skupin látek s množstvím aplikací. Má práce předkládá postup pro jednoduchou přípravu škály substituovaných [5]helquatů ze společného prekursoru methyl[5]helquatu. Klíčová Knoevenagelova kondenzace methyl[5]helquatu s aldehydy umožňuje jednokrokové zavedení řady substituentů na skelet [5]helquatu. Mnou optimalizovanou multigramovou tříkrokovou syntézou bez chromatografických purifikací meziproductů jsem připravil výchozí methyl[5]helquat, jehož následnou kondenzací s různými aldehydy jsem získal celkem 14 substituovaných [5]helquatů. U vybraných derivátů jsem testoval fotokatalytickou aktivitu v Povarovově reakci, která je důležitým nástrojem syntézy farmaceuticky relevantních látek.



## Lomené kapalně krystalické odvozené od 2-substituované 3-hydroxybenzoové kyseliny

Autor: Lenka Pallová  
 Ročník: M2  
 Ústav: Organická chemie  
 Školitel: Ing. Václav Kozmík, CSc.

V rámci studia kapalných krystalů jsem již dříve syntetizovala materiály s centrálním jádrem 2-substituované 3-hydroxybenzoové kyseliny ( $X = \text{Cl}, \text{F}, \text{CH}_3$ ), které vykazovaly zajímavé kapalně krystalické vlastnosti. V návaznosti na tyto výsledky a s cílem modifikovat molekulární strukturu a vlastnosti těchto materiálů jsem syntetizovala další 2-substituované ( $X = \text{NO}_2, \text{Et}, \text{Bu}, \text{Ph}$ ) 3-hydroxybenzoové kyseliny a využila je pro syntézu nových lomených kapalných krystalů. Byly připraveny čtyři cílové materiály na bázi 2-nitro-3-hydroxybenzoové kyseliny, které se lišily délkou terminálních alkoxylových řetězců ( $R = \text{C}_8\text{H}_{17}, \text{C}_{10}\text{H}_{21}, \text{C}_{12}\text{H}_{25}, \text{C}_{14}\text{H}_{29}$ ). Dále byly připraveny dva modelové materiály s centrálním jádrem 2-ethyl-3-hydroxybenzoové kyseliny a 2-butyl-3-hydroxybenzoové kyseliny. Mesomorfní vlastnosti byly stanoveny diferenční skenovací kalorimetrií a optickou polarizační mikroskopií na Fyzikálním ústavu AV ČR.

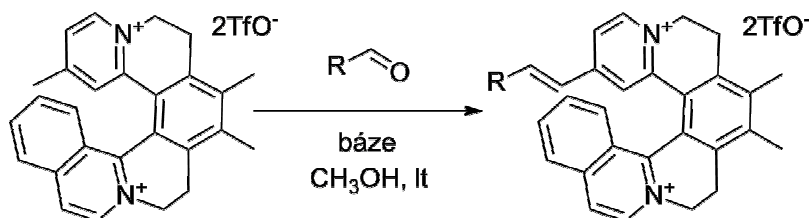


## Deriváty helquatu, syntéza a vlastnosti

Autor: Michael Jirásek  
Ročník: M1  
Ústav: Organické chemie  
Školitel: Mgr. Filip Teplý, Ph.D.

Helquaty jsou relativně mladou skupinou látek, strukturním hybridem helicenů a viologenů. Poté co byla v naší skupině vyvinuta syntéza racemátů a metoda štěpení různých helquatů na enantiomery, je žádoucí helikální skelet funkcionalizovat.

Jako funkcionalizovatelná skupina byla od počátku syntézy přítomná prostá methylová skupina ve vhodné poloze vůči kvartérnímu dusíku. Ta podléhá Knoevenagelově kondenzaci s arylaldehydy. Tato reakce probíhá snadno za mírných podmínek a lze využít širokou paletu dostupných arylaldehydů. Byla tak připravena série produktů, lišících se svými vlastnostmi. Tyto vlastnosti jsou a budou předmětem dalšího zkoumání.



## Syntéza derivátů cysteinu a valinu pro studium globinových aduktů

Autor: Kamil Hejl  
Ročník: M1  
Ústav: Organické chemie  
Školitel: doc. Ing. Igor Linhart, CSc.

Reakcí elektrofilů s krevními proteiny vznikají v organismu proteinové adukty. Po jejich hydrolytickém štěpení je získána směs aminokyselin včetně těch obsahujících navázaný elektrofil. Pro analýzu těchto látek je třeba připravit syntetickou cestou autentické standardy. Cílem této práce je připravit adukty cysteinu a valinu odvozené od jejich reakcí s ethylenoxidem a styren-7,8-oxidem.

Modifikací známých postupů byly syntetizovány *S*-(2-hydroxyethyl)-L-cystein a *N*-(2-hydroxyethyl)valin. Pro přípravu aduktů cysteinu se styren-7,8-oxidem byly studovány reakce *S*-cysteinu s 2-brom-1-fenylethanolem (2,1-BFOL) a 2-brom-2-fenylethanolem (2,2-BFOL). Žádané adukty se nepodařilo izolovat, neboť za zvolených reakčních podmínek docházelo k příliš nízké konverzi a v případě reakce s 2,2-BFOL docházelo k intramolekulární cyklizaci produktu za vzniku odpovídajícího thiazanového derivátu, který byl izolován.

Reduktivní aminací methylesteru kyseliny 2-oxoisopentanonové fenylglycinolem vznikl methylester *N*-(1-fenyl-2-hydroxyethyl)valinu, který po hydrolyze poskytuje intramolekulární cyklizací lakton i v nepatrně kyselém prostředí. Syntetický postup bude optimalizován a v návaznosti na něj připraven druhý isomer valinu, odvozený od 2-amino-1-fenylethanolu.



Sekce : Organická chemie M3

## **Dinukleární polyazamakrocyclické komplexy jako katalyzátory štěpení fosfodiesterové vazby**

Autor: Daniel Bím  
Ročník: M2  
Ústav: Organické chemie  
Školitel: Dr. Ing. Jana Hodačová

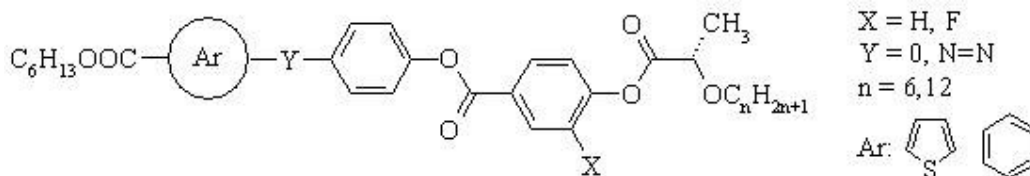
Fosfodiesterové vazby jsou základním stavebním kamenem všech živých systémů. Tvoří kostru např. nukleových kyselin, fosfolipidů nebo cAMP. Hydrolyze této vazby byla proto věnována zvýšená pozornost a za účelem štěpení řetězce DNA či RNA byla vyvinuta řada syntetických fosfodiesteráz. Ve většině případů se využívá dinukleárních komplexů (především měďnatých a zinečnatých) a ukazuje se, že jejich aktivita je vyšší než v případě komplexů mononukleárních. Práce se zabývá jednak syntézou dosud nepopsaného dinukleárního polyazamakrocyclického katalyzátoru sloužícího ke štěpení fosfodiesterové vazby, jednak kvantově-chemickými výpočty, které mají sloužit k nalezení přesné struktury katalyzátoru, popisu jeho vazebného místa při interakci s modelovou látkou RNA a objasnění mechanismu vlastní katalyzované hydrolytické reakce.

Sekce : Organická chemie M4

## **Syntéza a fyzikální vlastnosti nových kapalných krystalů s "de Vriesovým" fázovým přechodem**

Autor: Anna Poryvai  
Ročník: M2  
Ústav: Organické chemie  
Školitel: Ing. Michal Kohout, Ph.D.

Při fázovém přechodu SmA\*-SmC\* obvykle dochází ke smrštění tloušťky vrstvy v důsledku odklonu vrstev od normály (tilt). V naší dosavadní studii jsme zkoumali sloučeniny níže uvedeného obecného vzorce a zjistili jsme, že vykazují jen malé smrštění tloušťky vrstvy (~ 3 %), tedy lze je řadit mezi tzv. de Vriesovy materiály. Avšak tato hodnota je stále příliš velká pro případné aplikace těchto materiálů v displejích na bázi kapalných krystalů (LCD). Cílem práce proto bylo optimalizovat strukturu zkoumaných materiálů s ohledem na: (i) změnu aromatické jednotky v centrálním jádře, (ii) přítomnost spojky mezi aromatickými jádry a (iii) laterální substituci na fenylovém jádře.



## Syntéza atropoizomerních flavinů jako katalyzátorů enantioselektivních oxidací

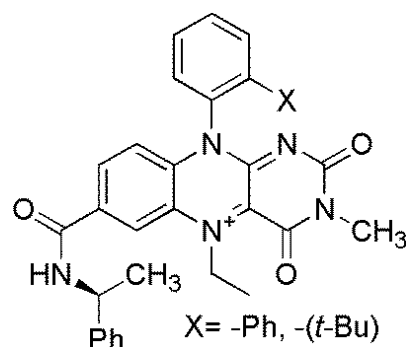
Autor: Vít Zvoníček

Ročník: M1

Ústav: Organické chemie

Školitel: Ing. Hana Kotoučová, doc. Ing. Radek Cibulka, Ph.D.

Mezi perspektivní katalyzátory stereoselektivních oxidací peroxidem vodíku patří deriváty 10-fenylflavinů, které mají v *ortho*- poloze objemný substituent zabraňující volné rotaci fenylu. Atropoizomerní flaviny byly připraveny jako směsi diastereomerních amidů s chirálními aminy, což umožňuje jejich separaci ve větším měřítku. Kvarternizací flavinů poté vznikly aktivní katalyzátory, které byly testovány při sulfoxidacích modelových substrátů.



## Příprava prekurzorů pro syntézu diaza[6]helicenů

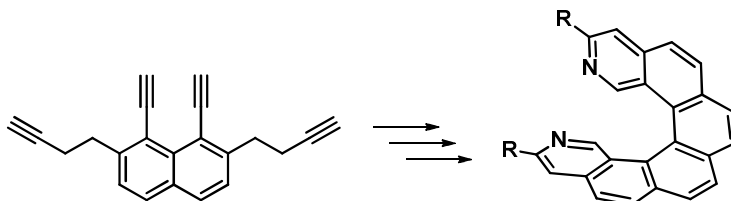
Autor: Tomáš Beránek

Ročník: M1

Ústav: Organické chemie

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

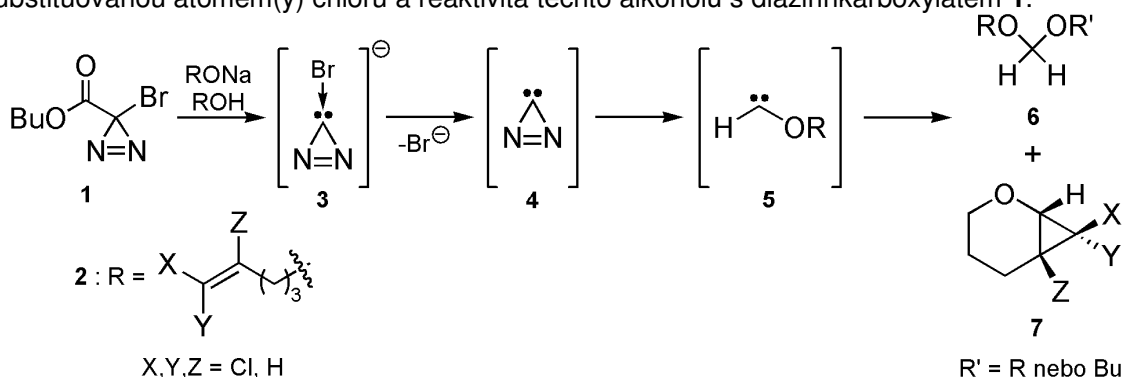
Azaheliceny patří do skupiny helicenů, skládajících se z jednoho či více pyridinových kruhů. Vzhledem k jejich výjimečným opto-elektronickým vlastnostem mohou nalézt uplatnění v různých oblastech materiálové chemie. Absence efektivních metod k získávání diazahelicenů v dostatečném množství brání většímu poznání těchto sloučenin a tak i jejich většímu rozšíření v rámci aplikovaného výzkumu. Fotochemické postupy nedosahují takových výsledků jako je tomu u karbohelicenů. Bylo však vyvinuto několik slibných metod pro přípravu azahelicenů, které se opírají zejména o cyklotrimerizační reakce a mohly by se stát opěrným bodem při syntéze diazahelicenů. Cílem mé práce je příprava vhodných prekurzorů, které by následnou [2+2+2] cyklotrimerizační reakcí poskytovaly příslušné diazaheliceny.



## Cykloadiční reakce alkoxykarbenů generovaných z diazirinylidenu

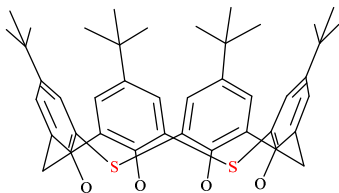
Autor: Bc. Rafael Navrátil  
Ročník: M1  
Ústav: Organické chemie  
Školitel: Ing. Tomáš Martinů, Ph.D.

3-Bromdiazirin-3-karboxyláty (**1**) reagují s alkoxydovými ionty ve smyslu acylové nukleofilní substituce za vzniku odpovídajících karbonátů a odštěpení slabě vázaného komplexu **3** bromidového iontu s diazirinylidenem ( $\alpha$ -CN<sub>2</sub>, **4**). Práce se zabývá nepřímou detekcí elektrofilního karbenu **4** jeho transformací na nukleofilní alkoxykarbeny ROCH (**5**) a následnými reakcemi těchto karbenů. Karbeny **5** podléhají inserci do vazby O–H alkoholů za vzniku dialkoxymethanů **6** a intramolekulární cykloadici na vhodně situovanou vazbu C=C za vzniku 2-oxabicyklo[4.1.0]heptanů **7**. Bude prezentována syntéza pent-4-en-1-olů **2** s vazbou C=C různě substituovanou atomem(y) chloru a reaktivita těchto alkoholů s diazirinkarboxylátem **1**.



## Optimalizace syntézy derivátu 4-*tert*-butylcalix[4]arenu aneb cesta přes objev nových homooxacalixarenů směrem k pohodlnějšímu zpracování a lepším výtěžkům

Autor: Michal Hučko  
Ročník: M2  
Ústav: Organické chemie  
Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.



Calixareny jsou makrocyclické sloučeniny, které tvoří s cucurbiturily, cyklodextriny a crown ethery nedílný základ supramolekulární chemie. Za zcela fundamentální calixarenový skelet používaný pro tvorbu nejrůznějších calixarenových derivátů je považován klasický calixaren s methylenovými můstky, a dále pak thiacalixaren, jehož můstky jsou sulfidické. Vedle nich však existují i calixareny obsahující kombinaci těchto můstků, jejichž chemie je doposud zcela neprobádaná. Cílem

práce bylo zoptimalizovat a zdokonalit syntézu smíšeného calixarenu tak, aby bylo možné selektivně a jednoduchým zpracováním získat požadovaný calixaren s methylenovými a sulfidickými můstky ve střídavém uspořádání.

## Příprava 7-(aminoaryl)guaninů – potenciálních DNA-aduktů

Autor: Antonín Králík  
Ročník: M2  
Ústav: Ústav organické chemie  
Školitel: doc. Ing. Igor Linhart, CSc.

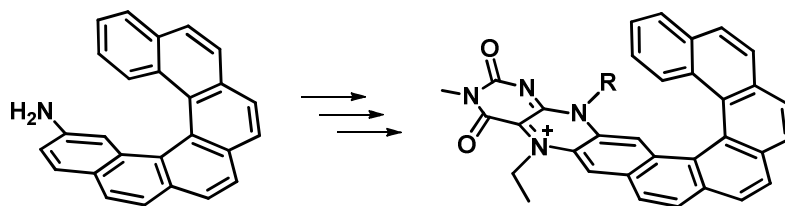
Elektrofilní metabolity vznikající biotransformací aromatických sloučenin jsou schopny se kovalentně vázat na nukleofilní centra DNA bází za tvorby tzv. aduktů. Tyto strukturní změny mohou posléze vést až ke vzniku nádorového bujení. Snaha o jejich včasné odhalení vedla k vývoji nových diagnostických metod založených na sledování koncentračních hladin vznikajících aduktů v tělních tekutinách. Tyto látky je tedy třeba připravit ve vysoké čistotě, aby mohly být použity jako standardy.

Preferovanou polohou v DNA pro atak elektrofilu je pozice *N7* na guaninu. V rámci této práce byly studovány dvě možné cesty přípravy 7-(aminoaryl)guaninů metodami selektivní arylace vycházejícími z chráněného *N*<sup>2</sup>-(dimethylaminomethylen)guaninu, který byl popsán v literatuře jako substrát preferující arylace právě v poloze 7. První z nich využívá 2-nitrofenyl- a 4-nitrofenylboronové kyseliny v přítomnosti měďnatých iontů a poskytuje dva isomery v poměru *N7:N9* až 5:1. Druhá metoda využívá levnější fluornitrobenzeny, které ovšem poskytují přednostně 9-arylderiváty (1-fluor-2-nitrobenzen), případně směs isomerů v poměru 1:1 (1-fluor-4-nitrobenzen). Izolované 7-(nitrofenyl)guaniny byly podrobeny kyselé hydrolyze pro odchránění amino-skupiny v poloze 2 a redukcí nitro-skupiny byly získány požadované produkty – 7-(2-aminofenyl)guanin a 7-(4-aminofenyl)guanin.

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

Autor: Martin Jakubec  
Ročník: M1  
Ústav: Organická chemie  
Školitel: doc. Ing. Radek Cibulka, Ph.D.; Ing. Jan Storch, Ph.D.

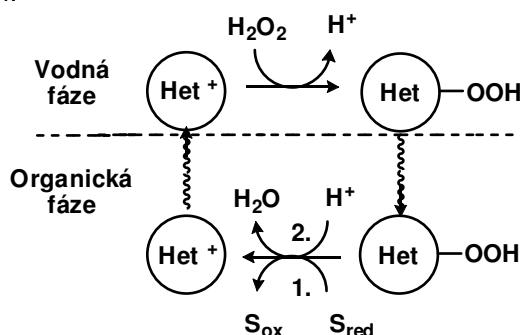
Flaviniové soli jsou v posledních několika letech v popředí zájmu díky svým schopnostem katalyzovat řadu oxidačních reakcí, např. sulfoxidace, *N*-oxidace, nebo Baeyerovy-Villigerovy reakce. Vhodnou modifikací těchto solí lze vést tyto reakce stereoselektivně. Jako chirální selektory lze využít helicity, které jsou inherentně chirální a disponují velkým potenciálem pro využití v katalýze. Spojením těchto dvou látek tak můžeme vytvořit zcela nové enantioselektivní katalyzátory. Cílem této práce je příprava 2-amino[6]helicenu a jeho následné použití jako vhodného prekursoru pro inkorporaci flavinového skeletu do struktury helicenu.



## Lipofilní heteroareniové soli jako katalyzátory fázového přenosu při oxidacích sulfidů

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

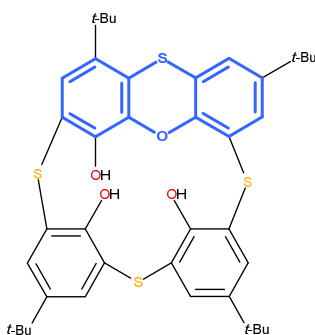
Heteroareniové soli, jako flaviniové, pyraziniové, pyridiniové a pyrimidiniové soli, katalyzují oxidace peroxidem vodíku. Účinek těchto katalyzátorů je založen na tvorbě heterocyklického hydroperoxidu, který oxiduje substrát mnohem účinněji než peroxid vodíku. V homogenních systémech bohužel probíhá poměrně rychlá nekatalyzovaná oxidace - oxidace samotným peroxidem vodíku, která může např. snížit enantiosektivitu při použití chirálního katalyzátoru. Nekatalyzovanou reakci lze potlačit v dvoufázovém prostředí voda-organické rozpouštědlo. Pro tyto účely byly syntetizovány série lipofilních flaviniových, pyraziniových, pyridiniových a pyrimidiniových solí, jejichž schopnost katalyzovat oxidace sulfidů na sulfoxidy byla studována v systému voda-chloroform.



Sekce : Organická chemie B

## Reaktivita derivátu *p*-*tert*-butylthiacalix[4]arenu obsahujícího fenoxathiinový kruh

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



Jako meziprodukty regioselektivních derivatizací calixarenového skeletu se úspěšně uplatňují spirodenon-deriváty calixarenů. V případě thiacalixarenů je situace odlišná – reakce *p*-*tert*-butylmono(spirodenon)thiacalix[4]arenu s HCl či HBr nevede k *ipso*-substituci *tert*-butylu halogenem, ale k přesmyku a vzniku asymetrického derivátu obsahujícího fenoxathiinový kruh. Protože na tomto derivátu byly dosud popsány jen základní alkylační reakce, byly provedeny alkylace činidly obsahujícími transformovatelné funkční skupiny. Významná je zejména reakce s chloracetonitrilem, kdy se podařilo izolovat všechny čtyři možné atropoisomery, zatímco u dosud prováděných alkylací byly popsány pouze dva. Další výzkum bude zaměřen na stabilitu fenoxathiinového kruhu při oxidačních a redukčních reakcích.

