

Seznam sekcí a složení komisí

Sekce:	Anorganická chemie místnost A210b, 9:00 hod.
Komise:	
Předseda:	doc. Ing. Olga Smrčková, CSc.
Členové:	Ing. Irena Hoskovcová, CSc. Ing. Hana Malichová Ing. David Petrýdes, Ph.D. (Preciosa) Ing. Aleš Strejc, Ph.D. (Moser)
Soutěžící:	Eichler Štěpán Bc. Jakub Altšmíd Ondřej Janovský Radka Metelková Hana Kvapilová Ladislav Nádherný Bc. Stanislav Staněk
Sekce:	Anorganická technologie posluchárna č. A32, 9:00 hod.
Komise:	
Předseda:	doc. Ing. Bohumil Bernauer, CSc.
Členové:	Ing. Ivona Sedlářová, Ph.D. Ing. Martin Zlámal Ing. Martin Paidar, Ph.D. Ing. Miloslav Lhotka, Ph.D. (organizační tajemník)
Soutěžící:	Bc. Jan David Bc. Jan Vít Bc. Filip Karas Bc. Jakub Mališ Bc. Radek Mísař Bc. Jakub Němeček Bc. Michal Němeček Martin Prokop Bc. Jiří Šafránek Bc. Jiří Süč

Sekce: **Kovové materiály I (plakátová)**
hlavní chodba ústavu 106, 9:00 hod.

Komise:
Předseda: doc. Ing. Luděk Joska, CSc.
Členové: doc. Ing. Jitka Jandová, CSc.
Ing. Jan Šerák, Ph.D.

Soutěžící: Bláhová Markéta
Bc. Milena Voděrová
Jaroslav Gubiš
Hofmanová Daniela
Bc. Václav Hošek
Bc. Jan Kaňok
Bc. Ivo Marek
Bc. Michal Martínek
Šárka Neumannová
Miroslav Šíma
Hana Vacková

Sekce: **Kovové materiály II (plakátová)**
hlavní chodba ústavu 106, 9:00 hod.

Komise:
Předseda: prof. Ing. Pavel Lejček, DrSc.
Členové: doc. Ing. Jaroslav Bystrianský, CSc.
Ing. Petr Dvořák, Ph.D.

Soutěžící: Tomáš Frýdl
Kateřina Wienerová
Bc. Pavel Hryzák
Daniel Jaksch
Štěpán Kadlec
Martin Klůčka
Lucie Mejzlíková
Bc. Hynek Moravec
Bc. Ladislav Sita
David Šotka
Milan Valalík

Sekce: **Anorganické nekovové materiály I (plakátová)**
posluchárna A02, 9:00 hod.

Komise:

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

Členové: doc. Ing. František Škvára, CSc.

Ing. František Novotný, CSc.

Dr. Ing. Martin Míka

Ing. Eva Gregorová, CSc. (organizační tajemník)

Soutěžící:

Tomáš Frýdl

Zuzana Andelová

Bc. Martina Urbanová

Hana Dvořáková

Lukáš Hrbek

Michal Kirchner

Denisa Krychtálková

Bc. Lenka Kuncová

Helena Maříková

Sekce: **Anorganické nekovové materiály II (plakátová)**
posluchárna A02, 9:00 hod.

Komise:

Předseda: prof. Ing. Lubomír Němec, DrSc.

Členové: doc. Dr. Dipl.-Min. Willi Pabst

doc. Ing. Stanislav Kasa, CSc.

Ing. Diana Horkavcová, Ph.D.

Ing. Miroslav Rada, CSc. (organizační tajemník)

Soutěžící:

Tomáš Frýdl

Simona Bárťová

Bc. Klára Zítková

Tadeáš Gavenda

Jan Krupička

Martina Landová

Štěpán Pech

Jana Šámalová

Bc. Denisa Trypesová

Bc. Lenka Vinšová

- Sekce:** **Analýza a vlastnosti léčiv (přednášková)**
posluchárna A31, 8:30 hod.
- Komise:**
- Předseda:** prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc. (108)
- Členové:** RNDr. Alexandr Jegorov, CSc. (Teva Czech Industries, s.r.o.)
doc. Ing. František Kovanda, CSc. (108)
Ing. Jan Čejka, Ph.D. (108)
Ing. Bohumila Jakubíková (108) (organizační tajemník)
- Soutěžící:** Bc. Lenka Altmanová
Vladimíra Vosmanská
Štefan Auer
Kamila Ctiborová
Iva Koupilová
Bc. Zuzana Maryšková
Michal Šimek
Bc. Jana Vachová
-
- Sekce:** **Organická chemie B (bakalářská)**
místnost AS02, děkanát FCHT, 9:00 hod.
- Komise:**
- Předseda:** doc. Ing. Radek Cibulka, Ph.D.
- Členové:** doc. Ing. Igor Linhart, CSc.
Dr. Ing. Jana Hodačová
Ing. Jiří Vokál, Ph.D. (Lach-Ner)
Ing. Jan Kočí, Ph.D. (Interpharma Praha)
Ing. Jiří Nohejl (Sigma-Aldrich)
Mgr. Martin Švec (P-Lab)
Ing. Anna Kovářová (organizační tajemník)
- Soutěžící:** Jiří Tůma
Petr Slavík
Václav Čmolík
Eva Vrbková
Lukáš Vrzal
Martin Horčic
Filip Botha
Soňa Boháčová
Milan Mališ
Danuše Vavřinová

Sekce: **Organická chemie M1 (magisterská)**
místnost A 250, 9:00 hod.

Komise:

Předseda: prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.

Členové: doc. RNDr. Jan Kotek, Ph.D. (PřF UK Praha)
Ing. Hana Kotoučová (PedF UK Praha)
Ing. Ivan Veselý, CSc. (Cayman)
Ing. Hanuš Slavík (Hexion)
Ing. Marcela Kubásková (Merck)
Ing. Libor Janečka (Merci)
doc. Ing. Jan Budka, Ph.D. (organizační tajemník)

Soutěžící: Jiří Šturala
Markéta Zajícová
Ladislav Plaček
Barbora Podlešáková
Bc. Eva Hanzlová
Petr Koutník
Michal Pozník

Sekce: **Organická chemie M2 (magisterská)**
místnost A 278e, 9:00 hod.