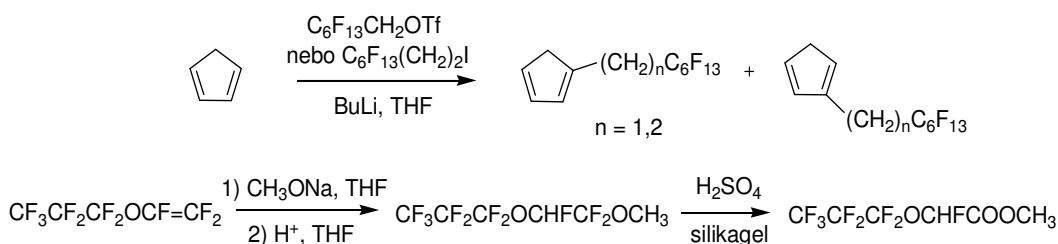
## Syntéza cyklopentadienů modifikovaných polyfluoralkyly

Autor: Pavlína Lipovská  
 Ročník: B3  
 Ústav: Organické chemie  
 Školitel: Ing. Markéta Rybáčková, Ph.D.

V naší laboratoři se zabýváme syntézou komplexů přechodných kovů substituovaných polyfluoralkylovými řetězci. Já jsem se zaměřila na syntézu cyklopentadienů s polyfluoralkylovými řetězci obsahujícími jedno- nebo dvouuhlíkatou nefluorovanou spojku.

Nukleofilní substitucí polyfluoralkyljodidů nebo polyfluoralkyl-triflátů lithium-cyklopentadienidem jsem připravila tyto monosubstituované cyklopentadieny jako intermediáty pro sendvičové komplexy přechodných kovů.

Paralelně s přípravou fluorových cyklopentadienů jsem se zabývala syntézou racemické polyfluorpolyoxaalkanové kyseliny na bázi perfluor(propylvinyletheru) s cílem získat nový typ rutheniového katalyzátoru modifikovaného polyfluorpolyoxaalkanoáty.

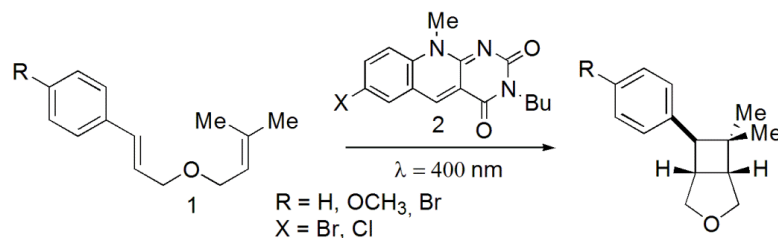


## Syntéza substrátů a flavinových katalyzátorů pro studium fotochemicky iniciovaných [2+2] cykloadicí

Autor: Karolína Straková  
 Ročník: B3  
 Ústav: Organické chemie  
 Školitel: Ing. Eva Svobodová, Ph.D.

Fotochemická [2+2] cykloadice je jednou z mála obecných přístupů k syntéze derivátů cyklobutanu. V naší laboratoři byla nedávno popsána fotochemická [2+2] cykloadice iniciovaná viditelným zářením a flavinovým fotosensitizerem. Od doposud popsaných se liší tím, že používá viditelné světlo a organický katalyzátor. Dosud bylo při fotochemických [2+2] cykloadicích využíváno buď UV záření, nebo VIS v kombinaci s kovovými katalyzátory. Oproti nim mají flaviny některé přednosti. Je to především jejich šetrnost k životnímu prostředí, nízká toxicita a nižší cena.

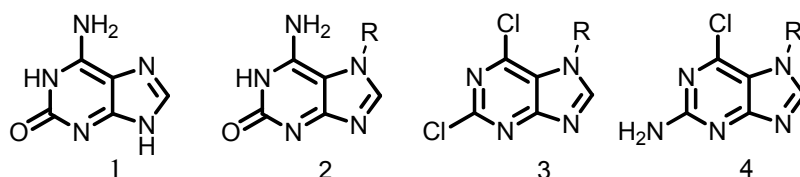
V práci byla připravena řada substrátů **1** pro studium uvedené reakce a nové katalyzátory 7-halogen-5-deazaflaviny **2**, u nichž se předpokládají dobré katalytické vlastnosti díky tzv. efektu těžkého atomu.



## Regioselektivní syntéza N-7 substituovaných isoguaninů

Autor: Lukáš Lattenberk  
 Ročník: B3  
 Ústav: Organické chemie  
 Školitel: Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D.

Isoguanin **1** je heterocyklická sloučenina, jehož  $N^9$ -substituované deriváty vykazují biologickou aktivitu. Bohužel velmi málo je známo o biologické aktivitě  $N^7$ -substituovaných derivátů guaninu, pravděpodobně z důvodů jejich obtížné dostupnosti. V příspěvku proto budou diskutovány výsledky pokusů o regioselektivní syntézu  $N^7$ -substituovaných isoguaninů **2**. Příprava isoguaninů **2** je založena na využití regioselektivní tvorby  $N^7$ -substituovaných chlorpurinů **3** a aminochlorpurinů **4**. Následně byla u derivátů **3,4** studována nukleofilní aromatická substituce halogenu nebo amino skupiny s cílem získat isoguaninové deriváty **2**.

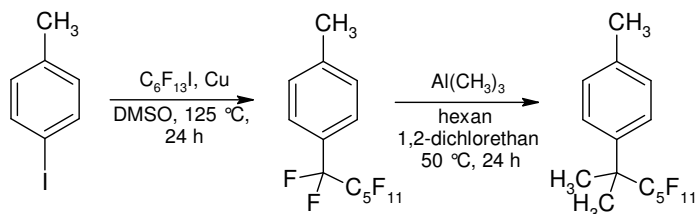


## Syntéza arenů modifikovaných 1,1-dimethylperfluoralkylovými skupinami

Autor: Martin Šimurda  
 Ročník: B3  
 Ústav: Organické chemie  
 Školitel: doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

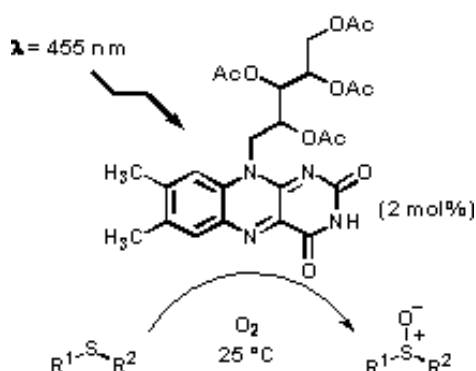
Cílem mé práce byla příprava aromatických aminů, substituovaných perfluorovanými řetězci v *meta*- nebo *para*- polohách cyklu, a následná transformace těchto řetězců trimethylalanem na 1,1-dimethylperfluoralkylové skupiny. Cílem modifikace je snaha odstínit elektronakceptorní efekt perfluoralkylových řetězců a zároveň zvýšit sterické bránění na aromatických kruzích. Vzniklé aminy by měly být následně využity pro syntézu vysoce fluorovaných NHC ligandů.

Nejprve jsem provedl modelovou reakci trimethylalanu s jednoduchým perfluoralkylovým arenem a potvrdil výměnu atomů fluoru za methylové skupiny v  $\alpha$ -polohách postranního řetězce. Následně jsem pomocí Ullmannova couplingu získal sérii mono- a bis(perfluoralkyl)arenů. Zatímco 4-(perfluoralkyl)aniliny poskytly žádané produkty, 1,3-bis(perfluoralkyl)areny byly v studované výměně fluor-methyl nereaktivní. Reakcí substituovaného (1,1-dimethylperfluoralkyl)anilinu s glyoxalem jsem získal klíčový intermediát pro přípravu NHC ligandu.



## Fotooxidace sulfidů na sulfoxidy katalyzovaná tetracetylriboflavinem

Autor: Tomáš Neveselý  
Ročník: B1  
Ústav: Organické chemie  
Školitel: doc. Ing. Radek Cibulka, Ph.D.

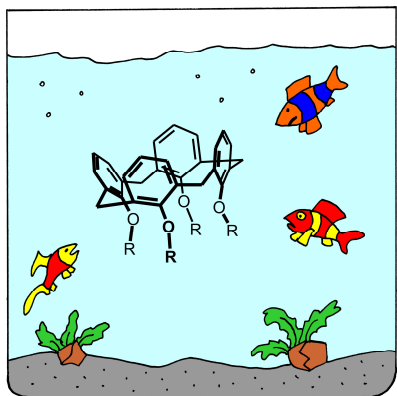


V naší laboratoři byla dříve objevena fotooxidace sulfidů na sulfoxidy probíhající za ozařování světlem o vlnové délce 450 nm v přítomnosti tetraacetylriboflavinu jako katalyzátoru. Vlastním oxidačním činidlem této reakce uskutečňované v alkoholech byl singletový kyslík ( $^1\text{O}_2$ ) generovaný účinkem excitovaného flavinu. Tento systém však neumožňuje oxidaci řady stericky náročných a elektronově deficitních substrátů.

Byl nalezen nový systém pro oxidaci pomocí tetraacetylriboflavinu v prostředí vodného acetonitrilu. Ukázalo se, že za těchto podmínek dochází k řádově rychlejší oxidaci a také stačí menší množství katalyzátoru. Tato metoda je vhodná pro všechny typy substrátů včetně diarylsulfidů nebo sulfidů s *tert*-butylovou skupinou. Fotooxidace byly provedeny i v preparativním měřítku.

## Syntéza prekurzorů vodorozpustných calixarenů

Autor: Tomáš Klejch  
Ročník: B3  
Ústav: Organické chemie  
Školitel: Ing. Jan Slaviček



Calixareny jsou makrocyclické sloučeniny, které tvoří po několik desítek let nedílnou součást supramolekulární chemie. Jejich struktura umožňuje komplexovat anionty, kationty i neutrální látky v roztocích. Bohužel, calixareny jsou samy o sobě nerozpustné ve vodě, a proto vyžadují vhodnou derivatizaci. Právě vodorozpustné deriváty mohou najít rozsáhlé biologické využití.

Tato práce se zabývá derivatizací horního i spodního okraje calix[4]arenu s cílem připravit právě látky rozpustné ve vodě. Pro opracování horního okraje bylo zvoleno zavedení různých aminokyselin pomocí Friedel-Craftsovy acylace a reakcí s přechodnými kovy. Takto připravené struktury umožní výstavbu peptidu, jehož předností bude biologická kompatibilita. Spodní okraj byl alkylován glykolem a esterovou funkcí, vhodnou pro další derivatizaci.



Sekce : Technologie organických látek

## **Analýza testovacího HDS zkrápěného reaktoru**

Autor: Bc. Lukáš Filip  
Ročník: M2  
Ústav: Organické technologie  
Školitel: doc. Ing. Vratislav Tukač, CSc.

Zkrápěné reaktory nachází široké uplatnění v petrochemickém průmyslu pro svou konstrukční jednoduchost a cenovou nenáročnost. Jedním ze základních uplatnění zkrápěného reaktoru v petrochemickém průmyslu je jeho použití při HDS petrochemických frakcí.

Náplní práce bylo experimentální měření hydrodynamických vlastností modelového HDS zkrápěného reaktoru, který je kopií poloprovozního reaktoru používaného pro testování katalyzátorů. Katalytické lože v modelovém zkrápěném reaktoru bylo jednak totožné s poloprovozním reaktorem, kdy byla použita vrstva komerčního katalyzátoru zředěná inertním materiálem SiC o rozměru 0,1 mm a jednak bylo tvořeno vrstvou samotné výplně SiC o různé velikosti částic. Kapalnou fázi tvořila demineralizovaná voda a plynnou vzduch. Hydrodynamické vlastnosti byly stanoveny metodou rozdělení dob prodlení stopovací látky (KCl) konduktometrickou metodou. Vyhodnocení naměřených dat bylo provedeno v programu Matlab hydrodynamickým modelem pístového toku s podélným promícháváním. Výsledkem bylo porovnání vlastností zředěného lože katalyzátoru s ložem samotného ředícího materiálu. Byly určeny doby prodlení, zádrže kapaliny a Pecletova kriteria ve třech navazujících sekcích zkrápěného lože.

Sekce : Technologie organických látek

## **Návrh a příprava rutheniových katalyzátorů pro anti-Markovnikovskou hydrataci terminální CC trojné vazby**

Autor: Martin Kindl  
Ročník: M1  
Ústav: Organické technologie  
Školitel: Ing. Jiří Vavřík, doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Anti-Markovnikovská hydratace s použitím rutheniových katalyzátorů je poměrně nová a atraktivní cesta pro jednokrokovou syntézu aldehydů z terminálních alkynů za mírných podmínek a s vysokou atomovou hospodárností. Problémem současných katalyzátorů je jejich nízká stabilita vůči oxidativní adici. Předmětem této práce bylo navrhnout a připravit nový katalyzátor, se zachováním vysoké aktivity a především selektivity vůči požadovanému aldehydickému produktu. Jako možná alternativa k používaným fosfinovým ligandům byly navrženy stále častěji využívané *N*-heterocyklické karbeny. Z výchozího 2,6-dichloropyridinu byl připraven sérií reakcí stříbrný komplex, z něhož byl následnou transmetalací s různými rutheniovými prekurzory připraven testovaný katalytický komplex. Při hydrataci hept-1-ynu jako modelového terminálního alkynu bylo dosaženo nízkých konverzí, ale 100% anti-Markovnikovské regioselektivity.

Sekce : Technologie organických látek

## **Simulace parciální oxidace vysokovroucích uhlovodíkových směsí**

Autor: Pavel Kotrla  
Ročník: M2  
Ústav: Organické technologie  
Školitel: Doc. Ing. Vratislav Tukač CSc.

Parciální oxidace uhlovodíkových surovin kyslíkem v přítomnosti vodní páry patří k procesům výroby syntézního plynu, respektive vodíku. V rafinérském průmyslu je vodík nezbytný pro hydrogenační rafinaci a jeho spotřeba je tedy vysoká. Parciální oxidace je proces, kterým se velká část této spotřeby může pokrýt. Další výhodou tohoto procesu je možnost využití těžkých uhlovodíkových zbytků.

V Unipetrolu Litvínov je podle licence Shell provozována velkokapacitní jednotka. Pro testování různých surovin byla instalována také poloproduční jednotka, na které byly provedeny experimenty. Jako vstupní surovina byla použita směs visbreakingového zbytku, visbreakingového destilátu a pyrolyzního topného oleje. V experimentech byl proměřen vliv vodní páry na selektivitu parciální oxidace.

Cílem práce je vytvořit matematický model v programu AspenPlus. Vstupní směs je aproximována pomocí prvkového složení. V modelu byly porovnány 2 reaktory pro minimalizaci Gibbsovy funkce. V prvním reaktoru nejsou specifikovány chemické reakce, v druhém byly specifikovány základní chemické reakce parciální oxidace. Byla vypočtena průměrná teplota v reaktoru a složení produktů pro jednotlivé experimenty.

Sekce : Technologie organických látek

## **Výzkum izolace naftalenu rektifikací naftalenového oleje konkrétního dodavatele**

Autor: Rudolf Pospíšil  
Ročník: M1  
Ústav: Organické technologie  
Školitel: Ing. Jiří Krupka, Ph.D.

Předmětem práce je studium izolace naftalenu z naftalenového oleje (NO) rektifikací. NO byl podroben dvěma experimentům vakuové rektifikace vzájemně se lišícími hodnotou refluxního poměru. Na základě výsledků těchto dvou rektifikačních experimentů bylo možné posoudit vliv refluxního poměru na čistotu naftalenového destilátu a zároveň bylo možné porovnáním s výsledky předchozích výzkumů této problematiky porovnat NO od dvou různých dodavatelů z hlediska vhodnosti dané suroviny pro získávání čistého naftalenu rektifikací NO.

V NO se v různých koncentracích (v závislosti na původu černého uhlí) vyskytují látky, které snižují efektivitu rektifikačního procesu tvorbou azeotropických směsí s naftalenum. Tím dochází ke ztrátám naftalenu do předních frakcí rektifikace. Tento fakt potvrdily oba experimenty rektifikace. Tyto látky mohou být z hlediska acidobazických vlastností kyselé i bazické. Jedná se zejména o fenoly a benzothiofen. Pro lepší představu o povaze nečistot v NO a pro identifikaci problematických sloučenin z hlediska rektifikační separace byly provedeny dvě extrakce, a sice kyselé a bazické látky ze surového NO.

Sekce : Technologie organických látek

## **Příprava syntetické vonné látky – Mayolu**

Autor: Bc. Jiří Slavík  
Ročník: M2  
Ústav: Organické technologie  
Školitel: prof. Ing. Libor Červený, DrSc.

*cis*-4-Isopropylcyklohexylmethanol je vysoce žádaná syntetická vonná látka známá pod obchodním názvem Mayol. Má svěží, jemnou a čistou květinovou vůni, připomínající zejména vůni konvalinek a proto se řadí mezi tzv. alkoholy konvalinkového typu. Mayol nachází velmi široké uplatnění v parfumérském průmyslu, kde je díky svým senzorickým i fyzikálně-chemickým vlastnostem (stabilní a nedráždivý) hojně využíván v řadě produktů, např. mýdlech, šampónech, detergentech a kosmetice.

Série provedených experimentů navazuje na předešlé práce, které se zabývaly technologií Mayolu. Jednou z možných cest přípravy Mayolu je hydrogenace kuminaldehydu s využitím Ru nosičových katalyzátorů. Cílem této práce je nalezení vhodných reakčních podmínek pro přípravu Mayolu a možnost aplikace tohoto postupu v průmyslovém měřítku. Prozatím nejlepších výsledků bylo dosaženo v reakci bez rozpouštědla, za teploty 130 °C, tlaku vodíku 15 MPa a při obsahu 1 hm.% katalyzátoru 5 % Ru/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Výsledná selektivita při totální konverzi byla 80 % (suma obou isomerů).

Sekce : Technologie organických látek

## **Separace cyklohexanonu v procesu hydrogenace nitrobenzenu v kapalně fázi**

Autor: Bc. Tomáš Sommer  
Ročník: M2  
Ústav: Organické technologie  
Školitel: prof. Ing. Josef Pašek, DrSc.; Ing. Miroslav Petrisko, Csc.

Práce je součástí výzkumu nově vyvíjené dvoustupňové technologie výroby anilinu hydrogenací nitrobenzenu v kapalně fázi na palladiovém katalyzátoru. Anilin se dnes používá zejména k výrobě polyuretanových hmot.

Při hydrogenaci nitrobenzenu na palladiovém katalyzátoru probíhají v malé míře vedlejší reakce na aromatickém jádře anilinu. Jedním z produktů těchto reakcí je cyklohexanon. Norma stanovuje jeho obsah v anilinu maximálně 0,01 hm. %, proto je nutné se zabývat jeho oddělením. První možností je reakce s anilinem na cyklohexylidenanilin, který se při rektifikaci oddělí jako vysokovroucí látka v destilačním zbytku. Při realizaci této možnosti se předpokládají vyšší ztráty anilinu. Druhou variantou separace je oddestilování volného cyklohexanonu na velmi účinné koloně, která by zároveň sloužila jako kolona odvodňovací.

Byla provedena série rektifikací, která měla potvrdit, zda lze cyklohexanon odstranit ve formě volného ketonu. To by vedlo k výraznému snížení ztrát anilinu.

Na základě provedených experimentů bylo zjištěno, že není možné separovat cyklohexanon ve formě volného ketonu. Při návrhu procesu se bude uvažovat separace formou cyklohexylidenanilinu.

Sekce : Technologie organických látek

## **Technologie oktahydrokumarinu**

Autor: Bc. Radim Stáně  
Ročník: M2  
Ústav: Organické technologie  
Školitel: Prof. Ing. Libor Červený, DrSc.

Kumarin, v parfumérském a potravinářském průmyslu hojně využívaná chemikálie, je látka s prokázanou toxicitou u hlodavců. Netoxický oktahydrokumarin má ekvivalentní sensorické vlastnosti. Současným trendem je nahrazování kumarinu jeho hydrogenovanou obdobou, která tak získává zajímavé místo na trhu s vonnými látkami. Ve spolupráci s firmou Aroma Praha a.s. je vyvíjena její technologie.

Cílem této práce je připravit finální podobu návrhu technologie. Na základě dosavadních studentských prací byla zvolena vhodná reakční teplota a pracovní tlak. Výborných výsledků pak bylo dosaženo s katalyzátory typu Ruthenium na aktivním uhlí. Příznivý vliv na selektivitu reakce má methanol, který však zvyšuje náklady na separaci produktu a jeho obsah musí být optimalizován.