Komise:

Předseda: prof. Ing. Ivan Stibor, CSc. (ÚOCHB AV ČR)

Členové: doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.
Ing. Václav Kozmík, CSc.
doc. Ing. Stanislav Rádl, CSc. (Zentiva)
Ing. Jan Kroupa, Ph.D. (Proxim)
Ing. Zdeněk Prošek (Synthon)
Ing. Jakub Sadílek (Ingos)
Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D. (organizační tajemník)

Soutěžící: Jan Holub
Jiří Veselý
Eva Konečková
Anna Šuláková
Bc. Lukáš Severa
Vendula Kelbichová
Michaela Mačková

Sekce: **Organická chemie M3 (magisterská)**
místnost A 278c, 9:00 hod.

Komise:

Předseda: prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

Členové: doc. Ing. František Hampl, CSc.
Ing. Petr Holý, CSc. (ÚOCHB AV ČR)
Ing. Květuše Mašková (Vitrum)
Ing. Martin Skalický (Apigenex)
Ing. Jan Velík (Cayman Pharma)
Ing. Petra Cuřínová, Ph.D. (ÚCHP AV ČR)
Ing. Michal Himl, Ph.D. (organizační tajemník)

Soutěžící: Vladimír Herzig
Jan Slaviček
Ivana Jurásková
Ondřej Píša
Marie Dymičová
František Stejskal
Bc. Jan Holec

Sekce: **Chemická a farmaceutická technologie**
posluchárna č A01, 9:00 hod.

Komise:

Předseda: doc. Ing. Bohumír Dvořák, CSc.

Členové: Ing. Iva Paterová, Ph.D. (tajemnice)
Ing. Jiří Krupka, Ph.D.
Ing. Ladislav Kurc, CSc.

Soutěžící: Jan Bednář
Tereza Loužilová
Luděk Boháček
Bc. Jan Holáň
Jiří Kovářík
Jaroslav Pfeifer
Bc. Jan Přech
Jiří Spiegl, Gabriel Toth
David Stíbal

- Sekce:** **Syntéza a výroba léčiv I**
místnost A 77c, 9:00 hod.
- Komise:**
Předseda: prof. Ing. Jiří Hanika, DrSc.
Členové: Ing. Lucie Potucká, Ph.D. (tajemnice)
doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.
Ing. Kamila Syslová
- Soutěžící:** Erika Gedeonová
Beáta Vilhanová
Michaela Hrdá
Diana Majerová
Bc. Lucie Makovcová
Annamarie Némethová
Iva Nováková
Bc. Kateřina Punčochová
Jiří Václavík
-
- Sekce:** **Syntéza a výroba léčiv II**
posluchárna A 081a, 9:00 hod.
- Komise:**
Předseda: doc. Ing. Vratislav Tukač, CSc.
Členové: Ing. Eliška Vyskočilová, Ph.D. (tajemnice)
Ing. Miroslav Petrisko, CSc.
Ing. Jan Patera, Ph.D.
- Soutěžící:** Bc. Lucie Abelová
Kateřina Šimková
Pavla Hladíková
Dana Irglová
Pavlína Kyselá
Hana Němcová
Adéla Pankráčová
Jiří Petrů

Sekce: **Informatika a chemie (přednášková)**
posluchárna č. BS2, 14:00 hod.

Komise:

Předseda: Ing. Miloslav Nič, Ph.D.

Členové: Ing. Jiří Jirát, Ph.D.

Ing. Bedřich Košata, Ph.D. (CZ.NIC, z.s.p.o.)

Ing. Filip Lankaš, CSc. (ÚOCHB AV ČR)

Ing. Kryštof Dibusz (Hewlett Packard)

Mgr. Miroslav Šimek

Soutěžící:

Martin Mastný

Jan Mokrý

Tomáš Müller

Tomáš Novotný

Filip Sedlák

Ctibor Škuta

Bc. Milan Voršilák

Sekce: **Chemie a technologie polymerů**
posluchárna B31, 9:00 hod.

Komise:

Předseda: doc. Ing. Petr Sysel, CSc.

Členové: doc. Ing. Antonín Kuta, CSc.

Ing. Radka Kalousková, CSc.

Ing. Jan Merna, Ph.D.

Ing. Zdeněk Hrdlička, Ph.D.

Ing. Jana Kredatusová (organizační tajemník)

Soutěžící:

Jakub Bareš

Bc. Viviana Tandlerová

Bc. Anna Brodská

Bc. Darja Hasalíková

Ilona Herzigová

Bc. Ondřej Hylský

Bc. Jakub Janák

Bc. Alena Kadeřábková

Martin Špergl

Robert Mundil

Bc. Zdeněk Hošťálek

Bc. Kateřina Nytrová

Bc. Michaela Stolinová

Sekce: **Materiálové inženýrství se zaměřením na materiály pro elektroniku a biomateriály
místnost B360, 9:00 hod.**

Komise:

Předseda: prof. Ing. Jindřich Leitner, DrSc.

Členové: doc. Ing. Petr Macháč, CSc.

doc. Ing. Jiří Brožek, CSc., Ústav polymerů VŠCHT

Ing. Nikola Slepíčková Kasálková

Ing. Petr Slepíčka, Ph.D. (organizační tajemník)

Soutěžící:

Tereza Amrůzová

Adéla Vošvrdová

Bc. Markéta Bačáková

Bc. Milada Čechová

Robert Krajcar

Petra Parobková

Petr Šimek

Marek Staszek

Simona Trostová

Jiří Tůma

Sekce: **Technologie restaurování a konzervování (plakátová)
chodba A přízemí (před A65), 8:30 hod**

Komise:

Předseda: prof. Ing. Pavel Novák, CSc.

Členové: Ing. Kateřina Doubravová, Ph.D.

Ing. Irena Kučerová, Ph.D.

Ing. Petra Vávrová, Ph.D.

Ing. Klára Drábková

Ing. Helena Hradecká

Soutěžící:

Martina Anisová

Bc. Tereza Tribulová

Barbora Benetková

Anna Fialová

Zuzana Gazdová

David Kohout

Alžběta Kopecká

Zuzana Sedláková

Eva Štemberová

Kateřina Tomšová

Kristýna Kolářová

Bc. Marie Netušilová

Sekce: **Restaurování a konzervování textilií (plakátová)**
chodba A přízemí (před A63), 8:30 hod

Komise:

Předseda: doc. Ing. Petr Kotlík, CSc.

Členové: Dr. Ing. Michal Ďurovič

Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.