Nejprve byla provedena měření kinetiky reakce s vybranými katalyzátory. Dále byla provedena série experimentů s průmyslově dostupnými katalyzátory a byla porovnána jejich aktivita vůči kýžené reakci. Nejvyšší koncentrace produktu v reakční směsi byla zaznamenána při použití katalyzátoru firmy Johnson Matthey typu 619, a sice 77 %. V dalším kroku bude podrobně zkoumán vliv koncentrace methanolu v reakční směsi a bude řešena separace produktu.

Sekce : Technologie organických látek

## **Kinetika hydrodesulfurace**

Autor: Jan Havelka  
Ročník: M2  
Ústav: Organické technologie  
Školitel: doc. Ing. Vratislav Tukač, CSc.

Vzhledem k rostoucím nárokům na odsíření motorových paliv jsou v současnosti vyvíjeny stále aktivnější odsířovací katalyzátory. Tyto katalyzátory je nutné podrobit testům aktivity a stability.

Odsířování (hydrodesulfurace – HDS) se provádí procesem hydrogenační rafinace (HR) v průtočném reaktoru s pevným ložem katalyzátoru. Zvyšující poptávka po motorové naftě vede k využívání surovin s vyšším obsahem aromátů a olefinů (LCO z FCC), které urychlují deaktivaci katalyzátoru. Ve VÚAnCh a.s. v Litvínově bylo prováděno testování aktivity průmyslově používaného katalyzátoru na bázi sulfidu Mo promotovaného sulfidem Co. Testování probíhalo v pilotním hydrogenačním reaktoru při různých teplotách a rychlostech nástřiku a pro různé složení nástřikované suroviny. Tato práce byla zaměřena na vyhodnocení výsledků uvedených experimentů a výpočet základních kinetických parametrů HDS.

Metodou lineární regrese byla stanovena konstanta deaktivace katalyzátoru  $k_D$  a následně vypočtené aktivity porovnány s experimentálními hodnotami. Dále byla vypočtena počáteční rychlostní konstanta reakce  $k_0$ . Bylo provedeno stanovení vlivu složení nástřikované suroviny (poměr AGO/LCO) na rychlost HDS.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

## **Vývoj sensoru pro online monitorování účinnosti VPHP procesu**

Autor: Eva Čermáková  
Ročník: B3  
Ústav: Organické technologie  
Školitel: Ing. Jiří Kovářík, doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

VPHP (Vapour Phase Hydrogen Peroxide) proces se v poslední době stává metodou první volby pro bio-dekontaminaci a sterilizaci izolátorů ve farmaceutickém průmyslu. Nyní se pro kontrolu úspěšnosti sterilizace používají bioindikátory, jejichž nevýhodou je dlouhá doba kultivace (typicky 7 dní). Ve snaze vyvinout senzor, který by umožňoval průběžné sledování a vyhodnocování účinnosti sterilizace, jsme se zaměřili na tzv. „radikálové trapy“ ukotvené na celulózovém nosiči. Jako metodu vyhodnocování vzorků jsme použili kolorimetrii. Methylenová a anilinová modř byly pro své rozdílné vlastnosti zvoleny jako vhodné kandidáti pro diferenční stanovování účinnosti VPHP. Methylenová modř je selektivní pro oxidaci hydroxylovými radikály, které vznikají rozkladem VPHP, zatímco anilinová modř je citlivá na oxidační prostředí, a tedy reaguje s molekulárním  $H_2O_2$ . Byly testovány různé způsoby přípravy vzorků, různé koncentrace modří a různé reakční podmínky. Anilinová modř se jeví jako vhodný kandidát, během experimentu se plynule odbarvuje a změny jsou snadno pozorovatelné. Methylenová modř se během VPHP procesu mění minimálně, ale při zvýšené tvorbě OH radikálů jsou změny patrné. Tento koncept má výrazný potenciál pro praktické využití a mohl by tak nahradit v současnosti používané bioindikátory.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

## **Inovativní přístup k vývoji platinových cytostatik**

Autor: Miloš Mikoška  
Ročník: B3  
Ústav: 111  
Školitel: Ing. Kamila Syslová; doc. Ing. Petr Kačer, PhD.

Nádorová onemocnění patří v současnosti mezi nejrozšířenější a nejpálčivější příčiny úmrtí ve vyspělém světě. Terapeuticky využívaná platinová cytostatika jsou ovšem stejně zrádná jako toto onemocnění - jejich působení není dokonale osvětleno a léčba představuje náročný proces s nejistým výsledkem, což prohlubuje špatný psychický stav pacientů, kteří si toto dobře uvědomují. Práce se orientuje na přípravu lipofilních molekul s definovanou symetrií a následný vývoj lékové formy pro perorální podání ve formě enterosolventních tobolek. Samotná léková forma je dosud v rané fázi vývoje, avšak disponujeme několika vhodnými kandidáty Pt cytostatik, u nichž máme optimalizovanou syntézu, stejně jako analytické metody pro potvrzení jejich struktury a čistoty. Dosavadní výsledky XTT testů připravených látek na buněčných nádorových liniích naznačují, že námi zvolený směr lze bez nadsázky považovat za velmi slibný. Význam tohoto inovativního přístupu však neleží pouze v nových molekulách a odlišném způsobu podání. Konečným produktem nemá být jen nový lék na trhu, ale i pacient podstupující léčbu v pohodlí domova, mimo stresující prostředí zdravotnických zařízení.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

## **TiO<sub>2</sub> jako fotokatalyzátor pro potenciaci VPHP procesu**

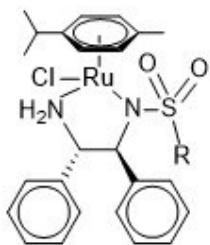
Autor: Alena Nováková  
Ročník: B3  
Ústav: Organické technologie  
Školitel: Ing. Jiří Kovářík, doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

VPHP (vapour phase hydrogen peroxide) proces je dekontaminační proces již několik let známý osvědčený pro bio-dekontaminace. Účinnost par peroxidu vodíku je několikanásobně vyšší oproti kapalně fázi díky rozkladu H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> za vzniku radikálů, jejichž vysoké reaktivity je možné využít také pro degradaci biologicky aktivních látek. Jednou z předností tohoto procesu je možnost jej využívat ve velkých prostorách, jako jsou operační sály, JIP, či farmaceutické výrobní prostory. Cílem předkládané práce je intenzifikovat VPHP proces pomocí funkčních povrchových vrstev obsahujících nanočástice TiO<sub>2</sub>. Těmito vrstvami by poté mohly být pokryty povrchy dekontaminovaných prostor. Oxid titaničitý vystupuje jako fotokatalyzátor, který již při působení viditelného světla excituje molekuly H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> i vody za vzniku hydroxylových radikálů. Byla porovnávána rychlost degradace modelových látek (methylenová a anilinová modř) nanesených na sklo s vrstvou TiO<sub>2</sub> a bez ní. Obě modelové látky se odbarvovaly významně rychleji nanesený na sklech s vrstvou TiO<sub>2</sub> než bez ní, čímž byl potvrzen fotokatalytický efekt TiO<sub>2</sub>. Kombinací VPHP s fotokatalýzou pomocí nanočástic TiO<sub>2</sub> tak vzniká vysoce účinný dekontaminační systém schopný nalézt uplatnění v oblasti AOP (Advanced Oxidation Processes).

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

## **Příprava a kinetické testování Ru(II) katalyzátorů Noyoriho typu**

Autor: Ondřej Matuška  
Ročník: B3  
Ústav: 111  
Školitel: Ing. Jakub Januščák, doc. Ing. Petr Kačer, PhD.



Farmakologický účinek látek působících na lidský organismus je většinou vyvolán pouze jedním enantiomerem, zatímco druhý enantiomer může být neúčinný nebo dokonce škodlivý. Ru(II) katalyzátory Noyoriho typu se využívají při asymetrické transfer hydrogenaci (ATH) vazeb C=O a C=N, při které se uplatňuje HCOOH jako donor vodíku. Výhoda využití těchto katalyzátorů spočívá v jejich vysoké enantioselektivitě a také vysoké aktivitě již při mírných reakčních podmínkách. V rámci práce na projektu byly syntetizovány katalyzátory s různě *N*-sulfonylovanými difenyletylendiaminovými ligandy, za účelem prozkoumat vliv této části struktury na vlastnosti katalyzátoru. Sulfonylová skupina má ve struktuře katalyzátoru velký význam. Je zodpovědná za záchyt hydrogenovaného substrátu přes vodíkový můstek mezi atomem kyslíku v SO<sub>2</sub> skupině a atomem vodíku substrátu. Připravené katalyzátory byly podrobeny kinetickému testování na dvou prochirálních cyklických iminech isochinolinového typu. Konverze výchozích substrátů a enantiomerní přebytek (ee) byly stanoveny metodou plynové chromatografie.

Sekce :        Syntéza a výroba léčiv

## **Vliv podmínek při tabletování vícesložkových směsí farmaceutických substancí na disoluci účinných složek**

Autor:        Lucie Souchová  
Ročník:       B3  
Ústav:        organické technologie  
Školitel:     Ing. Jan Patera, Ph.D.

Tablety jsou jednou z nejrozšířenějších forem farmaceutických preparátů. Mezi hlavní zkoušky prováděné u této lékové formulace patří testování pevnosti tablet a disolučních profilů, které nám umožňují získat informace o chování léčivých látek použitých v této formulaci. Cílem práce bylo studium vlivu velikosti částic (velikosti granulí) a tabletovací síly na pevnost a disoluční profily připravených tablet. Jako modelové látky pro přípravu tabletoviny byly použity granuláty paracetamolu a kofeinu.

Tablety připravené za různých lisovacích sil z homogenních tabletovin lišících se velikostí částic byly podrobeny zkoušce pevnosti a pomocí heliového pyknometru byla měřena porozita, která je dalším parametrem majícím přímý vliv na disoluci účinných látek z tablet. Pro získání disolučních profilů byly tablety testovány pádelkovou metodou, kdy byly průběžně odebírány vzorky, které byly následně analyzovány na kapalinovém chromatografu.

Získané poznatky mohou být použity pro optimalizaci tabletovacích tlaků a velikosti částic použitých účinných látek při výrobě léčivých přípravků.

Sekce :        Syntéza a výroba léčiv

## **Vliv povrchových vlastností práškových materiálů na segregáční chování tabletovin**

Autor:        Tereza Školáková  
Ročník:       B3  
Ústav:        Organické technologie  
Školitel:     Ing. Jan Patera, Ph.D.

Povrchová energie může ovlivnit vlastnosti farmaceutických materiálů ve formě prášků pro jejich technologické zpracování. V této práci je zaměřena pozornost na vlivy povrchových vlastností práškových látek na adhezi jednotlivých složek při jejich mísení a segregaci látek z připravených homogenizovaných směsí.

Segregace je považována za potenciální problém ve farmaceutickém průmyslu, protože vnáší určitou nehomogenitu do původně homogenního systému. Segregace může být zapříčiněna jakýmkoli rozdíly, např. ve velikosti částic, rozdíly v morfologii či kohezivními interakcemi (statickým nábojem). Malé částice mohou tedy volně propadávat mezerami mezi většími částicemi, větší částice se mohou usazovat rychleji než jemnější částice, které skončí ve vyšších vrstvách, nebo některé částice mají vyšší afinitu poblíž stěny zařízení při toku.

V práci byla studována segregace homogenních tabletovin připravených ze dvou modelových granulátů (paracetamolu a kofeinu) lišících se velikostí částic granulí. Byl sledován fluidační mechanismus segregace, při kterém se jemnější částice vznáší směrem vzhůru. Vzorky byly odebírány z různé výšky a po určitém počtu přesypání segregované směsi. Pro stanovení obou účinných látek byla použita kapalinová chromatografie.

Sekce :        Syntéza a výroba léčiv

## **LC-MS charakterizace organokovových komplexů jako modelu jejich farmakokinetického chování**

Autor:        Tereza Kotulová  
Ročník:       B3  
Ústav:        Organické technologie  
Školitel:     Ing. Kamila Syslová, Doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Některé organokovové komplexy vykazují zajímavé biologické vlastnosti využitelné ve farmaceutickém výzkumu (např. terapii nádorových onemocnění). Mechanismus jejich působení v organismu není dosud zcela objasněn ani v případě komerčně využívaných komplexů a jejich použití má řadu negativních dopadů na organismus, což se odráží i na psychice pacientů. Práce se orientuje na LC-MS charakterizaci lipofilních organokovových komplexů se striktně definovanou symetrií. Pro tyto látky byla vyvíjena LC-MS metoda, která k separaci rozdílných struktur jednotlivých organokovových komplexů využívá oktadecylové chromatografické kolony, ale i méně časté iontoměničové (anexové) HPLC kolony, za účelem stanovení čistoty těchto látek a případné charakterizace nečistot. U vytipovaných látek, u kterých se uvažuje o vývoji lékové formy pro perorální podání v enterosolventních tobolkách, bylo pozorováno farmakokinetické chování komplexů při jejich prostupu fosfolipidovou membránou. Jako model fosfolipidové membrány byla zvolena LC kolona s imobilizovanými fosfatidylcholinem. Tento postup umožňuje modelování průchodu membránou jak samotných lipofilních organokovových komplexů, tak jejich struktur, které se mohou vytvářet v organismu při použití rozdílných lékových forem.

Sekce :        Syntéza a výroba léčiv

## **Měření nízkých koncentrací par peroxidu vodíku**

Autor:        Jan Tomas  
Ročník:       B3  
Ústav:        Organické technologie  
Školitel:     Ing. Jiří Kovářík, doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Ve VPHP (Vapor Phase Hydrogen Peroxide) aplikacích je z hlediska regulace, schvalování a standardizace velmi důležité přesné a spolehlivé měření nízkých koncentrací par  $\text{H}_2\text{O}_2$  v dekontaminační atmosféře. Současné komerčně dostupné přístroje jsou nákladné a neposkytují potřebnou spolehlivost při detekci VPHP v řádech jednotek a desetin ppm, která je požadována farmaceutickým průmyslem. V současnosti známé a používané metody detekce VPHP využívají elektrochemických senzorů, fluorescence, NIR spektroskopie, či jsou založeny na enzymatickém principu. Ne vždy jsou takové metody vhodné pro detekci ve velkých prostorech a pro nízké koncentrace VPHP (vliv proudění vzduchu, nízká citlivost). Principem vyvíjené metody je měření napětí indukovaného rozkladem VPHP na elektrochemickém článku. Pro dosažení co nejvyšší spolehlivosti měření byl eliminován vliv vody vznikající rozkladem  $\text{H}_2\text{O}_2$  a vystupující jako elektrodový jed (špatná interpretace signálu, zanášení elektrody). Pro konstrukci elektrody byla nalezena vhodná kombinace kovů využívající synergický účinek použitých sloučenin. Byla sestavena kalibrace s minimálním vlivem ostatních látek přítomných v měřené atmosféře. Byla navržena konstrukce elektrody, která má potenciál uplatnit se ve VPHP aplikacích jako robustní a spolehlivý měřicí systém s dlouhou životností.



Sekce : Syntéza a výroba léčiv

## **Využití gelových extrudátů na bázi škrobu k řízenému uvolňování léčiv**

Autor: Lucie Zavadilová  
Ročník: B3  
Ústav: 111  
Školitel: Doc. Ing. Petr Zámostný, Ph.D.

Škrob je jedním z přírodních polymerů, vhodných pro přípravu matricového typu lékových forem s řízeným uvolňováním léčivé látky, díky své farmaceutické přijatelnosti dostupnosti a mnohostranně modifikovatelným vlastnostem. Cílem této práce bylo využít technologii extruze vodné směsné suspenze škrobu a modelové API při současné gelatinizaci škrobu, k přípravě extrudátů definovaných vlastností a otestování jejich funkce v různých lékových formách. Pro přípravu extrudátů byl použit bramborový škrob a paracetamol byl vybrán jako modelová léčivá látka, z důvodů dostupnosti a snadného analytického stanovení. Směsi byly gelatinizovány při zvýšené teplotě a extrudovány ručním extrudérem. Vysušené extrudáty byly drceny a síťovány a využity k plnění tobolek a lisování tablet. U hotových forem byly stanoveny disoluční profily. Připravené extrudáty byly velmi homogenní a šarže vyrobené za stejných podmínek měly reprodukovatelné vlastnosti. Částice z drcených extrudátů vykazovaly zpomalené uvolňování léčivé látky oproti prosté směsi škrob/API. Tablety lisované za vhodných podmínek se v prostředí disolučního testu nerozpadaly a byly schopné stabilního uvolňování léčivé látky během několika hodin až desítek hodin s tím, že disoluční profil bylo možné modifikovat velikostí a tvarem použité tablety.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

## **Farmakokinetické monitorování strukturních analogů pregnanolon-sulfátu**

Autor: Zuzana Klimšová  
Ročník: B3  
Ústav: Organické technologie  
Školitel: Ing. Kamila Syslová, Doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Dřívější výzkumy ukázaly, že nadprodukce kyseliny glutamové v mozku související s přílišnou stimulací receptorů kyseliny N-methyl-D-asparagové (NMDA) má za následek poškození neuronů. Preklinické studie ukazují, že kompetitivní antagonisté NMDA mohou tento účinek zmírnit, ovšem ve většině případů s velmi významnými nežádoucími účinky vzhledem k jejich malé selektivitě jako jsou například nekontrolované pohyby a schizofrení chování. U jistě přirozeně se vyskytující steroidní látky pregnanolon-sulfátu tyto nežádoucí účinky nebyly zjištěny z důvodu odlišného mechanismu jejího působení, který je v interakci s již aktivovaným receptorem, což se ukázalo jako výhodné při potlačení excitotoxického působení glutamátu. Nevýhody této látky byla její špatná prostupnost hematoencefalickou membránou a její rychlé odbourávání. Tento výzkum sloužil k proměření farmakokinetických dat jejích strukturních ekvivalentů a nalezení nejvhodnějšího kandidáta pro léčivo, jež by mělo přispět k terapii nejen akutního poškození (např. mrtvice nebo traumatické poranění mozku), ale i neurodegenerativních onemocnění, mezi něž patří roztroušená skleróza, Alzheimerova nemoc nebo Huntingtonova choroba.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

## **Vývoj MIP (Molecularly imprinted polymer) pre separáciu neurotransmiterov z mozgového tkaniva**

Autor: Denisa Lizoňová

Ročník: B3

Ústav: Organické technologie

Školitel: Ing. Michaela Gajdošová, Ing. Kamila Syslová, doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Monitorovanie koncentračných hladín neurotransmiterov (dopamín, serotonin, ich metabolity) môže viesť k včasnému odhaleniu patofyziologických procesov odohrávajúcich sa v mozgu (napr. schizofrénia, Parkinsonova choroba a iné neurodegeneratívne ochorenia). Pred samotným kvalitatívnym a kvantitatívnym hmotnostne-spektrometrickým stanovením je nutné previesť separáciu z komplexnej matrice – mozgového tkaniva a mozgomiešneho moku. Bežne možno využiť metódy ako je extrakcia na pevnej fáze (SPE), ktorá sa vyznačuje nízkou selektivitou k monitorovaným látkam, alebo imunoextrakciu, ktorej nevýhoda však spočíva v jednoduchšej denaturácii protilátok (napr. rozpúšťadlom). Cieľom práce je vývoj separačnej metódy eliminujúcej vyššie uvedené nedostatky, na báze MIP (molecularly imprinted polymer). MIP je mnohonásobne sieťovaný polymér s kavitami komplementárnymi k molekule analytu. Kavity sa vyznačujú vysokou selektivitou (zrovnateľne s protilátkami) a mechanickou a chemickou stálosťou (rovnako ako SPE). Na dosiahnutie čo najvyššej efektivity separácie bolo nutné optimalizovať ako syntézu, tak i separáciu na pripravenom MIP-e. Práca zahŕňa skúmanie faktorov syntézy MIP ovplyvňujúcich vlastnosti polyméru (reakčná doba, pomer reaktantov), no i samotnej separácie neurotransmiterov z matrice (veľkosť častíc MIP, použité rozpúšťadlá atď.).

Sekce : Výroba léčiv I

## **Optimalizace vlastností směsi pro plnění tvrdých želatinových tobolek válcovou kompaktací**

Autor: Martina Bartáková

Ročník: M1

Ústav: Organická technologie

Školitel: doc. Ing. Petr Záměstný, Ph.D.