Ing. Lenka Kučerová

Ing. Martina Ohlídalová

Bc. Jana Víchová, DiS., licencovaný restaurátor

Soutěžící: Kristýna Benediktová

Katarína Jakubovi

Barbora Kalinová

Ivana Kolarčíková

Zuzana Němečková

Petra Ptáčníková

Lucie Radoňová

Květa Richtmrová

Kristýna Svěráková

Sekce: **Restaurování a konzervování kovů (plakátová)**
chodba A přízemí (před A62), 10:00 hod.

Komise:

Předseda: Ing. Jiří Děd, CSc.

Členové: Ing. Jan Stoulil, Ph.D.

Ing. Šárka Msallamová

Ivan Houska, licencovaný restaurátor

Soutěžící: Andrea Černá

Lenka Dlabolová

Lucie Králová

Radek Němec

Zuzana Pecenová

Martin Poništ

Ludmila Vaňková-Svozilová

Petra Witoszková

Sekce: **Restaurování a konzervování skla a keramiky (plakátová)
chodba A přízemí (před A64), 10:00 hod.**

Komise:

Předseda:

Členové:

doc. Ing. Jaroslav Kloužek, CSc.

Ing. Zuzana Cílová, Ph.D.

Ing. Alexandra Kloužková, CSc.

MgA. Milan Krajíček

Dr. Ing. Dana Rohanová

Aranka Součková Daňková, licencovaný restaurátor

Ljuba Svobodová, licencovaný restaurátor

Soutěžící:

Daniela Alblová

Pavla Doležalová

Bc. Šárka Jonášová DiS.

Michaela Knížová

Vladimíra Šimková

Kira Tokareva

Ústav	Počet sekcí	Počet prací
101 – Anorganická chemie	1	6
105 – Anorganická technologie	1	11
106 – Kovové materiály I, II	2	22 (11+11)
107 – Anorganické nekovové materiály I, II	2	17 (8+9)
108 – Analýza a vlastnosti léčiv	1	8
110 – Organická chemie M1,M2,M3 + B	4	31 (7+7+7+10)
111 – Organická a farmaceutická technologie	1	9
Syntéza a výroba léčiv I,II	2	17 (9+8)
112 – Chemie a technologie polymerů	1	13
126 – Materiálové inženýrství se zaměřením na materiály pro elektroniku a biomateriály	1	10
148 – 1. Technologie restaurování a konzervování 2. Restaurování a konzervování textilií 3. Restaurování a konzervování kovů (+106) 4. Restaurování a konzervování skla a keramiky (+107)	4	35 (12+9+8+6)
Informatika a chemie	1	7
Celkem	21	186 (z toho 5 FCHI)

Studenti z jiných fakult: 5

110 – Jiří Tůma, Filip Botha, Soňa Boháčová, Václav Čmolík, Lukáš
Vrzal (všichni FCHI, obor CHEMIE)

Sekce: Anorganická chemie

Vliv vodivosti a struktury silikátových skel na proces „ponořování“ optických vlnodů v elektrickém poli

Autor: Bc. Jakub Altšmíd
Ročník: M2
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: Ing. Pavla Nekvindová, Ph.D.

Iontová výměna typu $\text{Ag}^+ \leftrightarrow \text{Na}^+$ je velmi známou metodou přípravy planárních optických vlnodů. Lze ji urychlit vložením elektrického pole. Reverzibilní výměna $\text{Na}^+ \leftrightarrow \text{Ag}^+$ se používá pro tzv. „ponoření“ optických vlnodů, které je nutné pro nízkoztrátové napojení planární optické součástky - např. planární optické odbočnice na optické vlákno.

Práce je soustředěna především na studium souvislosti mezi vodivostí skla, strukturou skla a hloubkou ponoření planárního vlnodu. V optických sklechl různého složení jsem připravil v prvním kroku termickou iontovou výměnou planární optické vlnodody a v druhém kroku jsem tyto vlnodody „ponořoval“ pomocí reverzibilní IE v elektrickém poli. Vliv vodivosti byl studován na skupině skel s různým obsahem jednomocného modifikátoru. Vliv struktury skla byl studován na skupině skel s různým obsahem síťotvorných prvků, především B_2O_3 . Vlnododné vlastnosti byly vyhodnocovány tmavou vidovou spektroskopií (Prism Coupler-METRICOM) pro $\lambda = 632 \text{ nm}$, hloubka ponoření byla měřena na polarizačním mikroskopu a struktura skla charakterizována Ramanovou spektroskopií. Z výsledků je patrné, že v některých typech skel lze za daných podmínek ponořit planární vlnodody až $200 \mu\text{m}$ pod povrch vzorku, přičemž povrchová vrstva má prakticky stejné složení jako původní substrát.

Sekce : Anorganická chemie

Kompozitní materiál $\text{Ca}_3\text{Co}_{4-x}\text{O}_{9+\delta}^*$ n CaZrO_3

Autor: Ondřej Jankovský
Ročník: M2
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: prof. Dr. Ing. David Sedmidubský

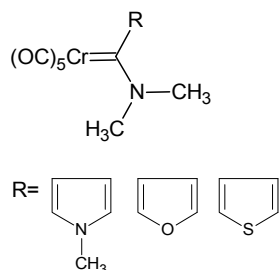
Materiál na bázi $\text{Ca}_3\text{Co}_{4-x}\text{O}_{9+\delta}$ patří do skupiny oxidových materiálů pro termoelektrickou konverzi. Na rozdíl od jiných termoelektrických materiálů (polokovové chalkogenidy, polokovové silicidy, intermetalika) lze tento materiál užít i při vysokých teplotách. Termoelektrické materiály jsou látky schopné přeměňovat tepelnou energii přímo na energii elektrickou. Tyto materiály fungují na základě Seebeckova jevu, jehož podstatou je vznik elektrického napětí v důsledku teplotního gradientu mezi dvěma konci vodiče. Systém $\text{Ca}_3\text{Co}_{4-x}\text{O}_{9+\delta}$ patří do skupiny kobaltitů. Tento kobaltit vzniká jako vrstevnatá struktura, ve které se střídají hexagonální bloky $[\text{CoO}_2]$ s bloky $[\text{Ca}_2\text{CoO}_3]$. Tyto bloky vykazují nesouměřitelnou (misfitovou) strukturu, což znamená, že alespoň jeden krystalografický parametr (v našem případě b) je pro každý blok odlišný a jejich poměr nelze vyjádřit celým číslem. V ideálním případě jde o $[\text{Ca}_2\text{CoO}_3][\text{CoO}_2]_{1,62}$, což odpovídá celkovému stechiometrickému složení $\text{Ca}_3\text{Co}_{3,93}\text{O}_{9,36}$. Cílem práce je vytvoření kompozitního (dvofázového) materiálu $\text{Ca}_3\text{Co}_{4-x}\text{O}_{9+\delta}^*$ n CaZrO_3 , u kterého by v důsledku rozptylu fononů na zrnech sekundární fáze (CaZrO_3) došlo k poklesu tepelné vodivosti a tím i ke zvýšení celkového koeficientu termoelektrické účinnosti.