Cílem této práce byla optimalizace tokových vlastností kapsloviny léčivého přípravku s obsahem nifuroxazidu bez toho, aby došlo k nepřijatelnému zhoršení ostatních charakteristik. Stávající směs má poměrně špatné tokové vlastnosti, což má za následek problematické plnění kapslí. V této práci byl studován efekt zařazení válcové kompaktace do výrobního procesu kapsloviny, bez jakékoliv změny jejího složení. Byl sledován vliv parametrů kompaktace (síla kompaktace, mezera mezi rolnami a velikost ok síta) a extragranulárního či intragranulárního zastoupení excipientů na tokové vlastnosti a homogenitu kapsloviny. U zhotovených kapslí byla zkoumána rozpadavost a hmotnostní a obsahová stejnoměrnost. Vzhledem k velkému počtu parametrů s možným vlivem na vlastnosti kapsloviny a kapslí byl použit částečný faktorový plán navržený pomocí software pro plánování experimentů. Na základě výsledků byla k výrobě kapsloviny doporučena směs obsahující kompakty získané při síle kompaktace 7 kN a mezeře mezi rolnami 5 mm. V této směsi byl intragranulárně zastoupen celý podíl nifuroxazidu, předbobtnalého kukuřičného škrobu, mikrokrytalické celulosy a koloidního bezvodého oxidu křemičitého; sodná sůl kroskarmelosy a stearan hořečnatý byly zastoupeny extragranulárně.

Sekce : Výroba léčiv I

## **Studium mechanismu účinku transdermálního urychlovače DDAK na molekulární úrovni**

Autor: Bc. Barbora Amélie Čuříková  
Ročník: M1  
Ústav: Organická technologie  
Školitel: Mgr. Jarmila Zbytovská, Dr. rer. nat.

Transdermální podání léčiv je výhodnou aplikační cestou pro podávání léčiv kontinuální rychlostí po dlouhý časový úsek a zároveň obcházející metabolismus GIT. Hlavním problémem při této aplikaci je extrémní bariérová schopnost kůže daná především složením nesvrchnější rohové vrstvy (stratum corneum, SC) založeném na ceramidech. Dodecylester 6–dimethylaminohexanové kyseliny (DDAK) je nový vysoce účinný urychlovač transdermání absorpce interagující s ceramidovými membránami v SC.

Cílem této práce je charakterizace mechanismu účinku DDAK na molekulární úrovni. Byly připraveny různé typy modelových ceramidových membrán, které svým složením (ceramidy, cholesterol, mastné kyseliny a cholesterol sulfát) napodobují extracelulární matrix SC. Pomocí rtg difrakce, IČ spektroskopie, DSC a měření kontaktních úhlů bylo zjištěno, že DDAK ovlivňuje počet a mísitelnost fází, snižuje organizovanost lipidických řetězců a zvyšuje jejich mobilitu, a zároveň urychluje hydrataci povrchu membrán. Pro detailní charakterizaci interakcí DDAK s lipidy SC byly vzorky podrobeny měření teplotní závislosti IČ spekter. Pro oddělení vibrací ze samotného DDAK a ostatních lipidů bylo při přípravě membrán použito deuterované DDAK. Tímto byly zjištěny rozdíly v posunech významných pásů při různých koncentracích DDAK.

Sekce : Výroba léčiv I

## **Předběžné hodnocení kvality potahu válcových tablet měřením jejich propustnosti pro plyny**

Autor: Petra Diblíková  
Ročník: M1  
Ústav: Organické technologie  
Školitel: Ing. Martin Veselý, doc. Ing. Pavel Čapek, Csc.

Cílem práce bylo vyhodnotit kvalitu a mechanickou odolnost několika typů potahových materiálů navrhovaných pro novou formulaci potahovaných tablet léčivého přípravku VALZAP a porovnat ji se starým typem komerčního potahového materiálu Opadry®. Dosavadní metody testování tablet jsou výlučně destruktivní (např. disoluční test), a proto by bylo zavedení nedestruktivního permeačního testu výhodné. K zhodnocení kvality jednotlivých typů potahu byla porovnávána propustnost potažených tablet pro inertní plyny, založená na grafickém vyhodnocení doby vyrovnávání tlaků plynu mezi dvěma komorami oddělenými nepropustnou přepážkou s tabletou. Při zpracování byla vzata v úvahu různá tloušťka potahové vrstvy. Následně byly tyto potažené tablety podrobeny mechanickému odírání, aby bylo možné ohodnotit i mechanickou odolnost jednotlivých potahů v závislosti na době trvání oděrového testu. Použitý permeační test také dovozoval posoudit míru heterogenity struktury tablet způsobenou lisováním na laboratorním lisu.

Sekce : Výroba léčiv I

## **Příprava a charakterizace koloidních nanonosičů obsahujících analogy ceramidů**

Autor: Vít Kolaja  
Ročník: M1  
Ústav: Organické technologie  
Školitel: Dr. rer. nat. Jarmila Zbytovská

Rohová vrstva - stratum corneum (SC) je nejsvrchnější vrstva lidské kůže, která je zároveň odpovědná za unikátní bariérové vlastnosti. Je to dáno specifickým složením SC, kde významnou roli hrají ceramidy. Atopická dermatitida (AD) je komplexní kožní onemocnění spojené se sníženou hladinou ceramidů v SC. Dermální substituce ceramidů je proto vhodným přístupem k terapii AD. Formulace ceramidů do dermálních přípravků naráží na jejich extrémně vysokou lipofilitu. Proto je vhodné k této aplikaci využít koloidní lipidické nanodisperze, které bude sloužit jako nosiče ceramidu do SC. Cílem této je byla příprava koloidních disperzí obsahujících ceramid 3 nebo 6. Byly připraveny dva typy částic: lipidické nanočástice a lipozomy. Pro přípravu nanočástic byly použity dvě metody, metoda sonikační a metoda fázové inverze za zvýšené teploty. Obě techniky byly optimalizovány na místní podmínky. Obě optimalizované techniky byly použity pro přípravu lipidických nanočástic bez obsahu dalších látek, a dále s obsahem ceramidu 3 a ceramidu 6. Dále byly připraveny lipozómy s obsahem ceramidu 6 metodou tenké vrstvy, které byly charakterizovány pomocí dynamického rozptylu světla. Podařilo se vytvořit stabilní částice s koncentrací 5% ceramidu a vytipovat vhodnou metodu přípravy.

Sekce : Výroba léčiv I

## **Zjišťování původu biologicky aktivních látek**

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

Zjišťování původu biologicky aktivních látek slouží k určování geografického původu látek a distribučních cest (určování původu v rámci distribuční sítě). Získaných údajů se využívá pro potlačování organizovaného zločinu, trhu s narkotiky. K určení geografického původu se užívá nejvíce analýz izotopových poměrů, obsahu alkaloidů, či kombinace těchto metod. Práce zkoumá možnost využití analytických metod a metod zpracování dat pro určování původu biologicky aktivních látek (drog). Na patnácti vzorcích kokainu, poskytnutých Kriministickým ústavem Praha, bylo ozkoušeno využití metod HPLC-MS, NMR, IR a Ramanovy spektrometrie, headspace plynové chromatografie, rentgenové difrakce, rentgenové fluorescenční analýzy. Důraz byl kladen na HPLC-MS a NMR analýzy, které poskytovaly nejrelevantnější údaje. Byla vytvořena vhodná HPLC-MS gradientová metoda. Získaná data byla zpracována pomocí lineární diskriminanční analýzy (LDA) a analýzy hlavních komponent (PCA). Získaná zpracovaná data byla použita pro profilaci a porovnání vzorků. Profilace se zakládá na rozdílném složení nečistot obsažených ve vzorcích.

Sekce : Výroba léčiv I

## **Heterogenně katalyzované aldolové kondenzace substituovaných furfuralů a acetonu**

Autor: Nikola Pilařová  
Ročník: M1  
Ústav: Organické technologie  
Školitel: Ing. Sarah Becharová

Vzhledem k omezenému zdroji fosilních paliv a neustále se zvyšující spotřebě energie roste poptávka po alternativních cestách jejího získávání. Jednou z možností je využití transformace biomasy na kyslíkaté deriváty a jejich následnou úpravou až na lineární alkany, možné složky dieslových paliv. Jedním z kroků této transformace je aldolová kondenzace derivátů furfuralu a acetonu, kterou se předkládaná práce zabývá. Jako modelové reakce byly vybrány dvě – aldolová kondenzace furfuralu a 5-methylfurfuralu s acetonem katalyzované heterogenními katalyzátory – hydrotalcity (HT2; HT2,5; HT3) a zeolity (USY; NaY).

Cílem předkládané práce bylo provést sérii reakcí s vybranými katalyzátory za použití obou substrátů a porovnat jejich aktivitu. Obecně furfural podléhal aldolové kondenzaci ochotněji než 5-methylfurfural. Při použití HT2,5 byla pozorována 99 % konverze furfuralu již po 15 minutách se selektivitou k žádaným produktům 86 %. Důvodem nižší selektivity byl vznik vedlejšího produktu - diacetonalkoholu, který lze omezit vedením reakce v isopropylalkoholu, případně změnou poměru reaktantů. Následně byla provedena regenerace katalyzátoru HT2,5, která byla provedena dvěma způsoby: promytí HT2,5 acetonem a následné použití v reakci, nebo opětovná kalcinace a následná rehydratace katalyzátoru.

Sekce : Výroba léčiv I

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

Autor: Martin Rylich  
Ročník: M1  
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.

Cílem práce bylo nalézt vhodnou analytickou metodu k určení zbytkové kontaminace po čisticím procesu. Jako modelová léčivá látka byl vybrán paracetamol. Kartáč byl vhodně rozřezán a upraven na malé elementy, které bylo možno snáze analyzovat. Element byl vždy vystaven modelové kontaminaci a mytí, načež byl podroben sekvenci tří extrakčních kroků pro získání analytického vzorku – celkové extrakci elementu, výplachu lůžka pomocí injekční stříkačky a extrakci vytržených štětín spolu s prázdným lůžkem. První dvě metody byly nedestruktivní, zatímco poslední z nich destruktivní. K analýze jednotlivých metod byla použita vysokoúčinná kapalinová chromatografie.

Celkovou kontaminaci nelze stanovit tradiční metodou celkových oplachů nebo extrakce. Oproti tomu kombinovaný postup extrakce a cíleného vzorkování kavit umožňuje stanovit faktory výtěžnosti jednotlivých kroků a určit tak spolehlivě celkovou kontaminaci, což bylo ověřeno porovnáním s destruktivní metodou.

Sekce : Výroba léčiv I

## **Příprava a vývoj nových Pt komplexů jako potencionálních cytostatik**

Autor: Jan Svoboda  
Ročník: M1  
Ústav: Organická technologie  
Školitel: Doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Nádorová onemocnění v současné době představují hned po onemocnění kardiovaskulární soustavy druhou nejčastější příčinu úmrtí na nemoci ve světě. Na nádorová onemocnění minulý rok v ČR zemřelo přes 14 tisíc lidí a bylo tímto onemocněním postiženo dalších 35 tisíc. Předpovědi na následujících 5 let ukazují, že na úmrtí zapříčiněnou nádorovým onemocněním umře 3x tolik lidí než v současné době. V současné době existuje řada metod, jak léčit pacienta a ve většině případů je tato léčba individuální. Mezi nejčastější typ léčby patří chemoterapie, kde se z více jak 60% využívají cytostatika, která mají jako centrální atom platinu. Tyto cytostatika, ačkoliv vykazují dobré vlastnosti vůči nádorovým buňkám, mají celou řadu nežádoucích účinků (např. zvracení, nevolnost a další). Aplikace těchto cytostatik se kvůli špatné rozpustnosti a prostupnosti membránami provádí intravenózně. U nově vyvíjených lipofilních molekul s definovanou symetrií, je hledána i léková forma vhodná pro perorální podání (enterosolventní tobolky). V současné době je ve výzkumu 4. generace platinových cytostatik, které svojí lepší rozpustností, lipofilitou i účinností v mnoha ohledech předčí současně používaná cytostatika, což bylo prokázáno i pomocí XTT testů, které byly u těchto nově připravených sloučenin provedeny.

Sekce : Výroba léčiv I

## **Imobilizace nikotinu a kyseliny nikotinové na silikátové materiály**

Autor: Marika Krátká  
Ročník: M1  
Ústav: Organické technologie  
Školitel: Ing. Eliška Vyskočilová, Ph.D.

Imobilizace je proces, při kterém se účinná látka ukotví na povrch daného nosiče a je také předmětem zkoumání v mnoha odvětvích chemie či farmacie. Vzhledem k možnosti nahrazení techniky potahovaných tablet při výrobě léčiv je předmětem této práce možnost využití mesoporézního materiálu jako nosiče léčivé látky. Látkami imobilizovanými na mesoporézní molekulová síta MCM-41 skupiny M41S jsou nikotin a kyselina nikotinová. Byla zkoumána kinetika jejich sorpce vzhledem k rozdílné struktuře obou látek. Dále byl sledován vliv použitých rozpouštědel, teploty, inertní atmosféry, modifikace povrchu nosiče a koncentrace aktivní látky na průběh imobilizace. Bylo zjištěno, že stěžejním faktorem významně ovlivňujícím imobilizované množství aktivní látky do struktury nosiče je zvyšování koncentrace aktivní látky v roztoku a modifikace povrchu nosiče. Pro sledované látky byly také nalezeny optimální podmínky imobilizace. Výsledky experimentů byly analyzovány pomocí UV/VIS spektrofotometrie a rentgenové práškové analýzy.

Sekce : Výroba léčiv I

## **Vývoj nové diagnostické metody vhodné pro fenotypizaci bronchiálního astmatu**

Autor: Veronika Rotová  
Ročník: M1  
Ústav: Organické technologie  
Školitel: Ing. Kamila Syslová, Doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

*Asthma bronchiale* představuje v současné době plicní onemocnění se stále se zvyšující incidencí a snižujícím se věkem první ataky. Předkládaná práce se zabývá vývojem diagnostické metody založené na stanovení látek, které jsou produkovány v důsledku uvedeného onemocnění a je možné je využít nejen pro diferenciální diagnostiku, ale rovněž monitorování terapeutických přístupů k tomuto onemocnění. Mezi biomarkery bronchiálního astmatu se již delší dobu řadí prozánětlivé a bronchokonstrikční cysteinylované leukotrieny ( $\text{LTC}_4$ ,  $\text{LTD}_4$ ,  $\text{LTE}_4$ ). V předkládané práci je uvedena zcela originální metodika využívající nejen cysteinalovaných leukotrienů, ale nově protizánětlivé lipoxiny ( $\text{LXA}_4$ ,  $\text{LXB}_4$ ), které jsou produkovány organismem jako přirozená protizánětlivá obrana. Vyžití stanovení této kombinace obou skupin látek produkováných organismem při různých formách astmatického onemocnění dovoluje zpřesnění diagnostiky, zcela nově i jeho fenotypizaci, umožňuje náhled do procesů probíhajících při různých formách farmakoterapeutických postupů, ale otevírá i velice zajímavou zcela originální cestu farmakologického řešení přístupu k terapii tohoto onemocnění.

Sekce : Výroba léčiv II

## **Vliv parametrů mísení na homogenitu interaktivní směsi**

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

Práce se zabývá možnostmi zlepšení biodostupnosti špatně rozpustné léčivé látky, zvýšením rychlosti jejího uvolňování z lékové formy. To lze řešit použitím API s malou velikostí částic. Zde však dochází k tvorbě shluků částic v rozpouštědle, které způsobují snížení rychlosti uvolňování API ze směsi. Jedna z možností řešení tohoto problému je tvorba tzv. interaktivní směsi kde jsou částice API naneseny na větší částice rozpustného nosiče. Pro tento účel byly použity částice sprejově sušené a mleté krystalické laktózy o různé velikosti. V dosavadní práci byla ověřena funkčnost interaktivních směsí na mikronizovaných modelových látkách, paracetamolu a ibuprofenu a byla vybrána vhodná forma a velikost částic laktózy z hlediska homogenity připravené směsi. Nyní byla homogenita dále optimalizována mísícím postupem a to změnou geometrického uspořádání mísiče, mísením se skleněnými kuličkami a dobou mísení. Nejlepší homogenity dosahovala směs mísená 40 min za působení vysokých smykových sil v mísiči. Získané výsledky byly porovnány se směsí připravenou stejným postupem, ovšem s jinou API – doxazosinem. Homogenita této směsi byla značně odlišná navzdory shodnému postupu mísení. Z vybraných směsí byly pořízeny snímky pomocí skenovací elektronové mikroskopie (SEM) z důvodu potvrzení vzniku interaktivní směsi a určení přesné velikosti částic účinné látky.

## **Segregace kompaktovaných směsí s obsahem nifuroxazidu**

Autor: Bc. Daniela Hofmanová  
Ročník: M2  
Ústav: Ústav organické technologie  
Školitel: Doc. Ing. Petr Zámostný, Ph.D.

Nifuroxazid se používá v terapii průjmu a spadá do kategorie léčivých přípravků tzv. antidiaroid. Z farmakologických důvodů je nifuroxazid v lékových formách přítomen ve formě velmi jemného prášku, což zhoršuje jeho tokové vlastnosti a působí problémy při plnění kapslí. Pro odstranění těchto problémů bylo navrženo využití válcové kompaktace. Zkoumáno bylo několik šarží kompaktovaných směsí. Tyto šarže se lišily použitou silou kompaktace (7 kN nebo 15 kN), mezerou mezi rolnami (2 mm nebo 5 mm), zda byl přítomen v kompaktaci Ac-Di-Sol nebo Aerosil nebo zda byly tyto pomocné látky domíchávány až po kompaktaci. Cílem této práce bylo posoudit a porovnat homogenitu jednotlivých šarží a jejich segregáčnící chování a nakonec ze získaných výsledků vybrat šarži s nejlepším segregáčním profilem pro nasazení do výroby. Sítováním a HPLC analýzou sítových frakcí byla určena distribuce nifuroxazidu v závislosti na velikostní frakci kompaktovaných směsí, která indikovala možné problémy se segregací. Následnými segregáčními testy bylo zjištěno, že se u různých šarží v různé míře uplatňuje především fluidační mechanismus segregace. Zjištěné rozdíly byly poměrně významné, jelikož segregáčnící index nejlepší šarže byl na úrovni necelých 40 % indexu nejhorší šarže. Tyto výsledky byly použity jako dílčí kritérium při volbě optimální technologie.

## **Izomerizace pinenoxidů katalyzovaná methyltrioxorheniem**

Autor: Monika Matoušková  
Ročník: M2  
Ústav: Organické technologie  
Školitel: prof. Ing. Libor Červený, DrSc.

Práce je zaměřena na homogenně a heterogenně katalyzovanou izomerizaci  $\alpha$ -pinenoxidu a  $\beta$ -pinenoxidu pomocí methyltrioxorhenia.

Při využití heterogenní katalýzy je methyltrioxorhenium imobilizováno na různé nosičové materiály, zejména aluminosilikáty (Siral® 10, 20, 30 a 40), silikáty (silika, MCM-41) a mesoporézní aluminu. Vybrané nosiče se liší svým chemickým složením, plochou povrchu, objemem pórů, velikostí částic a dalšími vlastnostmi. Imobilizace na nosičové materiály se provádí hlavně z důvodu vzniku kovalentní vazby mezi nosičem a methyltrioxorheniem, která zajišťuje snazší separaci katalyzátoru od produktu a také snižuje riziko vymývání katalyzátoru z nosiče a umožňuje jeho potenciální regeneraci.

Produkty izomerizace pinenoxidů jsou důležitými výchozími surovinami pro výrobu vonných látek. Hlavním produktem izomerizace  $\alpha$ -pinenoxidu je kamfolenický aldehyd, ze kterého se vyrábí santalol, hlavní součást oleje ze santalového dřeva. Žádaným produktem izomerizace  $\beta$ -pinenoxidu je perillový alkohol, jehož kompletní hydrogenací lze získat vonnou látku Mayol.

Cílem práce je optimalizace izomerizačních reakcí pinenoxidů a dosažení nejvyšší selektivity na hlavní produkty při dostatečné konverzi.



## **Selektivní oxidace methanu na methanol katalyzovaná zeolity s obsahem mědi**

Autor: Jan Pecháček  
Ročník: M2  
Ústav: Organické technologie  
Školitel: Prof. Jeroen Anton van Bokhoven, Doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Selektivní přeměna methanu na kapalné produkty je jedním ze „svatých grálů“ moderní katalytické chemie. V současné době se methan jako hlavní složka zemního plynu v chemickém průmyslu využívá téměř výhradně jako surovina pro parní reforming s následným využitím získaného syntézního plynu, například právě pro výrobu methanolu. To vyžaduje vybudování nákladného průmyslového zařízení s nutností zemní plyn na dané místo dopravit. Přeměna methanu na kapalnou látku v místě získání, např. prostřednictvím selektivní oxidace na methanol, by výrazně usnadnila jeho přepravu a umožnila jeho lepší využití.

Selektivní oxidaci methanu na methanol využívají methanotrofní bakterie k získání energie pro život. Využívají k tomu enzym methanmonooxygenasu, v jejímž aktivním místě nalezneme dva ionty mědi. Na tomto základě byl již dříve připraven a popsán katalyzátor na bázi Mordenitu s obsahem mědi, který reakcí s methanem a následným rozkladem stabilního intermediátu vodou poskytuje methanol. Předmětem předkládané práce je příprava, charakterizace a testování nového katalyzátoru, jehož aktivita je ve srovnání s předchozím asi o 30 % vyšší. Toto zvýšení aktivity je připisováno jemnější dispersi aktivních míst v důsledku odlišného způsobu nanesení mědi na zeolit.

## **Studium vlivu rozpouštědla na kinetiku hydrogenace propionitrilu**

Autor: Kamila Procházková  
Ročník: M2  
Ústav: Organické technologie  
Školitel: Ing. Jiří Krupka, Ph.D.

Práce se zabývá studiem vlivu rozpouštědla na kinetiku hydrogenace nitrilů. I přes značné využití heterogenně katalyzované hydrogenace nitrilů v chemickém a farmaceutickém průmyslu není doposud v literatuře žádná ucelená studie, která by se věnovala kvantifikaci vlivu reakčního média na selektivitu a reakční rychlost zmíněné reakce.

Byla sledována selektivita a reakční rychlost hydrogenace modelového substrátu - propionitrilu na niklovém katalyzátoru ve 24 různých rozpouštědlech. Bylo zjištěno, že rychlost hydrogenace je dramaticky ovlivněna použitým rozpouštědlem, a že významné rozdíly v reakčních rychlostech nejsou způsobeny jen rozdílnou rozpustností vodíku v reakčních směsích, ale jsou dány i jinými fyzikálně-chemickými vlastnostmi rozpouštědla. Byl učiněn pokus o nalezení korelace mezi jednotlivými fyzikálně-chemickými charakteristikami rozpouštědel a reakční rychlostí a selektivitou hydrogenace. Za tímto účelem byla experimentální data zpracovávána empirickou metodou multiparametrické lineární regrese odvozené na základě principu lineárních solvatačních energií s použitím modelu Abrahama-Kamleta-Tafta. Cílem práce bylo zjistit, jak která vlastnost rozpouštědla ovlivňuje kinetiku hydrogenace nitrilů, zejména selektivitu tvorby primárního, případně sekundárního a terciárního aminu.

Sekce : Výroba léčiv II

## **Izomerace limonenu**

Autor: Hana Rafajová  
Ročník: M2  
Ústav: Organické technologie  
Školitel: Ing. Eliška Vyskočilová Ph.D.

Předkládaná práce se zabývá studiem vlivu kyselých katalyzátorů na izomeraci limonenu. Limonen a jeho izomery jsou vonné látky, které zauímají významné místo nejen v parfumářském průmyslu. Nejvýznamnější z detekovaných izomerů jsou terpinolen,  $\gamma$  a  $\alpha$ -terpinen, dále bývá ve směsi přítomný p-cymen, který vzniká dispropocionací limonenu. K izomeraci limonenu dochází za přítomnosti kyselých katalyzátorů. V této práci byly použity katalyzátory  $\text{H}_2\text{SO}_4$  (96 %),  $\text{H}_2\text{SO}_4$  na silikagelu a Amberlyst 15. Cílem této práce je sledování vlivu jednotlivých katalyzátorů na složení reakční směsi. Mimo d-limonenu je testována i izomerace l-limonenu, p-cymenu a terpinolenu. Bylo zjištěno, že při použití p-cymenu jako výchozí látky k izomeraci s použitím těchto katalyzátorů nedochází.

Sekce : Výroba léčiv II

## **Příprava Florosy**

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

Florosa je látka s květinovou vůní velmi žádaná v parfumářském průmyslu. Vzniká z isoprenolu a isovaleraldehydu Prinsovou cyklizací, což je kysele katalyzovaná kondenzace, jejíž optimalizace je cílem této práce.

Byl sledován vliv typu katalyzátoru, přídavku vody, poměru reaktantů a teploty na průběh této reakce - tedy na selektivitu Florosy a konverzi isovaleraldehydu. Jako další důležitý parametr byl navíc pozorován poměr relativní koncentrace Florosy k dihydropyranům - nejvýznamnějším vedlejším produktům.

Experimentálně bylo otestováno použití 4 katalyzátorů (Amberlyst 15, kyselina sírová, p-dodecylbenzensulfonová a p-toluensulfonová) bez přídavku vody, s přídavkem přebytku nebo stechiometrického množství vody. Byl proveden pokus, kdy bylo využito Amberlystu 15 a k. p-dodecylbenzensulfonové, u kterých se dal předpokládat pozitivní vliv na průběh reakce.

Jako jeden z nejvhodnějších katalyzátorů byla zvolena 5%ní kyselina sírová, která je používána v dalším studiu. Pro zkoumání vlivu jednotlivých parametrů byla zvolena metoda Factorial Experimental Design, která byla aplikována na dvě proměnné – teplotu a množství katalyzátoru. Jako třetí proměnná byl poté zvolen poměr reaktantů, jehož vliv je nyní sledován.

Sekce : Výroba léčiv II

## **Vliv výrobních technologií na disoluci orálně dispergovatelných tablet**

Autor: Tereza Škopková  
Ročník: M2  
Ústav: Organické technologie  
Školitel: Ing. Eva Krejzová

Práce je zaměřena na výrobu orálně dispergovatelných tablet (ODT), které jsou z hlediska aplikace specifickou skupinou pevných lékových forem. ODT se po vložení do úst v krátké době rozpadají účinkem slin za vzniku suspenze, kterou lze polknout i bez nutnosti zapití. Doba rozpadu je normativně stanovena do tří minut.

Cílem práce bylo zhodnotit rychlost uvolňování účinné látky u devíti vzorků ODT pomocí disolučních zkoušek. Jednotlivé vzorky se lišily metodou maskování chuti účinné látky, množstvím maskovací látky a přítomností efervescentní (šumivé) přísady. Jednotlivými výrobními technologiemi byly přímá komprese, sprejové sušení a vlhká granulace. Disoluce byly měřeny jak běžným způsobem v 500 ml pufru, tak i v objemu 7 ml pufru. Na základě rychlosti uvolňování API byla přímá komprese zvolena nejvhodnější metodou zpracování látek pro výrobu ODT. Tato metoda je také jednodušší a časově i finančně výhodnější než ostatní. Nejvíce rozdílné disoluční profily vykazovaly tablety, které obsahovaly šumivé látky a tablety, jejichž výrobní technologií bylo sprejové sušení. Ve srovnání s ostatními technologiemi se u těchto tablet většina účinné látky uvolnila o několik minut později. Sprejové sušení je proto ve srovnání s ostatními využitými technologiemi nejméně vhodnou metodou formulace ODT.

Sekce : Výroba léčiv II

## **Studium vlastností práškových substancí používaných ve farmaceutickém průmyslu pomocí IGC**

Autor: Petra Šulcová  
Ročník: M2  
Ústav: Organické technologie  
Školitel: Ing. Jan Patera, Ph.D.

Mikrokrytalická celulóza je často využívána jako pomocná látka v rámci farmaceutického průmyslu pro svou stálost a odolnost. Pomocí šetrné charakterizační metody inverzní plynové chromatografie (IGC) byly u této látky zkoumány povrchová energie a acidobazické vlastnosti v závislosti na změně relativní vlhkosti a teploty. Metoda IGC byla zároveň použita pro zkoumání povrchových charakteristik účinné látky ibuprofenu lysinátu od dvou různých výrobců. Bylo zjištěno, že změna okolních podmínek ovlivní zejména acidobazické vlastnosti povrchu mikrokrytalické celulózy. Tyto výsledky mohou být užitečné při nastavování parametrů nutných pro skladování. Jednotlivé šarže stejné účinné látky od různých výrobců se mohou lišit v rámci povrchových vlastností, jak se ukázalo v této práci. Odlišnosti v jednotlivých šarzích byly potvrzeny jak metodou IGC, tak i studiem tokových vlastností. Tato zjištění ukazují na rozdílné výrobní podmínky, které následně mohou mít vliv v dalším zpracování např. při procesech tabletace a granulace.

Sekce : Výroba léčiv II

## **Studium pochodů ovlivňujících nestabilitu fyzikálních vlastností tablet v čase**

Autor: Dominika Thimová  
Ročník: M2  
Ústav: Organické technologie  
Školitel: Doc. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.

Cílem práce je zkoumání pochodů, které by mohly negativně ovlivňovat fyzikální vlastnosti tablet lisovaných z granulované směsi paracetamol-koferin-fenylefrin. Podle provozních zkušeností výrobce, vykazují tablety extrémní parametrickou citlivost doby rozpadu tablet na podmínkách výroby, a kromě toho i nebývalé prodlužování doby rozpadu („tvrdnutí“) při stabilitních studiích vyřizovaných tablet. Prodlužující se dezintegrace tablety je zásadním problémem, který může významně ovlivnit uvolnění účinné látky do organismu, jelikož farmakokinetika je dána jak aplikační cestou léku, tak lékovou formou a jejími vlastnostmi. Tablety uvedené formulace jsou vícenásobkové a jednotlivé složky se mohou navzájem ovlivňovat, obzvláště při zátěži jako je lisování, mletí, granulace a jiné výrobní procesy. Byla studována dezintegrační charakteristika a pevnost tablet v závislosti na lisovací síle, době lisování, vlhkosti a dalších podmínkách. V současné době je pozornost zaměřena na odhalení možných příčin, zejména případné krystalografické změny a možný vznik eutektik v systému paracetamol-koferin-fenylefrin hydrochlorid a na jejich souvislost se změnou charakteru porozity tablet a prodloužení doby desintegrace.

Sekce : Výroba léčiv II

## **Vliv statinů na snižování hladiny cholesterolu v CNS a s tím spojené fyziologické změny**

Autor: Jana Vondroušová  
Ročník: M2  
Ústav: Organické technologie  
Školitel: Ing. Kamila Syslová; Doc. Ing. Petr Kačer Ph.D.

Cholesterol je steroidní látka běžně obsažená v lidském organismu. Slouží k tvorbě buněčných membrán, vitamínu D, hormonů a napomáhá zpracování tuků. Mimoto je důležitou stavební jednotkou nervových buněk. Cholesterol je tedy pro organismus nepostradatelný. Jeho zvýšená hladina v krvi je však považována za rizikové a velmi rozšířené onemocnění způsobující řadu úmrtí. Možnou léčbou je podávání hypolipidemik, z nichž často používaná je skupina statinů, které hladinu cholesterolu v krvi úspěšně snižuje. Otázkou je, zda stejný efekt nemohou mít i na centrální nervovou soustavu. Snižování hladiny cholesterolu by zde mohlo způsobit fyziologické změny, které následně mohou vést ke zdánlivě bezdůvodnému nárůstu agrese či sebevražedného chování. Cílem práce je za pomoci separačních metod a HPLC/MS prozkoumat vliv Simvastatinu na snižování hladiny cholesterolu v centrální nervové soustavě a s tím spojené fyziologické změny.

Sekce : Výroba léčiv II

## **Heterogenně katalyzovaná epoxidace indenu**

Autor: Petra Žižková  
Ročník: M2  
Ústav: Organické technologie  
Školitel: Ing. Martina Štekrová

Tato práce je zaměřená na imobilizaci methyltrioxorhenia (MTO) na různé nosiče a na následnou epoxidaci indenu s tímto heterogenním katalyzátorem. Jako nosičové materiály jsou použity mezoporézní aluminosilikáty Siral 20 a 40, silika a mezoporézní molekulové síto MCM-41. Dále je pro porovnání provedena epoxidace indenu pomocí heterogenního titanového katalyzátoru Ti-MCM-41.

Úspěšnost imobilizace MTO je potvrzena několika analytickými metodami (XRF, XRD, BET a BJH). Pomocí XRF je zjištěno množství navázaného MTO na 100 mg nosiče. XRD potvrzuje amorfni strukturu MTO, a že se váže pouze na povrch nosičů. Metody BET a BJH potvrzují nejen správné navázání MTO na nosič, ale také určují velikost plochy povrchu a průměr pórů jednotlivých nosičů.

Dalším krokem experimentální části je epoxidace indenu za přítomnosti heterogenního MTO a Ti-MCM-41. Epoxidace jsou prováděny s užitím různých oxidačních činidel, kterými jsou peroxid vodíku (vodný či jeho bezvodá forma UHP) a *tert*-butylhydroperoxid (vodný či v dekanu). Cílem této části experimentální práce je porovnat konverze a selektivity jednotlivých epoxidací při použití různých heterogenních katalyzátorů a oxidačních činidel.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

## **Recyklace farmaceutických obalů na základě polymerů**

Autor: Bc. Eliška Böhmová  
Ročník: M1  
Ústav: Polymerů  
Školitel: prof. Ing. Vratislav Ducháček, DrSc.

Farmaceutické obaly jsou vyrobeny ze široké škály materiálů, recyklace jednosložkových obalů (např. papírových skládaček, plastových a skleněných lahvíček) je již vyřešenou otázkou, problémem zůstává recyklace obalů směsných.

Nejpoužívanějším farmaceutickým obalem v Evropě je tzv. blisterpack, který se obvykle skládá z několika vrstev termoplastů a hliníku. Jedinou možností recyklace je výroba odpadního materiálu a charakterizace jeho vlastností, což je cílem této práce.

Blisterpacky byly nadrceny a smíchány s příměsí nápojových kartonů Tetrapak v různých poměrech, poté byly slisovány při dvou teplotách. U vzniklých materiálů byly provedeny tahové zkoušky a byla stanovena houževnatost. U materiálu složeného pouze z blisterpacků byla změřena vodivost. Dále byly pořízeny snímky z optického mikroskopu, které ilustrují heterogenitu materiálu.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

## **Příprava laktimetherů a jejich interkalace do mezivrství montmorillonitu**

Autor: Daniel Jaksch  
Ročník: M1  
Ústav: Polymerů  
Školitel: Ing. Lenka Malinová, prof. Ing. Jiří Brožek, CSc

Pro přípravu nanokompozitů polymer-vrstevnatý silikát je nezbytná organofilizace montmorillonitu. V současnosti se k tomuto účelu převážně využívá iontově-výměnná reakce alkalických kationtů v mezivrství silikátu za objemné alkylamoniové kationty. V literatuře dosud nebyla popsána alternativní cesta organofilizace montmorillonitu laktimethery, která otevírá další zajímavé možnosti při přípravě nanokompozitů polyamidu 6 s vrstevnatými silikáty.

V práci byly připraveny laktimethery o různé velikosti cyklu. Laktimethery a sloučeniny připravené reakcí laktimetherů odvozených od komerčně využívaných laktamů s kyselinou  $\epsilon$ -aminokapronovou byly interkalovány do mezivrství montmorillonitu. Připravené sloučeniny a organofilizované montmorillonity byly analyzovány FTIR spektrometrií, elementární analýzou, termogravimetrickou analýzou a rentgenovou difrakcí.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

## **Polymerace $\epsilon$ -kaprolaktonu iniciovaná bis( $\epsilon$ -kaprolaktamátem) vápenatým**

Autor: Alena Jurásková  
Ročník: B2  
Ústav: Polymerů  
Školitel: Ing. Lenka Malinová, prof. Ing. Jiří Brožek, CSc.

Poly( $\epsilon$ -kaprolakton) je biokompatibilní a biodegradovatelný polymer, který je hojně využíván v medicíně aplikacích. Připravuje se polymerací  $\epsilon$ -kaprolaktonu, kde se k iniciaci polymerace využívá převážně 2-ethylhexanoát cínatý. Cín je však podezřelý z cytotoxicity. Proto se pozornost zaměřuje na využití iniciátorů na bázi biogenních kovů II. A skupiny, tj. sloučeniny hořčíku nebo vápníku.

Tato práce je zaměřena na studium roztokové polymerace  $\epsilon$ -kaprolaktonu iniciované bis( $\epsilon$ -kaprolaktamátem) vápenatým. Zásadní úlohou je nalezení vhodných podmínek polymerace, jako je volba rozpouštědla, polymerační teploty, koncentrace monomeru a iniciátoru.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

## **Syntéza a charakterizace polymerů na bázi TMC vhodných pro medicínální aplikace**

Autor: Lenka Kotrchová  
Ročník: M2  
Ústav: Polymerů  
Školitel: Mgr. Soňa Hermanová, Ph.D.

Vstřebatelné stenty na bázi polymerních materiálů jsou vyvíjeny s ohledem na kombinaci žádoucích mechanických vlastností, kompatibility s tkáňovými buňkami, kontrolované doby rozložitelnosti a charakteru produktů vzniklých degradací těchto materiálů.

Cílem této práce je syntéza homopolymerů a kopolymerů trimethylenkarbonátu (TMC) za iniciace (katalýzy) organickými a organokovovými sloučeninami. Pozornost je věnována také vlivu způsobu sušení monomeru na průběh spontánní polymerace. Připravené polymery jsou charakterizovány pomocí SEC chromatografie. Vybrané vzorky jsou hodnoceny z hlediska mechanických vlastností a jsou podrobovány testům nasákavosti a abiotické hydrolýzy při 37 °C.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

## **Možnosti provedení hydrolytické polymerace $\epsilon$ -kaprolaktamu s grafen oxidem**

Autor: Jaroslav Minář  
Ročník: M1  
Ústav: Polymerů  
Školitel: Ing. Václava Benešová, prof. Ing. Jiří Brožek CSc

Mezi perspektivní materiály patří nanokompozity polyamidu 6 a grafen oxidu. Zásadní překážkou pro jejich přípravu *in situ* polymerací je obtížná dispergace grafen oxidu v tavenině  $\epsilon$ -kaprolaktamu. V literatuře jsou popsány příklady dobré dispergovatelnosti grafen oxidu s využitím například polyetherů, tyto pokusy se nepodařilo zreprodukovat.

Při hydrolytické polymeraci  $\epsilon$ -kaprolaktamu se nám podařilo dispergovat grafen oxid v první fázi procesu v tavenině monomeru. Právě přídavek  $\epsilon$ -aminokapronové kyseliny jako iniciátoru polymerace urychluje dispergaci. Infračervenou spektroskopií, termogravimetrickou a elementární analýzou bylo prokázáno, že reakce  $\epsilon$ -aminokapronové kyseliny s funkčními skupinami grafen oxidu vede k oddálení vrstev a zlepšení kompatibility složek systému. Byly provedeny polymerace s různým obsahem grafen oxidu, vyhodnocen obsah polymeru a termické vlastnosti. Tento postup slibuje nové možnosti při přípravě nanokompozitů polyamidu 6 a grafen oxidu.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

## **Simulovaná degradace polyesteramidových vláknenných vrstev**

Autor: Gabriela Mužíková  
Ročník: M1  
Ústav: Polymerů  
Školitel: Ing. Lenka Malinová, prof. Ing. Jiří Brožek, CSc.

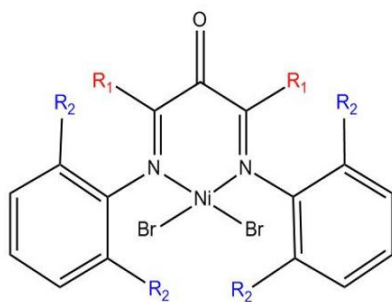
Polyesteramidy obsahující  $\epsilon$ -kaprolaktamové a  $\epsilon$ -kaprolaktonové strukturní jednotky jsou zajímavými materiály, ve kterých se kombinují dobré mechanické vlastnosti odvozené od polyamidu 6 a biodegradabilita poly( $\epsilon$ -kaprolaktonu). Z tohoto materiálu lze připravit vláknenné vrstvy elektrostatickým zvlákňováním z roztoku nebo metodou „melt-blown“. Tyto vláknenné vrstvy mohou nalézt uplatnění jako nosiče pro mikroorganismy při bioremediaci odpadních vod. Práce je zaměřena na detailní prostudování degradace polyesteramidových vláknenných vrstev abiotickou hydrolýzou. Polyesteramidové vláknenné vrstvy byly získány zvlákňováním technikou „melt-blown“ na partnerském pracovišti. Abiotická hydrolýza probíhala v Sørensenově pufru při pH 7,4 po dobu 4 až 24 týdnů při teplotě 60 °C. Rozsah degradace vrstev byl vyhodnocen z úbytků hmotnosti, poklesu redukovaných viskozit, ze změn termických vlastností, IČ spekter a morfologie povrchu (SEM).

Sekce : Chemie a technologie polymerů

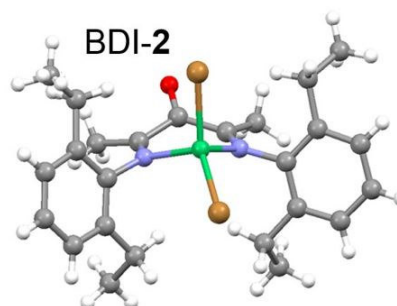
## **Syntéza $\alpha$ -keto- $\beta$ -diiminových komplexů niklu a jejich polymerační schopnosti**

Autor: Bc. Anatolij Sokolohorskyj  
Ročník: M2  
Ústav: Polymerů  
Školitel: Ing. Jan Merna, Ph.D.