Sekce : Anorganická chemie

Vliv heterocyklických substituentů na elektrochemické chování aminokarbenových komplexů chromu (0)

Autor: Radka Metelková
Ročník: M2
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: Ing. Irena Hoskovcová, CSc.

Karbenové komplexy Fischerova typu jsou látky s obecným vzorcem $[L_nM=CR^1R^2]$, které mají kladný parciální náboj na karbenovém uhlíkovém atomu a záporný parciální náboj na kovu. Tyto látky obsahují dvě elektroaktivní centra, oxidační a redukční. Oxidace je směřována na atom kovu, zatímco redukce probíhá na karbenovém uhlíku nebo jeho substituentech. Předchozí práce ukázaly, že ochota k oxidaci je u karbenových komplexů ovlivněna především charakterem kovu a ligandů L, naproti tomu redukční vlastnosti závisejí na substituentech karbenového uhlíku (R^1R^2).



Cílem práce bylo elektrochemicky prozkoumat redoxní vlastnosti aminokarbenových komplexů s heterocyklickými substituenty vázanými na karbenový uhlík (Obr.). K substituci byly využity pětičlené heterocyklické sloučeniny - furan, pyrrol a thiofen, které je možno na karbenový uhlík navázat přes druhý nebo třetí atom heterocyklu. Ukázalo se, že redukční vlastnosti závisí nejenom na zvoleném heterocyklu, ale také, a to ještě výrazněji, na poloze atomu, kterým je připojen.

Sekce: Anorganická chemie

Komplexy přechodných kovů s aminokarbenovými ligandy: korelace teoretického modelu s experimentálními výsledky

Autor: Hana Kvapilová
Ročník: M2
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: Ing. Irena Hoskovcová, CSc.

Práce je zaměřena na studium aminokarbenových komplexů přechodných kovů (Cr^0 , Fe^0 , W^0), jejichž význačnou vlastností je přítomnost dvou oddělených elektrochemicky aktivních center v molekule. Oxidační centrum se nachází na centrálním kovu, zatímco v oblasti karbenu je centrum redukční. Jak bylo ukázáno, modifikace fenylového substituentu na karbenovém uhlíku má vliv na hodnotu E_{red} , zatímco E_{ox} se nemění.

Účelem této práce je získat spolehlivý teoretický model, umožňující lépe pochopit vztahy mezi strukturou a vlastnostmi látek, a podložit nebo přímo podat vysvětlení jejich elektrochemického a spektrálního chování. Základním krokem pro takový úkol je korelace výsledků teoretických výpočtů s dostupnými experimentálními daty.

Pro výpočty je použit software Gaussian 09, zvolena byla metoda DFT (density functional theory) a hybridní funkcionál B3LYP s bází 6-31g*. Příspěvek rozpouštědla použitého v experimentu je simulován metodou PCM (polarized conductor model). Na optimalizovaných geometriích byla provedena analýza vibračních modů a složení hraničních molekulových orbitalů a korelace energie hraničních MO, elektronových afinit a ionizačních potenciálů s experimentálně zjištěnými redoxními potenciály. Dosud získané teoretické údaje jsou ve velmi dobré shodě s experimentem.

Sekce: Anorganická chemie

Tenké vrstvy ZnO připravené metodou spin-coating

Autor: Ladislav Nádherný
Ročník: M2
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: prof. Dr. Ing. David Sedmidubský

Oxid zinečnatý je velice perspektivní materiál pro aplikace ve spintronice. Na rozdíl od elektroniky, která je založená na uchování a přenosu elektrického náboje, spintronicke prvky využívají k uchovávání, přenosu a zpracování informace spinu elektronu, což vyžaduje o několik řádů nižší energii. Díky velké šířce zakázaného pásu (band gap) dojde při dopování magnetickými příměsemi k vytvoření silných krátkodosahových výměnných interakcí, které mohou vést k ustavení magneticky uspořádanému stavu nad pokojovou teplotou.

Ve své práci se věnuji přípravě tenkých vrstev ZnO metodou spin-coating. Optimalizace podmínek přípravy čistého ZnO je nezbytnou podmínkou pro přípravu magneticky dopovaných vrstev v další etapě výzkumu. Tento způsob depozice je závislý na kvalitě substrátu, syntéze vhodného prekursoru a parametrech nastavení depozičního zařízení – spin-coateru. Vytvoření tenké vrstvy se docílí horizontální centrifugací substrátu, na kterém se při vysokých otáčkách nanese prekursor rozprostře.

Mým úkolem bylo připravit vhodný prekursor (koncentrace Zn-soli, viskozita, dobrá rozložitelnost organické matrice) a najít co nejlepší podmínky pro metodu spin-coating, které by zajistily tenké vrstvy požadované kvality a tloušťky.

Sekce : Anorganická chemie

Charakterizace optických vlastností vlnovodů v nových Zn-Er, Yb silikátových sklech

Autor: Bc. Stanislav Staněk
Ročník: M2
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: Ing. Pavla Nekvindová, Ph.D.

Současný vývoj v oblasti fotoniky vede k postupnému nahrazování elektronických prvků fotonickými tak, aby bylo možné dosáhnout mnohem vyšších rychlostí při zpracování a přenosu signálu a také mnohem větší přenosové kapacity. Stále se zvyšující nároky uživatelů vedou k neustálému zlepšování používaných součástek a také k objevování nových materiálů k jejich výrobě.