Cílem této práce je syntéza série nových  $\alpha$ -keto- $\beta$ -diiminových Ni komplexů (Schéma), které jsou vhodné pro polymeraci olefinů a při vhodné struktuře ligandu umožňují i jejich živou a zároveň stereospecifickou polymeraci. Byl připraven a plně charakterizován komplex BDI-2 včetně krystalové struktury. Překvapivě nejvíce labilní sloučeninou v syntéze je  $\alpha$ -keto- $\beta$ -diiminový ligand, který se rychle rozkládá i pod inertní atmosférou. Polymerací ethenu, propenu a hex-1-enu pomocí BDI-2/MAO byly připraveny vysokomolekulární polymery ( $M > 100k$ ) při TOF 100-4000 h<sup>-1</sup>.



|       | R <sub>1</sub> | R <sub>2</sub> |
|-------|----------------|----------------|
| BDI-1 | Me             | Me             |
| BDI-2 | Me             | Et             |
| BDI-3 | Ph             | Me             |
| BDI-4 | Ph             | iPr            |



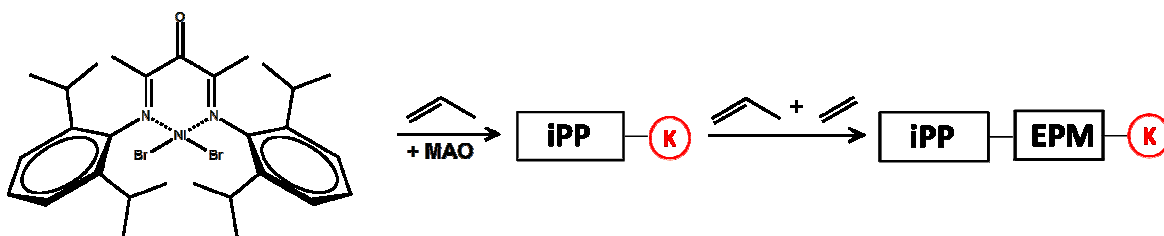


Sekce : Chemie a technologie polymerů

## Příprava stereoblokových olefinických kopolymerů

Autor: Ondřej Železník  
Ročník: M1  
Ústav: Polymerů  
Školitel: Ing. Jan Merna, Ph.D.

Cílem této práce je příprava stereoblokového kopolymeru iPP-blok-EPM pomocí živé a zároveň isospecifické polymerace katalyzované  $\alpha$ -keto- $\beta$ -diiminovým komplexem niklu (Schéma). Byly připraveny vysokomolekulární polypropyleny (s  $T_m=78^\circ\text{C}$  odpovídající  $[mmmm]\sim 0.60$ ) a polyhexeny s velmi úzkou distribucí molární hmotnosti ( $M>100k$ ,  $\bar{D}<1.2$ ). Byl testován i vliv úpravy methylalumoxanu (MAO) i využití jednoduchých alkylaluminíí jako kokatalyzátorů Ni komplexu. Strategií sekvenční polymerace propenu následované kopolymerací propenu s ethenem byl připraven blokový kopolymer iPP-blok-(E-co-P).



Sekce : Chemie a technologie polymerů

## Obrazová analýza a jej využitie pre hodnotenie distribúcie zložiek gumárenskej zmesi

Autor: Martina Živčáková  
Ročník: B3  
Ústav: Fyziky a měřicí techniky  
Školitel: Ing. Anna Korbářová, Ph.D., Ing. Jiří Brejcha, Ing. Zdeněk Hrdlička, Ph.D.

Táto práca vznikla za spolupráce spoločnosti MITAS a.s., ktorý je jedným z predných európskych výrobcov poľnohospodárskych a industriálnych pneumatík.

V tejto práci sme využili obrazovú analýzu pre hodnotenie distribúcie zložiek gumárenskej zmesi, najmä plnív. Táto metóda nám umožnila vidieť v daných zmesiach to, čo za normálnych podmienok, tj. voľným okom, nie sme schopní odhaliť.

K dispozícii sme mali zmesi, ktoré boli vyrobené na dvoch miešacích linkách a na laboratórnom miešači. Zaujímali nás rozdiely medzi jednotlivými šaržami, ktoré boli vyrobené v rovnakom čase a šaržami v rámci jedného miešača. Merali sme veľkosť častíc na ploche koliečok, ktoré boli upečené z jednotlivito pripravených zmesí na výrobných linkách.

Fyzikálno-mechanické vlastnosti sme sa pokúsili vysvetliť pomocou výsledkov obrazovej analýzy.

Sekce : Materiálové inženýrství I

## **Příprava kovových nanočástic metodou naprašování do PEG**

Autor: Roman Elashnikov  
Ročník: M2  
Ústav: Ústav inženýrství pevných látek  
Školitel: doc. Ing. Petr Slepíčka, Ph.D.



Kovové (Au) nanočástice byly připraveny metodou katodového naprašování do polyethylenglykolu s nízkou molekulární hmotností (PEG-400). PEG byl vybrán, neboť má dostatečně nízký tlak nasycených par při depozičním tlaku, může stabilizovat NPs a je biokompatibilní materiál. Byl sledován vliv podmínek katodového naprašování a koncentrace systému kov/PEG/H<sub>2</sub>O na vlastnosti nanočástic. Charakterizace nanočástic byla provedena metodami TEM (transmisní elektronová mikroskopie), AAS (atomová absorpční spektrometrie) a UV-Vis spektroskopie.

Sekce : Materiálové inženýrství I

## **Příprava grafenových vrstev**

Autor: Bc. Robin Hendrych  
Ročník: M2  
Ústav: Ústav inženýrství pevných látek  
Školitel: doc. Ing. Petr Macháček, CSc.

Grafen je jednovrstvý (mono-layer), popřípadě několikavrstvý (few-layer) uhlík ve strukturní formě šestiúhelníků. Vykazuje mnoho mimořádných charakteristik, které ho předurčují k budoucímu použití v širokém spektru materiálových aplikací, zejména v elektronice. Jeho unikátní struktura a výjimečné fyzikální vlastnosti udávají potenciál ke vzniku nové generace technologií za hranicí klasických materiálů. Vynikající pohyblivost nosičů náboje a saturační rychlost umožňují vysokou přepínací rychlost vhodnou pro analogové i číslicové elektronické obvody s vysokým kmitočtem. Grafen je dále možné využít pro transparentní vodivé elektrody, senzory, elektrody Li-ion baterií, superkondenzátory atd.

Praktickým cílem práce byla příprava grafenových vrstev technologií žíháním struktur kov/SiC za teplot v rozmezí 800-1050 °C ve vakuu. Jako kov byl použit nikl a kobalt. Základní parametry grafenových vrstev byly určovány z výsledků Ramanovy spektroskopie. Úspěšně byly připraveny vrstvy grafenu blížící se dvouvrstvé struktuře.

Sekce : Materiálové inženýrství I

## **Príprava Si-ohmických kontaktov na SiC**

Autor: Peter Konrád  
Ročník: M1  
Ústav: Ústav Inženýrství pevných látek  
Školitel: doc. Ing. Petr Macháček, CSc.

Práce je zaměřená na přípravu Si-ohmických kontaktů na SiC. Vrstvy Si s hrúbkou 50 a 100 nm boli deponované metódou naparenia cez metalickú masku, čím boli vytvorené testovacie štruktúry pre meranie kontaktnej rezistivity. Takto pripravené vzorky boli rozrezané na malé kúsky, ktoré boli žíhané za rôznych podmienok (teplota, čas, atmosféra). Po každom žíhaní bola zmeraná kontaktná rezistivita. Predbežné výsledky ukazujú, že žíhanie vzoriek vo vákuu má výrazný vplyv na rezistivitu kontaktov. Morfológia povrchu má kvapkovitý charakter a Ramanovou spektroskopiou bolo zistené, že sa jedná o polykryštalický Si. Žíhanie v argóne poskytlo štruktúry s väčšou rezistivitou, avšak s lepšou povrchovou morfológiou. Si kontakty žíhané v argóne obsahujú menší podiel polykryštalickej zložky. Získané výsledky boli porovnávané s Ni kontaktmi, ktoré sa pokladajú za štandard.

Sekce : Materiálové inženýrství I

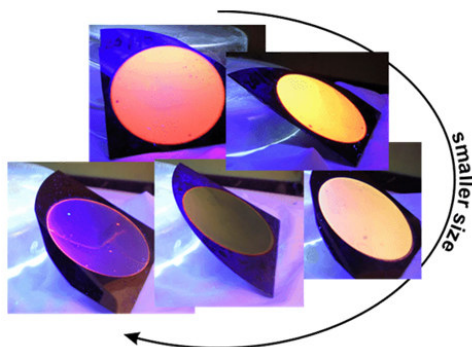
## **Štúdium kovových vrstiev na PLLA**

Autor: Michaela Nagyová  
Ročník: M1  
Ústav: Ústav inženýrství pevných látek  
Školitel: doc. Ing. Petr Šlepička, Ph.D.

Tenké kovové vrstvy v spojení s polymérem substrátom zohrávajú významnú úlohu napríklad v mikroelektronike (spojenie ideálny izolant-ideálny vodič), či ako substrát v tkanivovom inžinierstve. Táto práca sa zaoberá skúmaním kovových vrstiev (Au, Pd, Pt) o hrúbke 10 a 40 nm nanesených na polymérom substráte (PLLA). Sada vzoriek bola pripravená metódou katódového naprašovania a ich následným tepelným namáhaním pri teplotách 55 °C, 60 °C a 65 °C a rôznych dobách - 10, 30, 60 a 180 minút. Na pripravených vzorkách boli sledované zmeny v optických vlastnostiach metódou UV-Vis spektroskopie, morfológii povrchu využitím mikroskopie atomárných síl a laserovou konfokálnou rastrovacou mikroskopiou. Pre stanovenie povrchovej zmáčavosti sa merala ich povrchová energia. Spojitosť vrstiev bola študovaná meraním plošnej rezistivity. Výsledkom práce je charakterizácia vplyvu časového tepelného namáhania na vlastnosti systému kov-PLLA.

## **Elektro-chemická příprava křemíkových nanočástic**

Autor: Egor Podkorytov  
Ročník: M2  
Ústav: Ústav inženýrství pevných látek  
Školitel: prof. Ing. Jindřich Leitner, DrSc, FZÚ AVČR: RNDr. Kateřina Herynková, Ph.D.  
Ing. Ondřej Cibulka, Ph.D.



Nanočástice křemíku mají potenciální využití v mnoha oblastech, zejména ve fotonice a v lékařství. Aby bylo možné změnit chemickou funkčnost nebo fyzikální vlastnosti nanočástic, je potřeba nalézt spolehlivé metody povrchové funkcionizace. Křemíkové nanočástice byly připraveny z krystalického křemíku elektrochemickým leptáním v kyselině fluorovodíkové. Pro analýzu nanočástic jsme ze získaného materiálu, tzv. porézního křemíku, připravili koloidní roztok. Popis tvaru a velikosti částic byly prováděny metodou DLS (dynamický rozptyl světla) a TEM (tunelovací elektronová mikroskopie). Z optických vlastností je důležitá zejména fotoluminiscence ve viditelné oblasti

spektra, kterou lze využít např. jako luminiscenční markery v medicínském výzkumu. Fotoluminiscenci křemíkových nanoclusterů jsme studovali v uspořádání za pokojové teploty s buzením čarou HeCd laseru o vlnové délce 325 nm.

## **Příprava a charakterizace stříbrných nanočástic**

Autor: Bc. Jan Šebesta  
Ročník: M2  
Ústav: Ústav inženýrství pevných látek  
Školitel: Ing. Jakub Siegel Ph.D.

Práce se zabývá přípravou nanočástic stříbra přímým naprašováním do glycerolu. Glycerol jako substrát byl vybrán pro svou nízkou tenzi par, netoxicitu a biologickou odbouratelnost. Připravené vzorky byly analyzovány prostřednictvím transmisního elektronového mikroskopu (TEM), spektroskopie v ultrafialovém a viditelném spektru (UV-VIS) a metodou dynamického rozptylu světla (DLS). TEM analýza poskytla informace o velikosti a morfologii nanočástic. UV-VIS spektroskopie nám umožnila zjistit, zda částice aglomerují. Z DLS jsme zjistili distribuci velikosti nanočástic. Pro potřeby TEM analýzy bylo nutné vzorky naředit destilovanou vodou. Separované nanočástice (odstředěný roztok glycerolu) byly podrobeny RTG analýze pro kontrolu přítomnosti oxidů a dalších případných nečistot.

Sekce : Materiálové inženýrství II

## **Suzukiho coupling katalyzovaný přechodnými kovy imobilizovanými na polymerních nosičích**

Autor: Bc. Šárka Kočová

Ročník: M2

Ústav: Ústav inženýrství pevných látek

Školitel: prof. Ing. Václav Švorčík, DrSc., Ing. Jiří Šrogl Ph.D.

Reakce vedoucí ke vzniku C-C vazeb patří k velmi důležitým procesům. Představují základní možnost tvorby komplexních sloučenin z jednodušších molekul. Cross-couplingové reakce jsou katalyzovány přechodnými kovy. Imobilizace těchto kovů na pevný nosič přináší některé výhody: snadnou separaci katalyzátoru z reakce, jednodušší manipulaci, větší stabilitu.

Cílem této práce bylo připravit hydrosilylační polymerní gely a do jejich struktury imobilizovat přechodný kov (Pd, Ni, Pt a Rh). Gely se lišily tím, jaký kov byl do struktury imobilizován, množstvím kovu, síťovacím poměrem či použitým síťovadlem. Analýza gelů byla provedena metodami RFA a IČ. Gely byly následně použity pro katalýzu Suzukiho couplingu. Zjišťováním kinetiky reakcí pomocí přístroje GC-MS byly hledány nejvhodnější podmínky reakce a gely s neoptimálnějšími vlastnostmi. Též byla zkoumána možnost opakovaného použití gelu v reakci a skutečnost, zda se kovy v průběhu reakce z gelu vymývají.

Sekce : Materiálové inženýrství II

## **Příprava měkčených chitosanových filmů**

Autor: Romana Koubová

Ročník: M2

Ústav: Ústav inženýrství pevných látek

Školitel: Ing. Kateřina Kolářová, Ph.D.

Chitosan patří mezi přírodní polymery. Získává se alkalickou deacylací chitinu, který se nachází ve skořápkách korýšů – krevet, humrů a krabů. Chitosan je biokompatibilní, biodegradabilní, netoxický, má antibakteriální účinky, snižuje hladinu cholesterolu. Díky těmto vlastnostem nabývá na jeho významu. Používá se v papírenském a textilním průmyslu, ale také v kosmetice a medicíně při popáleninách nebo jako nosič pro transport léčiv a jeho řízené uvolňování.

Cílem této práce bylo měkčení chitosanových filmů, u kterých byla zjišťována jejich rozpustnost a pH stálost v destilované vodě. Také byly měřeny antibakteriální vlastnosti čistého chitosanu a chitosanu s přídavkem stříbrných nanočástic pomocí gramnegativních bakterií *Escherichia Coli* a grampozitivních bakterií *Staphylococcus Aureus* a *Bacillus Subtilis*.

## **Studium cross-couplingových reakcí trialkylpropargyl amoniových solí a jejich využití k modifikacím makromolekulárního nosiče**

Autor: Petr Novotný

Ročník: B3

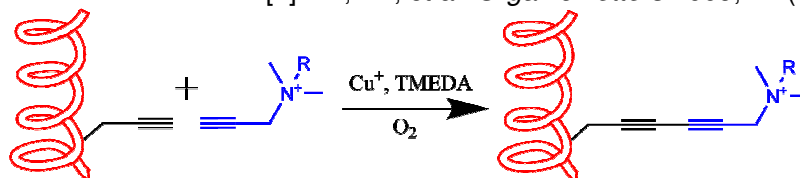
Ústav: Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, Ústav inženýrství pevných látek

Školitel: Ing. Jiří Šrogl Ph.D., prof. Ing. Václav Švorčík, DrSc.

Příprava funkcionalizovaných polymerů, je velmi účinnou metodou k modifikaci vlastností často malých aktivních organických molekul (Cílená doprava léčiv aj.), metoda sebou nese řadu výhod plynoucích z vlastností těchto materiálů. Pro ukotvení molekuly je většinou žádoucí tvorba stabilní kovalentní vazby (např. C-C) a mírné reakční podmínky tolerující často citlivé funkční skupiny aktivní molekuly. Jako alternativa k obvyklým modifikačním reakcím byla navrženy oxidativní couplingové reakce terminálních alkynů tzv. Hay coupling. [1] Reakce probíhá za velmi mírných podmínek za přístupu vzduchu při laboratorní teplotě. Příprava nesymetrických „diacetylenů“ (cross-coupling) je však za běžných podmínek neselektivní vlivem homocouplingové reakce [2]. Z tohoto důvodu byly navrženy a syntetizovány terminální alkyny na bázi trialkylpropargyl amoniových solí u nichž nebyl předpokládán homocoupling díky elektrostatickým repulzím kladných nábojů na dusíku. Reaktivita takovýchto substrátů v couplingových reakcích nebyla dosud studována, tudíž cílem práce bylo nejdříve potvrdit hypotézu a určit nejlepší reakční podmínky, následně využít získanou optimalizovanou proceduru k modifikaci syntetizovaných makromolekulárních nosičů - polymerů na bázi polymethakrylátů a silikagelu.

[1] A. S. Hay, *J. Org. Chem.* **1960**, 25, 1275–1276

[2] Yin, W.; et al. *Organic Letters* **2009**, 11 (3), 709–712.



*Schéma navržené modifikační reakce*

## **Modifikace mikrobiální celulózy v plazmatickém výboji**

Autor: Markéta Pišlová

Ročník: M1

Ústav: Ústav inženýrství pevných látek

Školitel: Ing. Kateřina Kolářová, Ph.D.

Tato práce je zaměřena na modifikaci mikrobiální celulózy v inertním plazma. Jedná se o šetrnou metodu k životnímu prostředí, je efektivní a také ekonomicky výhodná. Její využití je dobře známo především z tkáňového inženýrství. Mikrobiální celulóza je přírodní polymer, který je produkován určitými typy bakterií, např. *Gluconacetobacter*, *Aerobacter*, *Achromobacter*. Tento materiál se např. používá při hojení těžko léčitelných ran.

Doba modifikace v plazmatickém výboji byla 100 a 300 s při výkonu 5,5 W. Bylo zjištěno, že plazmatická modifikace má vliv na nasákavost, rychlost degradace i hodnotu kontaktního úhlu. Můžeme sledovat také změny v povrchové morfologii.

Výsledky měření ukazují, že čerstvě modifikované vzorky mikrobiální celulózy mají vysokou hodnotu nasákavosti. U modifikovaných vzorků se projevuje vliv stárnutí, tzn., dochází ke zvyšování hodnot kontaktního úhlu. Dále bylo zjištěno, že modifikací se mění povrchová morfologie a tím také dochází k rychlejšímu rozpouštění vzorku ve fyziologickém roztoku, který simuluje prostředí lidského těla.

Sekce : Materiálové inženýrství II

## **Deponované Ag nanostruktury pro bioaplikace**

Autor: Markéta Polívková  
Ročník: M2  
Ústav: Ústav inženýrství pevných látek  
Školitel: Ing. Jakub Siegel, Ph.D.

Nanostříbro má vzhledem k antibakteriální aktivitě velký aplikační potenciál. Používá se v lékařství pro nátěry nástrojů a zdravotnických prostředků. Je také začleňováno do obvazů, zdravotnických textilií, lékařských katetrů a antikoncepčních prostředků. Cílem práce je pomocí katodového naprašování připravit Ag nanovrstvy na biokompatibilních polymerech polysiloxanu a teflonu. Následně charakterizovat povrch vrstev o proměnné tloušťce pomocí goniometrie, UV-Vis spektroskopie, XPS a CLSM a současně vyhodnotit antibakteriální aktivitu těchto kompozitů. Měření vzorků probíhalo ihned po naprašení, po 14-ti denní relaxaci a po vyžihání. Goniometrická měření prokázala nárůst hodnoty kontaktního úhlu u deponovaných vrstev do depozičních časů 100 s, poté se trend obrací a kontaktní úhel monotónně klesá. Tento jev je pravděpodobně spojen s tvorbou souvislé vrstvy kovu. UV-Vis spektra vyžiháných vzorků s tlustší vrstvou Ag vykazují absorpční pás Ag při vlnové délce 420 nm. Výsledky XPS poukazují na pokles detekovaného množství Ag po teplotním namáhání vzhledem k vzorkům relaxovaným. Konfokální mikroskopií byla zachycena změna struktury Ag vrstev po vyžihání vzorků. Kapkové antibakteriální testy byly provedeny na kmenu gram-negativní bakterie *E. Coli*. Má práce prokázala, že po vyžihání výrazně klesá antibakteriální aktivita vzorků.

Sekce : Materiálové inženýrství II

## **Povrchové vlastnosti a degradabilita modifikovaného PHB**

Autor: Šárka Stýblová  
Ročník: M2  
Ústav: Ústav inženýrství pevných látek  
Školitel: Ing. Nikola Slepíčková Kasálková, Ph.D.

Tato práce se zabývá charakterizací povrchových vlastností a degradabilitou biopolymeru poly-3-hydroxybutyrátu (PHB). V první části byl studován vliv expozice Ar plazmatu na polaritu polymeru (kontaktní úhel a povrchová energie) při jeho stárnutí v závislosti na době expozice v plazmatu, leptání ve vodě a roubování zlatými nanočásticemi. V druhé části byla měřena tloušťka ablatované vrstvy (degradabilita) vzorků po modifikaci a leptání v prostředí shodném pro růst tkáňových kultur a morfologie povrchu.

PHB byl modifikován v inertním argonovém plazmatu při výkonu 5 a 9 W po dobu 50 a 480 s. Roubovány byly zlaté nanočástice ve tvaru nanokuliček. Degradace probíhala po dobu 3, 4, 5 týdnů a 4 měsíců. Polarita (smáčivost) povrchu byla studována goniometricky. Změna tloušťek leptaných vzorků byla stanovena gravimetricky. Morfologie a drsnost povrchu byla změřena pomocí AFM.

Sekce :        Materiálové inženýrství II

## **Plazmatická a chemická modifikace tenkých polymerních folií**

Autor:        Karel Výborný  
Ročník:       M2  
Ústav:        Ústav inženýrství pevných látek  
Školitel:      Ing. Nikola Slepíčková Kasálková, Ph.D.

Použití polymerů jako biomateriálů je závislé na jejich povrchových vlastnostech, především na drsnosti a polaritě povrchu. Smyslem práce bylo nalezení nejvhodnější kombinace metod plazmatické a chemické modifikace polymerních filmů vhodné pro následnou kultivaci buněk. Působením argonového plazmatu na 40-50 µm tenké polymerní folie (PTFE, PLLA a HDPE) byly nejprve „narušeny“ povrchové polymerní řetězce, které byly následně chemicky modifikovány působením vodných roztoků (2 hm.%) obsahujících různé funkční skupiny (OH, SH, NH<sub>2</sub>, PO<sub>4</sub>). Na základě zjištění míry smáčivosti (goniometrické měření kontaktního úhlu), stanovení drsnosti povrchu (metodou AFM), určení chemického složení (rentgenová fotoelektronová spektroskopie XPS) a zjištění polaritě povrchu (měření zeta potenciálu) byla popsána povrchová chemická struktura modifikovaného polymeru a určena teoreticky nejlepší kombinace materiálu a metody chemické povrchové modifikace pro adhezi a proliferaci buněk, která bude následně testováno *in vitro*.

Sekce :        Technologie restaurování I

## **Vlastnosti maltových směsí na bázi románského cementu**

Autor:        Richard Bureš  
Ročník:       B3  
Ústav:        Ústav chemické technologie restaurování památek  
Školitel:      Ing. Michal Novák, Ph.D.; Ing. Bc. Adéla Peterová

Románský cement se díky svým vlastnostem a relativně snadné a ekonomicky nenáročné výrobě stal důležitým stavebním a dekorativním materiálem 2. poloviny 19. století a počátku 20. století. Díky krátké době tuhnutí se toto pojivo používalo pro tvorbu okrasných prvků fasád například římsy a lizény, nebo se z něj odlévaly a dusaly ozdoby, které se následně osazovaly na trny. Po objevení Portlandského cementu ovšem produkce románského cementu téměř zanikla.

Cílem této práce je ověřit vlastnosti maltových směsí s různým poměrem románského cementu a vápenného hydrátu (100:0; 90:10; 75:25; 50:50). Připravené vzorky zrály jeden a tři měsíce. Byly použity směsi obsahující 350 kg pojiva na 1 m<sup>3</sup> plniva. Nejdříve byly měřeny vlastnosti směsí pojiv: normální konzistence, doba tuhnutí; a poté vlastnosti vyzrálých malt: pevnost v tahu za ohybu, pevnost v tlaku, hloubka karbonatace, propustnost pro vodní páry, otevřená pórovitost, nasákavost vodou, rychlost vztlínání vody a odolnost proti krystalizaci soli síranu sodného.



Sekce :            Technologie restaurování I

## **Hodnocení složení a mikrostruktury románských dlaždic z Dolních Chaběr**

Autor:        Bc. Mária Kavanová

Ročník:      M2

Ústav:        Ústav skla a keramiky

Školitel:     Ing. Alexandra Kloužková, CSc.; Ing. Petra Zemenová

Během archeologického výzkumu v kostele Stětí sv. Jana Křtitele v Dolních Chabrech, který započal v roce 1973, byly odkryty zbytky románské terakotové dlažby. Souvislé plochy reliéfně zdobených dlaždic byly součástí podlahy raně románské rotundy, na jejíchž základech stojí dnešní kostel. Nalezená torza keramických reliéfně zdobených dlaždic lze datovat do třetí čtvrtiny 12. století. Předložená práce se zabývá studiem a hodnocením střepových hmot celého souboru poskytnutých dlaždic (XRF, XRD, STA, optická mikroskopie, měření barevnosti a základních parametrů, stanovení zrnitosti atd.). V rámci jednotlivých analýz byly zvlášť hodnoceny matrix střepové hmoty, hrubá zrna ostřiva a jemné povrchové vrstvy. Na základě vyhodnocení provedených analýz a zkoušek byly prokázány rozdíly ve střepových hmotách dlaždic, související především nerovnoměrným výpalem, který nepřesáhl 950 °C.

Sekce :            Technologie restaurování I

## **Tmelenie pohyblivých prasklín pružnými tmelmi**

Autor:        Bc. Alexandra Mikušková

Ročník:      M2

Ústav:        Ústav chemické technologie restaurování památek

Školitel:     Ing. Irena Kučerová, Ph.D.

Súčasná materiálová rôznorodosť prináša jednoduchú možnosť úpravy a opravy nežiaducich škár pomocou vytmelenia tzv. tmeliacimi hmotami na báze polymérov s jednoduchou aplikačnou formou v podobe pasty. Vďaka elasticite použitých polymérov je škárovacia hmota schopná meniť svoj tvar bez straty tesniacej vlastnosti. Vytmelené škáry majú žiaľ obmedzenú životnosť. Predmetom tejto práce bolo charakterizovať prácu s danými tmelmi pri ich aplikácii na tmelený materiál, konkrétne na podložné sklíčka a lomovú plochu cementových trámčekov, vzájomné porovnávanie podobných či rozdielnych druhov tmelov a zistiť ich stabilitu v podmienkach umelého starnutia ako je znížená a zvýšená teplota, zvýšená relatívna vlhkosť a podmienky s UV žiarením. Ďalším cieľom tejto práce bolo pozorovanie správania tmeleného spoja a porovnávanie adhézie tmelov k tmelenému materiálu pomocou mechanického zaťaženia stmelených cementových trámčekov - pevnosť v ohybe trojbodovou metódou. Jednalo sa o stmelené cementové trámčeky, ktoré boli vystavené voľne v laboratórnom prostredí a cyklickému striedaniu podmienok voda – mráz.

Sekce : Technologie restaurování I

## **Modifikace gelů esteru kyseliny křemičité částicemi bentonitu a metakaolinitu**

Autor: Bc. Václav Nikendey  
Ročník: M2  
Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek  
Školitel: doc. Ing. Petr Kotlík, CSc., Ing. Bc. Adéla Peterová

Organokřemičitany jsou materiály využívané v památkové péči pro konsolidaci stavebních materiálů. Konsolidace probíhá polykondenzační reakcí (hydrolyzou) výchozího alkoxyasilanu na síť oxidu křemičitého. Nevýhodou těchto konsolidantů je náchylnost k praskání vzniklého gelu. K tomu dochází v důsledku vnitřního prnutí během tvorby gelu. V této práci bylo cílem experimentálně ověřit možnost zlepšení mechanických vlastností gelu modifikací částicemi bentonitu a metakaolinitu. V experimentu byl použit jako alkoxyasilan oligomerní tetraethoxysiloxan (Dynasylan 40) katalyzovaný třemi typy katalyzátorů – kyselinou chlorovodíkovou, dibutylcindilaurátem nebo dibutylcindiacetátem. Směsi byly modifikovány přídatkem 1, 3 a 5 hm. % částic metakaolinitu nebo bentonitu o velikosti částic 63-125  $\mu\text{m}$  a částic menších než 63  $\mu\text{m}$ . Vliv částic byl vyhodnocen porovnáním modifikovaných směsí vůči směsem nemodifikovaným na základě vzhledu směsí po 16-ti týdenní expozici při laboratorních podmínkách.

Sekce : Technologie restaurování I

## **Vliv vodního součinitele na vlastnosti malt na bázi románského cementu**

Autor: Marie Sokolová  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek  
Školitel: Ing. Michal Novák, Ph.D.

Románský cement je vysoce hydraulické pojivo, které bylo používáno na fasádách domů v období historismu, secese a modernismu. Vyznačuje se vysokou rychlostí tuhnutí, malým smrštěním, odolností proti solím a atmosférickým vlivům. Během 20. století bylo jeho užití nahrazeno portlandským cementem. Nyní probíhají výzkumy zkoumající vlastnosti románského cementu a způsoby jeho ochrany.

Práce se zabývá vlivem obsahu vody na vlastnosti maltových směsí, kde pojivem je románský cement. Byly vytvořeny vzorky se 4 různými hodnotami vodního součinitele, které byly stárnuty 28 dní a pravidelně kropeny vodou. Tyto vzorky byly posléze podrobeny normovaným zkouškám pevnosti v tahu za ohybu, pevnosti v tlaku, stanovení nasákavosti vodou za atmosférického tlaku, otevřené pórovitosti a objemové hmotnosti. Pomocí acidobazického indikátoru fenolftaleinu byla pozorována hloubka karbonatace.

Sekce :            Technologie restaurování I

## **Studium chemického složení a projevů koroze na renesančním skle vyzdviženém v Brně**

Autor:        Bc. Olga Tomanová  
Ročník:       M1  
Ústav:        Ústav skla a keramiky  
Školitel:      Dr. Ing. Dana Rohanová

Sklo vyráběné na území Čech a Moravy od konce 13. století se svým chemickým složením liší nejen od sodných skel, která byla tavena ve středozemní Evropě, ale také od draselných skel, která byla produkována v západní Evropě. Práce dokumentuje chemické složení souboru renesančního skla vyzdviženého archeology z městské odpadní jímky v Brně (ul. Panská). Protože na renesančním skle byly pozorovány korozní projevy jako iridiscence, železité nánosy, důlková koroze a tvorba korozních precipitátů, práce se taky zabývá souvislostí forem projevů koroze skla a jeho chemickým složením. Pro zjištění chemického složení skla byla využita analýza RTF a v případě zkorodovaných vzorků analýza SEM-EDS. Na základě provedených analýz a srovnáním s publikovanými údaji chemického složení skla je práci navrženo složení sklářského kmene, který byl rozšířený na našem území v období renesance.

Sekce :            Technologie restaurování I

## **Doplňování opuky maltami na bázi románského cementu**

Autor:        Bc. Kateřina Tomšová  
Ročník:       M2  
Ústav:        Ústav chemické technologie restaurování památek  
Školitel:      Ing. Michal Novák, Ph.D.; Ing. Bc. Adéla Peterová

Opuka je materiál obecně málo odolný degradaci. Jelikož poškozená místa opuky mohou být zdrojem dalšího poškození, je jedním ze základních kroků restaurátorského zásahu tato místa vyspravit. Cílem práce bylo posoudit vhodnost doplňkových tmelů ze dvou maltových směsí pojených románským cementem. K tomuto účelu byly stanoveny následující vlastnosti materiálů: paropropustnost, odolnost vůči poškození způsobenému krystalizací solí a mrazem, nasákavost vodou, otevřená pórovitost a pevnost v tlaku. Požadavkem je, aby vlastnosti malt byly co možná nejpodobnější vlastnostem opuky.

Obě malty z hlediska zkoumaných vlastností více či méně vyhovovaly, přičemž malta A pojená 100 % románským cementem vyhovovala méně než malta B pojená 50 % románským cementem s 50 % přídatkem vápenného hydrátu. Základním nedostatkem malty B byla nedostatečná adheze k opukovému podkladu. Proto je vhodné dále hledat optimální složení maltové směsi užívané jako tmel opuky.

Sekce :            Technologie restaurování I

## **Charakterizace keramických nálezů z Libosadu**

Autor:        Bc. Petra Witoszková  
Ročník:      M2  
Ústav:       Ústav skla a keramiky  
Školitel:    Ing. Alexandra Kloužková, CSc.

Předmětem práce, bylo hodnocení souboru historických střepů nalezeného v Libosadu u Jičína. Práce byla zaměřena na charakterizaci střepových hmot včetně jejich dekorace a následné porovnání získaných údajů s analýzami zahradní keramiky, která byla nalezena ve stejném objektu a teritoriálními nálezy tenkostěnných nádob. Z těchto střepů byly vybrány reprezentativní vzorky na příslušné analýzy střepových hmot a glazur (rentgenová fluorescenční analýza a rentgenová difrakční analýza). Pro měření barevnosti střepových hmot byl použit reflexní spektrofotometr Datacolor Merkury 2000. Byly také stanoveny základní parametry střepových hmot, charakterizují keramický střep z hlediska přítomnosti pórů a stupně slinutí keramické hmoty.

Sekce :            Technologie restaurování II

## **Vliv dezinfekčních prostředků na degradaci hedvábí**

Autor:        Bc. Alena Csöszová  
Ročník:      M1  
Ústav:       Ústav chemické technologie restaurování památek  
Školitel:    Ing. Klára Drábková

V restaurátorské praxi se často využívají dezinfekční prostředky k hubení mikroorganismů, preventivní konzervaci a v neposlední řadě k ochraně konzervátora. Před použitím dezinfekčního prostředku je nutné vědět, zda může docházet k poškození materiálu, na který bude použit. Cílem této práce bylo objasnit vliv vybraných dezinfekčních prostředků na přírodní hedvábí. Z široké škály dostupných dezinfekčních prostředků byli vybráni 4 zástupci. Z alkoholů Bacillol, z kovů koloidní stříbro, z kvartérních amoniových solí Septonex a z aldehydů Incidur. Vzorky přírodního hedvábí ošetřené příslušnými dezinfekčními prostředky byly podrobeny umělému stárnutí za sucha, za vlhka a pod UV zářením. U stárnutých vzorků byla měřena viskozita, změna barevnosti a pevnost v tahu. Výsledky byly porovnány s výsledky měření nestárnutých vzorků a standardů (neošetřených vzorků). Následně byl zhodnocen vliv použitých dezinfekčních prostředků na přírodní hedvábí.

## **Kolodiové fotografie**

Autor:        Bc. Petra Čadková  
Ročník:       M2  
Ústav:        Chemická technologie restaurování památek  
Školitel:      Dr. Ing. Michal Ďurovič



Mokrý kolodiový proces byl vynalezen roku 1851 Angličanem Frederickem Scottem Archerem. Postup byl využíván pouze krátce mezi léty 1851 – 1885. Podstatou tohoto procesu bylo exponování a vyvolávání fotografií za „mokra“.

Výzkum byl zaměřen na výběr vhodného fixačního prostředku, který by bylo možné využít při restaurování poškozených kolodiových fotografií z konce 19. století. Pro experimenty použité fotografie pocházely od různých autorů (fotografů), každý z nich pravděpodobně využíval k přípravě rozdílné složení kolodiových emulzí.

Na pět různých kolodiových fotografií byly nanесeny polymerní fixační prostředky ve formě roztoků. Tyto vzorky následně byly podrobeny umělému stárnutí bílým denním světlem a vlhkým teplem. Byly vyhodnoceny změny parametrů barvového prostoru CIELab.

## **Studium poškození přírodních textilií gama zářením**

Autor:        Bc. Anna Fialová  
Ročník:       M2  
Ústav:        Ústav chemické technologie restaurování památek  
Školitel:      Ing. Klára Drábková

Jednou z možných metod dezinsekce a dezinfekce je ozáření napadeného předmětu  $\gamma$ -zářením. Výhodou této metody je absence škodlivých reziduí a hluboká penetrace záření, nevýhodou je kumulativnost účinků záření a možné poškození polymerních materiálů. Působení  $\gamma$ -záření na bavlněné či hedvábné předměty totiž vyvolává nevratné změny v jejich struktuře, což se projeví zhoršením chemických a fyzikálních vlastností. Míra degradace je u přírodních vláken ve většině případů úměrná absorbované dávce  $\gamma$ -záření, vliv záření je umocňován dalším stárnutím ozářených předmětů, ale nelze mluvit o dramatickém urychlení degradace vyvolaném ozářením. Bavlněná vlákna vykazují již při nižších hodnotách  $\gamma$ -záření výrazný pokles průměrného polymeračního stupně, hedvábná vlákna vykazují při nižších hodnotách (přibližně do 5 kGy) relativní odolnost vůči  $\gamma$ -záření, při vyšších hodnotách už jsou změny v limitním viskozitním čísle výraznější. Vzhledem k uvedeným změnám nelze ozařování  $\gamma$ -zářením doporučit jako univerzálně vhodnou metodu dezinfekce, většina běžných plísni má letální dávku okolo 6 kGy a použití takto vysokých dávek vyvolává významné změny v přírodních vláknech. Pro dezinsekci, která vyžaduje pouze 500 Gy, lze  $\gamma$ -záření použít bez větších rizik, ale je nutné vést v patrnosti kumulativní účinek záření.

Sekce :        Technologie restaurování II

## **Ochrana skla polymerními nátěry (studium jejich aplikace a stability)**

Autor:        Bc. Barbora Holubová  
Ročník:       M2  
Ústav:        Ústav chemické technologie restaurování památek, Ústav skla a keramiky  
Školitel:      Ing. Irena Kučerová, Ph.D.; Ing. Zuzana Zlámalová Cílová, Ph.D.

Náplní semestrální práce bude materiálový průzkum zaměřený na technologie aplikace vybraných ochranných polymerních nátěrů. V experimentální části práce bude provedeno měření jejich stability po stárnutí simulujícím extrémní vlivy prostředí, jakým jsou historická skla v našich klimatických podmínkách vystavena (vysokým rozdílům teplot, působení vlhkosti i kapalné vody, UV záření). Dále bude provedeno měření adheze polymerních vrstev ke sklu, protože právě tato vlastnost ochranných filmů se jeví jako zcela zásadní pro plnění všech nezbytných funkcí ochranného nátěru na skle.

Sekce :        Technologie restaurování II

## **Vliv čištění kovových doplňků na textilie**

Autor:        Bc. Jan Krejčí  
Ročník:       M1  
Ústav:        Ústav chemické technologie restaurování památek  
Školitel:      Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.

Práce se zabývá poškozením bavlněných textilií vlivem prostředků používaných na čištění kovů. Byl sledován vliv vodného roztoku Chelatonu III, vodného roztoku kyseliny citronové, vodného roztoku thiomocoviny s kyselinou mravenčí a isopropanolového roztoku thiomocoviny s kyselinou mravenčí. Vzorky byly vystaveny umělému stárnutí (UV stárnutí, suché tepelné stárnutí, vlhké tepelné stárnutí). Míra poškození textilie byla sledována měřením barevných změn, měřením pevnosti a viskozimetrickým stanovením průměrného polymeračního stupně celulózy.

Sekce :           Technologie restaurování II

## **Vliv odkyselovacího procesu ZFB:2 na vlastnosti papíru**

Autor:       Bc. Dagmar Mičíková  
Ročník:     M2  
Ústav:      Ústav chemické technologie restaurování památek  
Školitel:    Dr. Ing. Michal Ďurovič

Kyselost papíru je zásadním problémem, který způsobuje žloutnutí, křehnutí až rozpad papíru. Řešením pro archivy, knihovny a jiná zařízení, kde se uchovávají papírové dokumenty, jsou metody hromadného odkyselování. Vývojem a zdokonalováním těchto metod se zabývá řada společností na celém světě. Cílem této práce je zhodnocení odkyselovací metody ZFB:2 německé firmy Zentrum für Bucherhaltung na základě hodnocení změn vlastností papíru po její aplikaci.

Sekce :           Restaurování a konzervování textilu

## **Restaurování kopie pánského kabátce ze 17. století**

Autor:       Bc. Kristýna Benediktová  
Ročník:     M1  
Ústav:      Ústav chemické technologie restaurování památek  
Školitel:    Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.; Barbora Štěpničková

Kopii pánského kabátce (majitel: Muzeum hlavního města Prahy) z první poloviny 17. století z ateliéru českého akademického malíře Václava Brožíka jsem restaurovala v rámci své bakalářské práce.

Restaurování zahrnovalo popis předmětu, technickou dokumentaci (technické nákresy a stříh jednotlivých dílů) a podrobný průzkum (historický kontext, analýzy a identifikace materiálů a textilně technologický rozbor). Na základě průzkumu objektu byla zvolena metoda čištění (kombinace mechanického a chemického čištění). Mechanicky poškozené části předmětu byly zajištěny proti další degradaci.

Celý postup restaurátorských prací byl fotograficky dokumentován. Výstupem z práce byla restaurátorská zpráva.

Sekce : Restaurování a konzervování textilu

## **Restaurování dámské kabelky z konce 19. stol.**

Autor: Helena Bradáčová

Ročník: B3

Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek

Školitel: Bc. Jana Bureš Víchová, Dis; Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.