V naší laboratoři se zabýváme přípravou optických vlnovodů ve sklech metodou iontové výměny. Pro tento účel byla vyvinuta speciální silikátová skla s obsahem zinku a prvků vzácných zemin - erbia a ytterbia. Samotné realizaci optické součástky vždy předchází modelování parametrů celého technologického procesu, které vychází ze zadaných vstupních charakteristik. Při návrhu dané součástky je nutné popsat jak substrátové sklo, tak i proces iontové výměny. Ve své práci jsem měřil základní charakteristiky substrátového skla a připravené optické vrstvy m-line technikou, pomocí přístroje METRICON Prism Coupler. především jsem se soustředil na stanovení hodnoty difúzních koeficientů pro proces iontové výměny $\text{Ag}^+ - \text{Na}^+$ ve sklech obsahujících Er a Yb.

Sekce : Anorganická technologie

Studie kinetiky rozpouštění dolomitu v kyselině dusičné

Autor: Bc. Jan David
Ročník: M2
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Ing. Ivona Sedlářová, Ph.D.

V práci byla provedena úvodní kinetická studie rozpouštění dolomitu v kyselině dusičné. Studovaný proces je důležitý krok v tzv. nitrátové technologii. Reakcí vzniká roztok obsahující dusičnan vápenatý a dusičnan hořečnatý, které slouží k přípravě dalších velmi rozšířených látek, např. PCC (srážený uhličitán vápenatý) nebo hydroxid hořečnatý. Zmíněné látky nacházejí uplatnění jako plniva pro polymerní materiály, dále jako ekologické retardéry hoření a v případě PCC také v papírenství. Hydroxid hořečnatý se rovněž získává z mořské vody. Aby byla nitrátová technologie schopná konkurence z hlediska výrobních nákladů, je potřeba optimalizovat podmínky rozkladu. Znalost kinetických dat je tedy pro návrh vhodného reaktoru a celé technologie zásadní. Pro zjištění těchto dat bylo sestaveno laboratorní zařízení, které se skládá z míchaného izotermního polovsádkového reaktoru a automatického titrátoru s pH elektrodou. Princip metody spočívá v měření časové závislosti použitého množství titrované kyseliny do předložené reakční vsázky, kde dochází k reakci pevné fáze s kapalinou tak, aby v celém jejím průběhu zůstalo v roztoku konstantní pH. Zjištěná data byla použita k vyhodnocení zdánlivých kinetických parametrů – řádu reakce a aktivační energie.

Sekce : Anorganická technologie

Vliv nosiče na vlastnosti katalyzátoru pro PEM elektrolýzu

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

Pro vodíkové hospodářství jako možné budoucí důležité průmyslové odvětví jsou strategické zdroje tohoto plynu. Jedním z možných zdrojů je výroba vodíku pomocí membránové kyselé elektrolýzy vody.

Hlavní část elektrolyzéru pro kyselou PEM elektrolýzu vody tvoří soubor dvou plynově difuzních elektrod s vloženou protonově vodivou membránou. Ta odděluje komory elektrolyzéru, kde se tvoří čistý vodík či kyslík.

Anoda se skládá z vlastní katalytické vrstvy obsahující oxidy iridia a plynově difuzní vrstvy. Z důvodu oxidačního prostředí je nutno pro difúzní vrstvu použít speciální materiál, např. tantalovou plst'. Její struktura ovšem klade důraz na zvýšení velikosti částic katalyzátoru kvůli jeho stupni využití, který se snižuje přítomností katalyzátoru v pórech plsti. Proto je vhodné dispergovat aktivní částice IrO_2 na vhodný nosič příhodných fyzikálně chemických vlastností. V této práci byla studována aktivita a vlastnosti čtyř katalyzátorů na bázi IrO_2 v závislosti na použitém nosiči. Byly studovány nosiče SiC , TiO_2 a TiO_x . Data o katalytické aktivitě byla porovnána s výsledky v laboratorním elektrolyzéru.

Sekce : Anorganická technologie

Srovnání metod stanovení iontové výměnné kapacity

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

Membránové technologie využívající iontově selektivní membrány jsou v dnešní době hojně využívané procesy v rozmanitých oborech. Iontově výměnná kapacita (IEC) je jednou ze základních veličin charakterizující kvalitu iontově selektivních membrán. Rozeznáváme dva typy této veličiny teoretickou a skutečnou. Hodnota teoretické IEC se rovná koncentraci funkčních skupin ionexu, ze kterého je membrána vyrobena. Tato hodnota vyplývá z chemické analýzy vstupního materiálu. Hodnota skutečné iontové výměnné kapacity odpovídá koncentraci dostupných funkčních skupin v membráně, což je dáno její strukturou. Znalost skutečné IEC je velmi důležitá, i když sama o sobě nedostačující, pro volbu vhodné membrány pro daný proces. Vysoké hodnotě výměnné kapacity zpravidla odpovídá vysoká propustnost a nízký ohmický odpor dané membrány. Iontově výměnná kapacita membrán, nejčastěji stanovovaná titrační metodou a je to jedna z nejdostupnějších charakteristik. Její měření však může být zatíženo značnou chybou, což vede k získání nesprávného výsledku. Proto bylo cílem mé práce porovnat různé metody stanovení a zhodnotit jejich instrumentaci a přesnost výsledků. Mezi sebou jsem porovnával titrační metodu, potenciometrickou metodu a metodu měření IEC pomocí UV/VIS spektrometrie.

Sekce : Anorganická technologie

Porovnání typů ionexového lože při elektrodeionizaci

Autor: Bc. Jakub Mališ
Ročník: M2
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Ing. Martin Paidar, Ph.D.

Při úpravě vody v energetických a chemických zařízeních se používají ionexové technologie, které však produkují odpadní roztoky z regenerace. Jako alternativní řešení se jeví použití membránových technologií, kdy jako „odpad“ vzniká zakoncentrovaný roztok vstupujících solí. Pro produkci demineralizované vody se uplatňuje technologie elektrodeionizace, kde jsou mezi membránami v diluátových komorách ionexová lože. Jednou z výhod elektrodeionizace je možnost kontinuálního provozu díky průběžné regeneraci ionexu. Byla testována kuličková, mikrovláknenná, nanovláknenná lože a lože tvořená jejich kombinacemi. Dané uspořádání bylo posuzováno z hlediska stupně odsolení, hydrodynamického odporu a časové stability. U nanovláknenného ionexu byla měřena jeho iontovýměnná kapacita, kinetika iontové výměny a hydrodynamický odpor. Detailní znalost vlastností jednotlivých loží umožňuje posoudit vhodnost jednotlivých uspořádání pro elektrodeionizaci v praxi.

Sekce : Anorganická technologie

Vlastnosti Nafionu za zvýšeného tlaku a teploty

Autor: Bc. Jakub Mališ
Ročník: M2
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Ing. Martin Paidar, Ph.D.

Membrány typu Nafion jsou používány v řadě průmyslových aplikacích jako jsou elektrolýza solanky, elektrolýza vody, elektrochemické kompresory a palivové články. Jedná se o sulfonovaný perfluorovaný polymer, který vykazuje vysokou chemickou a mechanickou odolnost.

Díky těmto vlastnostem se uvažuje o využití Nafionu jako potenciálního polymerního elektrolytu v PEM elektrolýzách, při provozních teplotách nad 100°C. Při těchto teplotách dochází v membráně k objemovým změnám, které způsobují zhoršení její vodivosti.

Nafion byl testován při teplotách až 150°C a tlacích do 700 kPa v prostředí kapalné vody. Vyšších provozních tlaků se využívá pro zajištění dostatečného homogenního zvlhčení membrány. Měření byla prováděna v demineralizované vodě, protože přechodem do jiné iontové formy než H^+ dochází rovněž k poklesu vodivosti. Součástí práce bylo zjištění vlivu poklesu vodivosti vlivem přechodu do jiné iontové formy.

Detailní znalost chování Nafionu za daných podmínek umožňuje posouzení vhodnosti jeho použití v PEM reaktorech, protože membrána je jednou z klíčových součástí těchto aparátů.

Sekce : Anorganická technologie

Příprava Pt katalyzátoru pro palivový článek typu PEM

Autor: Bc. Radek Misař
Ročník: M1
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: prof. Dr. Ing. Karel Bouzek

Katalyzátor je důležitou součástí palivového článku typu PEM. Jeho úlohou je umožnit průběh elektrodových reakcí dostatečnou rychlostí. Katalyzátory pro tento typ palivového článku jsou dosud založeny výhradně na platině, která vykazuje nejen dostatečnou katalytickou aktivitu při jeho provozních teplotách, ale zároveň i vysokou korozní odolnost. Částice Pt katalyzátoru jsou deponovány na uhlíkovém nosiči ve formě nanočástic. Významným požadavkem kladeným na tyto materiály je, vedle korozní stability a katalytické aktivity, vznik tzv. trojfázového kontaktu. Jedná se o místo na povrchu katalyzátoru, které je spojeno vodivě se sběračem proudu, iontově s polymerním elektrolytem a je přístupné plynným reaktantům. Cílem této práce bylo připravit katalyzátory splňující na co největší části povrchu Pt částic tuto podmínku.

Při přípravě katalyzátorů byla použita chemická depozice. Tato metoda spočívá ve vyloučení Pt částic na uhlíkovém nosiči redukcí Pt prekurzoru vhodným činidlem v přítomnosti stabilizátoru omezujícího shlukování vznikajících částic. Studován byl vliv dvou stabilizátorů, a to polyvinylpyrrolidonu a Nafionu®. Tenký film Nafionu® vyloučený na povrchu částic katalyzátoru zvyšuje pravděpodobnost vzniku míst s trojfázovým kontaktem a zvyšuje tak stupeň využití katalyzátoru. Problém dosud představuje velikost Pt částic vzniklých v průběhu syntézy.

Sekce : Anorganická technologie

Filtrace tuhých částic v procesu sanace podzemních roztoků po těžbě uranu

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

DIAMO je státní podnik, který se v minulosti zabýval chemickou těžbou uranu. V letech 1967 až 1996 bylo v lokalitě Stráž pod Ralskem vytěženo celkem 15 562 tun uranu tzv. kyselým loužením. V současné době probíhá likvidace a rekultivace vyluhovacích polí a rozsáhlá sanace zasaženého horninového prostředí. Sanace je řešena řízeným čerpáním a čištěním zbytkových technologických roztoků dvoustupňovou neutralizací kyselých roztoků hydroxidem vápenatým.

Po prvním stupni neutralizace je suspenze přiváděna do kalolisů, kde se oddělí vzniklý sádrovec. V této fázi procesu se plachetky velmi rychle zanášejí, narůstá tlaková ztráta filtrace a dochází k narušování celistvosti plachetek.

Cílem této práce je nalezení nejvhodnějšího regeneračního činidla k čištění plachetek kalolisů, aby se zvýšila jejich životnost. Bylo sestrojeno laboratorní filtrační zařízení, vypracován jednoduchý filtrační test a jako regenerační činidlo byla použita kyselina chlorovodíková (36%, 30%, 25%, 20%, 17%, 15%, 13%, 10%), hydroxid sodný (10%), kyselina dusičná (10%), kyselina sírová (80%, 50%), kyselina fluorovodíková (10%), chelaton II, chelaton III, kyselina trihydrogenfosforečná (85%) a kyselina šťavelová.

Sekce : Anorganická technologie

Hydraulická charakterizace turbulizačních sítěk užívaných v elektrodialyzátorech

Autor: Bc. Michal Němeček
Ročník: M2
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: doc. Ing. Vladimír Mejta, CSc.

Distributory a turbulizátory jsou základní součástí průmyslových elektrodialyzačních zařízení. Mají zajistit rovnoměrný tok kapalin mezimembránovým prostorem elektrodialyzačních cel a současně vymezují vzdálenost membrán. Cílem jejich vhodného výběru je maximalizace doby zdržení při zachování objemového průtoku a minimalizace lokálních odchylek v rychlostech toku, které mají za následek vznik tzv. hydraulických stínů, tedy lokalit se sníženou koncentrací. V těchto místech dochází k nárůstu elektrolytického odporu což způsobuje zvýšení lokálního proudového zatížení, zvýšení teploty a v důsledku toho i degradaci membrán. V průmyslovém řešení je navíc důležité zohlednit i hydraulický odpor mezimembránové výplně, který se projeví v nákladech na provoz zařízení.

Jako turbulizátory jsou v průmyslové praxi užívány především nevodivé síťoviny. Vhodný výběr síťovin je založen na posouzení míry homogenizace toku a hydraulického odporu. V rámci této práce byly změřeny geometrické parametry a vypočteny hydraulické odpory na základě experimentálních měření sady průmyslově vyráběných turbulizačních síťovin. Na základě těchto výsledků lze doporučit vhodné turbulizační síťoviny do průmyslových elektrodialyzačních zařízení a v neposlední řadě dodat nezbytné parametry pro matematické modely.