Kabelka restaurovaná v rámci semestrálních prací na VŠCHT Praha je zapůjčena z Historického muzea – Národního muzea a je součástí Památníku Františka Palackého a Františka Ladislava Riegla.

Jedná se o látkovou kabelku tvaru váčku s podšívkou. Zavírání je přes ozdobné kovové tyčky pomocí bavlněných šňůr. Byl proveden umělecko-historický průzkum, textilně technologický rozbor a identifikace kovu tyček. Kabelka byla demontována, tím bylo zajištěno její dostatečné vyčištění. Jednotlivé textilní části byly čištěny ve vodní lázni s detergentem Syntaponem L. Pomocné hedvábné materiály byly nabarveny na podobný odstín. Svrchní tkanina byla podložena – technika šité skeletáže a podšívká restaurována technikou sendvič. Rozvolněné šňůry byly smotány, obtočeny nití a tím bylo dosaženo původního bochánkovitého vzhledu této spirálové nitě. Tyčky byly mechanicky čištěny a nalakovány. Po zpětné montáži bude kabelka adjustována naplocho a vhodně vytvarována pomocí inertní vycpávky.

Sekce : Restaurování a konzervování textilu

## **Restaurování rochetky z Kaple svatého Kříže**

Autor: Barbora Kůrková

Ročník: B4

Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek

Školitel: Bc. Jana Bureš Víchová, Dis.

Rocheta z bavlněného batistu byla restaurována v rámci semestrální práce v letním semestru 2013. Podstatnou část rochetky tvořil bavlněný tyl, na kterém byla výšivka s florálními motivy. Lem výstřihu zdobila krajka. Uvnitř rukávů byly zbytky tylu.

Předmět byl celkově znečištěn prachem a mezi řásením se nacházelo několik trhlin. Materiál na ramenou byl opotřebován.

Na základě podrobného průzkumu byl navržen postup restaurování. Rocheta byla vyprána ve vodní lázni s detergentem Hostapon T (koncentrace 1,5 g/l). Po usušení byly postupně podloženy trhliny mezi řásením nebarvenou krepelínou a skeletovány. Poškozená tkanina na ramenou byla překryta krepelínou, podobný postup byl použit i při překrytí zbytků tylu uvnitř rukávů.

Na závěr byl předmět vytvarován a uložen naplocho v krabici.



Sekce : Restaurování a konzervování textilu

## **Restaurování cechovní korouhve**

Autor: Andrea Malinovská  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek  
Školitel: Bc. Lucie Radoňová

Restaurování cechovní korouhve proběhlo v červenci 2013 během odborné praxe v restaurátorské dílně Muzea hlavního města Prahy. Jedná se o dvoucípou cechovní korouhev cechu krejčích z roku 1836, která byla vyrobena k příležitosti korunovace Ferdinanda I. Rozměry korouhve jsou 62 x 92 cm. Kovová konstrukce korouhve se dvěma očky sloužícími k vsunutí žerdi je potažena hedvábným damaškem tmavě zelené barvy, jehož vzor tvoří rostlinné motivy. Na obou stranách je v centrální části korouhve malba na plátně lemovaná užší portou. Obvod korouhve je zdoben silnějšími portami a dracounovými třásněmi.

Z korouhve byly odsáty nečistoty a prachové částice vysavačem s jemným odtahem. Dracounové třásně a porty byly čištěny s použitím destilované vody. Trhliny a prodřená místa byly podloženy plombami z hedvábné tkaniny a prošity skeletovacím stehem. Zbytky původního pokrytí kovového oka byly podloženy zelenou hedvábnou tkaninou, prošity skeletovacím stehem a následně překryty francouzskou krepelínou, přichycenou předním stehem.

Všechny použité restaurátorské postupy, průběžná fotodokumentace a výsledky textilně technologického rozboru jsou uvedeny v restaurátorské zprávě. Cechovní korouhev byla uložena v depozitáři dle požadavků zadavatele.

Sekce : Restaurování a konzervování textilu

## **Restaurování vějíře z palmových listů**

Autor: Bc. Zuzana Němečková  
Ročník: M1  
Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek  
Školitel: Ing. Klára Drábková

Předmět byl restaurován v rámci bakalářské práce oboru Konzervování-restaurování uměleckořemeslných děl z textilních materiálů. Vějíř byl zapůjčen z Národního muzea. Předmět se skládá ze dvou částí – spodní část tvoří palmové listy se zdobnými saténovými tkaninami, horní část je volně nasazena na palmové listy a jedná se o damaškovou tkaninu zpevněnou z rubu tvrdým papírem a ve spodní části zdobenou krajkou a mulem.

V rámci restaurování byl nejdříve proveden textilně technologický rozbor použitých materiálů, na jehož základě byly zvoleny vhodné čisticí a restaurátorské postupy. U obou částí byla nutná demontáž, aby bylo možné jednotlivé části vyčistit a poté poškozené textilní materiály a papír zpevnit přídatným materiálem. Přidávaný materiál byl vhodně volen a barven tak, aby odpovídal materiálům použitým na vějíři. Po vyčištění a zpevnění všech částí, byl vějíř zkompletován zpět do původní podoby. Pro vějíř byla vytvořena adjustace, kde jsou obě části uloženy odděleně. Jednotlivé restaurátorské kroky byly zaznamenány fotograficky. Nakonec byly pro předmět navrženy vhodné podmínky uložení a expozice.

Sekce : Restaurování a konzervování textilu

## **Restaurování secesních šatů**

Autor: Tereza Obalová  
Ročník: B2  
Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek  
Školitel: Ing. Alena Samohýlová

Restaurování šatů proběhlo v srpnu 2013 v rámci letní praxe v Uměleckoprůmyslovém museu v Praze. Šaty jsou ze světlé hedvábné tkaniny, podšívka je nová, zhotovená z viskózové tkaniny světlé barvy. Šaty jsou zdobené ikatovou stuhou a krajkou. Hedvábná tkanina byla v dobrém stavu, byla ale velmi znečištěna a to hlavně na sukni, u které se přistoupilo k demontáži a praní. Praná byla také krajka v dekoltu a na zádech a to bez demontáže. Byly vyspraveny nebo vyměněny staré restaurátorské zásahy. Krajky v dekoltu a na zádech byly nově podloženy, podložena byla také ikatová stuha. Po celou dobu restaurování jsem prováděla podrobnou fotodokumentaci a na závěr jsem sepsala zprávu z praxe.

Sekce : Restaurování a konzervování textilu

## **Restaurování pánského klobouku**

Autor: Bc. Kateřina Pavlasová  
Ročník: B3  
Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek  
Školitel: Bc. Jana Bureš Víchová, Dis.

Černošedý plstěný klobouk s hedvábnou stuhou a potním koženým páskem uvnitř, ze sbírky Historického muzea – Národního muzea byl restaurován 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, textilně technologický průzkum. Na základě průzkumu byl navržen postup restaurování. Stuha byla demontována a čištěna mokrou cestou, z klobouku byly odsáty prachové nečistoty. Potní pásek byl čištěn jemným stíráním pomocí tamponku s pěnou (Alvol OMK). Následovala šitá skeletáž stuhu a její zpětná montáž. Na závěr byl předmět adjustován a byly navrženy vhodné podmínky pro uložení a expozici.

Sekce : Restaurování a konzervování textilu

## **Restaurování dámského čepce**

Autor: Markéta Riegerová

Ročník: B3

Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek

Školitel: Bc. Jana Bureš Víchová, Dis; Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.

Restaurování černého dámského čepce z hedvábného rypsu zdobeného krajkou proběhlo v rámci semestrálních prací v akademickém roce 2012/ 2013 a 2013/2014. Čepce pochází ze sbírek Historického muzea – Národního muzea a je datován do 70. let 19. století.

Byl proveden historický a textilně-technologický průzkum čepce. Z důvodu rozsáhlého poškození jednotlivých částí byl čepce demontován. Tkaniny byly vyčištěny mokrou cestou, krajka byla vypnuta a podšita hedvábnou krepelínou. Po zpětné montáži byla pro čepce vytvořena vhodná adjustace sestávající z podstavce a krabice s dvojítm dnem.

Sekce : Restaurování a konzervování textilu

## **Restaurování paly s linteolem**

Autor: Michaela Ševčíková

Ročník: B3

Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek

Školitel: Bc. Jana Bureš Víchová, Dis.

Restaurování bylo provedeno v restaurátorských dílnách Správy Pražského hradu. Pala je vyrobena z vyztuženého bavlněného plátna s bohatou dracounovou výšivkou a linteolum je také z bavlněného plátna lemovaného paličkovanou krajkou. Při převzetí byla pala s linteolem v celkově dobrém stavu. Pala byla znečištěna prachovými nečistotami, místy byla odpáraná dracounová výšivka. Linteolum bylo celkově znečištěno, v rozích byly znatelné zbytky adheziva, a krajka lemující linteolum byla deformovaná. Z paly i z linteola byly odstraněny nevhodně připíchnuté inventární štítky. Z paly byly prachové nečistoty odsáty pomocí vysavače a dracounová výšivka byla opět přichycena pomocí hedvábných nití. Z linteola bylo odstraněno adhezivum, nejprve navlhčením pomocí vatového tampónu a poté mechanicky odstraněno pomocí skalpelu. Následně bylo celé linteolum vypráno v lázni s Hostaponem L, krajka byla vyrovnána. Během celého restaurování byla prováděna průběžně fotodokumentace a na závěr byla zhotovena restaurátorská zpráva.

Sekce : Restaurování a konzervování skla a keramiky

## **Restaurování pravěkých nádob**

Autor: Daniela Alblová

Ročník: B3

Ústav: Ústav skla a keramiky

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

Předmětem práce bylo restaurování tří nádob pocházejících ze záchranného archeologického výzkumu v Praze Běchovicích. Jednalo se o amforovitou zásobnici a misku se zdobeným okrajem knovízské kultury a hrncovitou zásobnici náležící k únětické kultuře. Střepy byly převzaty ve formě „*in situ*“, přičemž miska byla vložena v amforovité zásobnici. Součástí výplně u knovízské zásobnice byl také kamenný hrot a zbytky kostí z žárového pohřbu. Po vybrání výplně dřevěnou špachtlí, byly střepy šetrně omyty. Následovalo sušení volně rozložených střepů, jejich vyhledání, odebrání vzorků pro analýzy a pak lepení. Pro spojení jednotlivých střepů bylo použito reverzibilní lepidlo Dispercoll D2. Před sádrováním byl povrch předmětů ošetřen separátorem Lukopren S. Formy pro sádrování byly tvarovány ze zubařského vosku a plastelíny. Retušování tvaru a tloušťky sádrových doplňků proběhlo za mokra i za sucha a u dvou nádob bylo přistoupeno i k barevné retuši. Z provedených analýz chemického a mineralogického složení byla prokázána lokální zdroj surovin a přibližná teplota výpalu nádob. Pro předměty byly navrženy vhodné podmínky uložení v depozitu.

Sekce : Restaurování a konzervování skla a keramiky

## **Rekonzervace květináče z Pražského hradu**

Autor: Lucie Cyprisová

Ročník: B4

Ústav: Ústav skla a keramiky

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

Obal květináče, který je datován do 2. poloviny 16. až 17. století pochází z archeologických nálezů z Pražského hradu. Má hmoždířovitý tvar a je opatřen zelenou olovnatou glazurou, jejíž hlavní barvicí složkou je CuO. Střepová hmota obsahuje především křemen a nízké podíly draselného živce a muskovitu. Vzhledem k tomu, že při rekonzervačním zásahu byly patrné dva typy lepidel, lze předpokládat, že na předmětu proběhly minimálně dva restaurátorské zásahy. Po důkladném očištění bylo přistoupeno k vyhledávání, lepení, doplnění ztrát (sádra) a jejich barevné retuši (latex + temperové barvy). V rámci respektování zákroku provedeného v minulosti byly opětovně použity nepoškozené historické sádrové doplňky. Květináč se skládá z 15 keramických střepů a 39 sádrových doplňků. Součástí rekonzervace bylo navržení vhodných dlouhodobých podmínek uložení.

Sekce : Restaurování a konzervování skla a keramiky

## **Rekonzervace olejové lampy ze 14. století**

Autor: Bc. Anežka Černá  
Ročník: M1  
Ústav: Ústav skla a keramiky  
Školitel: Ing. Zuzana Zlámalová Cílová, Ph.D.; Sylvie Svatošová

Prezentovaná závěsná lampa na olej byla nalezena během archeologického výzkumu v bloku budov na Novém městě mezi Petruskou, Mlynářskou a Samcovou ulicí v letech 1969 – 1976. Byla již dříve slepena a nalakována, ale vzhledem k zestárnutí použitého lepidla a jiným chybám (přetoky lepidla, posunutí střepe, nečistoty apod.) byl vznesen požadavek na její rekonzervaci. Ta měla zahrnovat rozlepení předmětu, očištění střepe od starého lepidla, laku a nečistot a opětovné slepení.

Bylo provedeno několik analýz a to optický průzkum střepe pod stereomikroskopem, průzkum nábrusu z odebraného vzorku pod elektronovým mikroskopem s SDD detektorem (určení chemického složení střepe) a identifikace starého lepidla metodou IČ spektrometrie.

V rámci zásahu byl pro rozlepení předmětu a očištění hran a ploch střepe použit aceton. Pro opětovné slepení byla použita akrylátová pryskyřice Paraloid B-72. Na základě průzkumu byl povrch předmětu vyhodnocen jako stabilní a další konsolidace již nebyla nutná.

Sekce : Restaurování a konzervování skla a keramiky

## **Restaurování geometrické vitráže s ornamentální bordurou z Mariánských Lázní**

Autor: Ing. arch. Jan Černohorský  
Ročník: B2  
Ústav: Ústav skla a keramiky  
Školitel: Dr. Ing. Dana Rohanová; Jiří Černohorský

Práce řeší restaurování středního plátu vitrážového prosklení třídlínného obloukového okna z depozitu restaurátorského ateliéru Vitraj. Jde o vitráž z konce 19. století z oblasti Mariánských Lázní. Vitráž je tvořena čirými routy s malovanou barevnou bordurou po obvodu. Rozměr restaurované části je 60,5 cm (š) x 57,5 cm (v). Restaurátorským záměrem bylo rozebrání a očištění jednotlivých částí vitrážového plátu, doplnění původního tvaru a přeložení do nových olověných profilů. Před restaurováním byla vitráž znečištěna, čiré sklo bylo zamalováno bílou barvou. Byly provedeny průzkumy stavu památky (optická mikroskopie a chemická analýza pomocí RTF a SEM/EDS). Bylo zjištěno, že jde sodno-vápenatá skla vyrobená ručně technikou foukání válce s následným rozřínutím a vyhlazením. Barevná skla byla probarvená ve hmotě, pouze červené sklo bylo přejímané. Na povrchu skel byly patrné defekty v podobě škrábanců a začínající koroze. Jednotlivá skla byla vyčištěna, chybějící části doplněny a celý plát byl založen do nového olověného profilu a oboustranně pocínován.

Sekce : Restaurování a konzervování skla a keramiky

## **Rekonzervace trojnožky z Pražského hradu**

Autor: Pavla Glauningerová

Ročník: B3

Ústav: Skla a keramiky

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

Mgr. Blažková Gabriela Ph.D.

Cílem této práce bylo provést rekonzervační zásah nádoby z archeologického výzkumu Schwarzenberského paláce v Praze. V rámci průzkumu bylo stanoveno chemické (XRF) a mineralogické (XRD) složení střepové hmoty. Černá vysoce olovnatá glazura byla barvena kombinací oxidů  $\text{Cr}_2\text{O}_3$ ,  $\text{MnO}$ ,  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Co}_3\text{O}_4$ ,  $\text{CuO}$ ,  $\text{SnO}_2$  a  $\text{Sb}_2\text{O}_3$ . Tvar předmětu a orientace střepové hmoty svědčí o technologii vytváření na hrnčířském kruhu. Součástí exponátu jsou i sádrové doplňky z původního restaurátorského zásahu, které byly během rekonzervace zachovány. Po provedení průzkumu byla nádoba zrestaurována podle restaurátorského záměru předem schváleného zadavatelem (čištění, slepení, doplnění ztrát, barevná retuš). Použité materiály jsou plně reverzibilní (Duvilax LS 50, alabastrová sádra, akrylové barvy). Během restaurování byla provedena fotodokumentace. Závěrem byly navrženy vhodné podmínky uložení.

Sekce : Restaurování a konzervování skla a keramiky

## **Restaurování archeologické glazované keramiky**

Autor: Margarita Gorelikova

Ročník: B3

Ústav: Ústav skla a keramiky

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

Mgr. Blažková Gabriela Ph.D.

Cílem této práce bylo na základě restaurátorského průzkumu dle etických zásad provést rekonzervování dvou nádob z archeologického výzkumu Schwarzenberského paláce v Praze. Byly zrestaurovány 2 předměty kuchyňského nádobí: mísa a hrnec pro kombinovaný boční a spodní ohřev. Restaurátorský průzkum se skládal ze stanovení chemického (XRF) a mineralogického (XRD) složení střepové hmoty a byly analyzovány i použité glazury. Orientace střepové hmoty potvrdila technologii vytváření na rychlém hrnčířském kruhu. Po provedení průzkumu byly obě nádoby kompletně zrestaurovány podle restaurátorského záměru schváleného zadavatelem (očištění, slepení, doplnění, a dobarvení ztrát). Byly použity reverzibilní materiály (Duvilax LS 50, sádra). Postupy restaurování byly zaznamenány fotodokumentací a pro zrestaurované nádoby byly navrženy vhodné podmínky uložení.

Sekce : Restaurování a konzervování skla a keramiky

## **Rekonzervace skleněného džbánu z počátku 17. století**

Autor: Tomáš Kajánek  
Ročník: B4  
Ústav: Ústav skla a keramiky  
Školitel: Ing. Zuzana Zlámalová Cílová, Ph.D.;  
Aranka Součková Daňková, restaurátorka s licencií MK



Cílem této práce bylo provedení rekonzervace džbánu z kobaltově modrého skla datovaného do počátku 17. století. K zásahu bylo přistoupeno především z důvodu nedostatečného vyčištění předmětu při předchozím zákroku a degradace použitých lepidel. V rámci restaurátorského průzkumu byly pro analýzu odebrány vzorky lepidla, nečistot a samotného skla. Dále se postupovalo podle schváleného restaurátorského záměru: předmět byl nejprve rozlepen pomocí acetonového zábalu, při čištění střepů byla použita a následně vyhodnocena řada různých technik (chemických i mechanických), následovalo revizní vyhledání a slepení střepů. Před

samotným lepením byla provedena zkouška vlastností akrylátových pryskyřic – Paraloidu B67 a B72. Jako optimální pro tuto aplikaci se ukázal Paraloid B72 rozpuštěný v toluenu s přídavkem siliky (průměrná velikost částic menší než 3  $\mu\text{m}$ ). Z důvodu zajištění pevnějšího spoje a tak stability celého předmětu byla v jednom místě aplikována i epoxidová pryskyřice Hxtal Nyl-1. Pro zrestaurovaný předmět byl navržen ochranný režim. Výsledkem revizního zásahu bylo: odstranění zbytků degradovaných lepidel a nečistot z úložného prostředí (zvláště v místech výdutě zdobené vlákny) a nová hmotová rekonstrukce nádoby.

Sekce : Restaurování a konzervování skla a keramiky

## **Zmrtvýchvstalý Kristus - restaurování skleněné mozaiky**

Autor: Mgr. Jana Torňošová  
Ročník: B4  
Ústav: Ústav skla a keramiky  
Školitel: Dr. Ing. Dana Rohanová; MgA. Magdaléna Kracík Štorkánová

Projekt byl zaměřený na restaurování skleněné mozaiky neznámého autora s motivem Zmrtvýchvstalého Krista. Tato kulturní památka je umístěna v exteriéru hrobky na hřbitově na Malvazinkách. Mozaika ze začátku 20. století nebyla nijak udržována. Zatékání dešťové vody a působení exhalací způsobily její významnou devastaci. Pro špatný stav památky bylo proto rozhodnuto o její demontáži a transferu do restaurátorského ateliéru. Materiálový průzkum ukázal, že skleněné tessery ze sodno-olovnaté-křemičitého skla pochází z italské, blíže neurčené dílny. K analýzám chemického složení skla bylo použito metod SEM/EDS a RTG fluorescence. Kalící složky (krystalické fáze) byly analyzovány pomocí RTG difrakce. Podobně bylo zkoumáno i složení původních pojiv mozaiky a degradační produkty. Zajímavé je, že nedegradovaná pojiva měla stále značnou mechanickou pevnost. Metodou IR spektroskopie se organické modifikátory pojiv nepodařilo prokázat. Díky tomu, že se v podkladové omítce zachoval otisk opadané části mozaiky, bylo ji možné zrekonstruovat. Byly vypracovány kresebné podklady a mozaika byla restaurována. Chybějící tessery mozaiky byly doplněny skleněným materiálem ze soudobé italské dílny. Po dohodě se zadavatelem byla mozaika upevněna do kovového rámu tak, aby byla umožněna lepší manipulace nebo opětovný transfer.