Sekce : Anorganická technologie

Vodivost heterogenních membrán v podélném a příčném směru

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

Membránové procesy jsou perspektivní separační metodou, která může najít uplatnění v mnoha odvětvích. Mezi jejich hlavní výhody patří nízká energetická náročnost procesů a možnost selektivní separace iontů. Lze jich využít při odsolování mořské vody, sanaci odpadních vod nebo pro konstrukci vodíkových palivových článků.

V praxi se uplatňují dva hlavní typy, membrány heterogenní a homogenní. Velkou výhodou heterogenních membrán oproti homogenním je cenová dostupnost. Heterogenní membrány jsou tvořeny ionexem a polymerní maticí. Kombinace těchto složek do značné míry ovlivňuje mechanické a separační vlastnosti membrány. Jednou z hlavních charakteristik membrány je vodivost.

Vodivost membrány se určuje z elektrického odporu, který se měří v čtyřelektrodovém nebo dvuelektrodovém zapojení. Při měření v podélném směru může být odpor zkreslen skinovou vrstvou, která má větší odpor než samotná membrána. Při měření v příčném směru odpor zahrnuje skinové vrstvy i membrávu, eliminuje se tudíž možnost, že bude změřen pouze odpor skinové vrstvy, případně nebude postihnout.

Cílem práce je porovnat dané metody a určit výhody a nevýhody obou způsobů zapojení.

Sekce : Anorganická technologie

Separace rhodia z chloridových roztoků

Autor: Bc. Jiří Šafránek
Ročník: M2
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Ing. Ivona Sedlářová, Ph.D.

Cílem této práce bylo vyvinout a ověřit metodu efektivní separace rhodia od platiny, palladia a iridia z kyselých chloridových roztoků v jednom separačním kroku. Dosud používaná separační operace se musí vícekrát opakovat, aby se dosáhlo požadovaného stupně čistoty. K vlastní separaci bylo použito selektivní činidlo diethylenetriamín (DETA). K připravenému chloridovému roztoku obsahujícímu platinové kovy byl přidáván rovnoměrně peroxid vodíku pro zvýšení oxidačních stupňů jednotlivých iontů kovů (především Ir^{3+} na Ir^{4+}). Po provedené oxidaci byl za tepla přidáván roztok DETA v šesti molární kyselině chlorovodíkové. Po přidávku veškerého roztoku DETA se směs nechala vychladnout na teplotu okolí za rovnoměrného přidávku peroxidu vodíku. Vysrážená Rh-DETA sůl byla zfiltrována, promyta, přečištěna a nakonec bylo vyredukováno čisté rhodium. Rhodium bylo získáno v metalickém stavu. V odpadním roztoku bylo oproti dosavadní metodě obsaženo rhodium jen v malém množství.

Sekce : Anorganická technologie

Charakterizace vysokoteplotního palivového článku metodou impedanční spektroskopie

Autor: Bc. Jiří Sůč
Ročník: M2
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Ing. Martin Paidar, Ph.D.

Elektrochemická impedanční spektroskopie (EIS) patří mezi nejpoužívanější nástroje pro určování vlastností elektrochemických systémů a k charakterizaci v nich probíhajících dějů. Vedle cyklické voltametrie (CV) tak EIS poskytuje cenné informace o chování elektrochemického systému.

Byla měřena impedanční spektra vysokoteplotního palivového článku (HT PEMFC) při několika různých proudových zatíženích. Z naměřených spekter byl navržen náhradní elektrický obvod měřeného článku a matematickým zpracováním byly určeny parametry tohoto obvodu, jmenovitě kapacity a polarizační odpory. Dále je diskutován tvar impedančních spekter v závislosti na velikosti kapacity a polarizačního odporu elektrod. Další rozbor impedančních spekter, s přispěním doplňkové metody - cyklické voltametrie, poskytl informace o příspěvku jednotlivých částí článku (anoda, katoda, el.vodič) k celkovým polarizačním ztrátám.

U daného systému je zjištěná kapacita anody 50 mF a téměř se nemění vlivem zatížení, kapacita katody je výrazně vyšší, 180 mF v nezatíženém stavu, a postupně roste až na 300 mF v oblasti koncentrační polarizace. Vyšší je také polarizační odpor katody, a to do té míry, že převážná část polarizačních ztrát vzniká právě na katodě.

Sekce : Kovové materiály I

Mechanické vlastnosti biodegradovatelných slitin hořčíku a zinku

Autor: Bláhová Markéta
Ročník: B2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Dalibor Vojtěch

Hořčíkové i zinkové slitiny jsou perspektivními materiály pro výrobu biodegradovatelných implantátů – např. fixací zlomených kostí. Oba kovy jsou netoxické a naopak jsou velmi důležité pro celou řadu biochemických reakcí v lidském organismu. Využití těchto slitin je spojováno se značnými nároky na jejich korozní a mechanické vlastnosti. Mechanické vlastnosti jsou obvykle lepší v porovnání s polymerními materiály, nicméně jsou zde stále požadavky na jejich zvyšování. Z tohoto hlediska je nutné hledat vhodné slitiny, které by v současnosti známé materiály předčily. V této práci byly hodnoceny mechanické vlastnosti hořčíkových a zinkových slitin potenciálně využitelných v medicíně jako implantáty. Jako zajímavý materiál se ukázala slitina Zn-Mg, která i v litém stavu dosahovala srovnatelných mechanických vlastností s tvářenými materiály.

Sekce : Kovové materiály I

Ochranné vrstvy aluminidů niklu a železa na oceli

Autor: Bc. Milena Voděrová
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Pavel Novák, Ph.D.

Intermetalické fáze NiAl a FeAl mají atraktivní vlastnosti jako např. výbornou odolnost proti vysokoteplotní oxidaci a relativně vysokou tvrdost. Díky uvedeným vlastnostem je lze považovat za perspektivní materiály jak pro využití v podobě kompaktního materiálu, tak pro vytvoření povrchové vrstvy na tepelně namáhaných součástkách. Cílem této práce bylo vytvořit na nízkolegované oceli galvanicky a bezproudově niklovou vrstvu a tu následně reakcí s hliníkem převést na vrstvu aluminidů niklu, případně niklu a železa. Toho bylo dosahováno ponorem poniklované oceli do taveniny hliníku o teplotě 700 a 900 °C na dobu 30 – 240 s. Světelným mikroskopem byly porovnány rozdíly ve struktuře připravených vrstev. Identifikace přítomných fází byla provedena pomocí analyzátoru EDS. Následně byla změřena mikrotvrdost fází tvořících vrstvu a tloušťka vzniklé vrstvy.

Sekce : Kovové materiály I

Uchovávání vodíku elektrochemickou metodou

Autor: Jaroslav Gubiš
Ročník: B3
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Vítězslav Knotek

Jedním z klíčových problémů pro využití vodíku jako zdroje energie je jeho skladování. Jako velmi perspektivní se jeví uchovávání vodíku v hydridech hořčíkových slitin. Namísto často používané metody sycení slitin vodíkem z plynu byla v této práci testována elektrochemická metoda, která se zdá být efektivnější za nízkých teplot.

Cílem této práce bylo zjistit vliv teploty sycení a vliv struktury binárních a ternárních slitin systému Mg-Ni-Mm na schopnost absorpce vodíku elektrochemickým sycením. Sycení slitin bylo prováděno při teplotách 25 °C a 80 °C. Obsah vodíku byl zjištěn pomocí spektrometru s doutnavým výbojem (GDS).

Sekce : Kovové materiály I

Korozní chování biodegradovatelných slitin hořčíku a zinku v modelové tělní tekutině

Autor: Hofmanová Daniela
Ročník: B2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Dalibor Vojtěch

Hořčík, zinek a jejich slitiny jsou perspektivními materiály pro uplatnění v medicíně na tzv. biodegradovatelné implantáty. Takové materiály se v těle pacienta po určité době sami rozpustí, přičemž by vůči organismu neměly být toxické. Při vývoji těchto slitin jsou požadavky kladeny především na mechanické a korozní vlastnosti. Tato práce se zabývala sledováním korozního chování hořčíkových a zinkových slitin v prostředí modelové tělní tekutiny. Hodnocena byla korozní rychlost exponovaných materiálů a její ovlivnění volbou pH roztoku. Nižší korozní rychlosti a menší zastoupení nerovnoměrné koroze bylo pozorováno v případě Zn slitin.

Sekce : Kovové materiály I

Vliv legujících prvků na vlastnosti slitin Fe-Al-Si

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

Slitiny Fe-Al-Si se vyznačují dobrými mechanickými vlastnostmi a vynikající odolností proti oxidaci za vysokých teplot. Proto jsou považovány za vhodné materiály pro vysokoteplotní aplikace. Přítomnost dalšího legujícího prvku může mít vliv na pórovitost nebo mechanické vlastnosti. Během experimentu byly metodou reaktivní sintrace kovových prášků připraveny slitiny na bázi Fe-Al-Si s přísadkou Co, Cr a Cu. Byl studován vliv legujících prvků na tvrdost, pórovitost, otěruvzdornost a odolnost proti vysokoteplotní oxidaci.

Sekce : Kovové materiály I

Vliv chemického zpracování na povrchové vlastnosti slitin NiTi

Autor: Bc. Jan Kaňok
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Dalibor Vojtěch

Nitinol – přibližně ekvatomární slitina Ni a Ti – bývá zařazován do skupiny „inteligentních funkčních materiálů“, neboť kromě dobré korozní odolnosti vykazuje navíc i zajímavé mechanické vlastnosti – tvarovou paměť, superelasticitu a pseudoplasticitu. Své uplatnění nacházejí slitiny NiTi v řadě aplikací, především pak v medicíně - výroba částí chirurgických nástrojů, filtrů krevních sraženin, ortodontických rovnátek a, touto prací studovaných, stentů. Z materiálového a funkčního hlediska tedy představuje nitinol zajímavou alternativu k doposud tradičně používaným materiálům. Z pohledu biokompatibility by se však jako negativní mohla jevit přítomnost niklu, který je obecně považován za alergen a karcinogenní látku. Velká pozornost je proto věnována stavu povrchu nitinolových částí, zejména pak parametrům oxidické vrstvy TiO_2 , která by případnému vylučování Ni do biologické tkáně či koroznímu napadení účinně bránila, a povrchovým nerovnostem z procesu výroby, které by naopak zhoršovaly únavové vlastnosti zhotovených stentů. Cílem této práce bylo zhodnotit vliv chemického leštění na povrchové vlastnosti nitinolových drátků. Pro tento účel byla připravena řada kombinací směsí kyselin (HF , HNO_3 , H_2SO_4). Sledován byl vliv parametrů leštění (roztok, čas, míchání) na rozměrové změny zpracovávaných drátků a na morfologii jejich povrchu.

Sekce : Kovové materiály I

Vliv křemíku na vznik intermetalických fází v systémech Ni-Al a Co-Al

Autor: Bc. Ivo Marek
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Pavel Novák, Ph.D.

Cílem této práce byl popis vlivu křemíku na mechanismus a kinetiku vzniku intermediálních fází při reaktivní sintraci slitin Ni-Al a Co-Al. Vzhledem k tomu, že popis kinetiky interakce kovových prášků přímo při reaktivní sintraci je obtížný, byl zvolen experimentální model tvořený kompaktním kovovým vzorkem (Ni, Co) ponořeným do roztaveného hliníku a jeho slitin s různým obsahem křemíku. Na základě těchto výsledků bylo možné odhadnout, jaké reakce budou probíhat při reaktivní sintraci a experimentálně popsat jejich kinetiku. Bylo zjištěno, že nárůst vrstev intermetalických fází probíhá rychleji v taveninách s obsahem křemíku. V další fázi práce byly z prášků Ni, Si, Al, AlSi30 a Co, Si, Al, AlSi30 připraveny předlisky, které byly podrobeny reaktivní sintraci za podmínek stanovených pomocí experimentálního modelu. Produktem byly kompaktní slitiny. Obsah křemíku ve slitině měl v obou systémech významný vliv na porozitu produktu reaktivní sintrace. V případě systému Co-Al přídavek křemíku pórovitost snižuje, zatímco u systému Ni-Al je vliv opačný.

Sekce : Kovové materiály I

Vysokoteplotní chování slitin Ti-Al-Si vyrobených reaktivní sintrací

Autor: Bc. Michal Martínek
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Pavel Novák, Ph.D.

Slitiny Ti-Al jsou perspektivní materiály pro vysokoteplotní aplikace. Díky svým vlastnostem, jako jsou oxidační a korozní odolnost, vysokoteplotní chemické a mechanické stabilitě a v neposlední řadě nízké hustotě, mohou v některých aplikacích nahradit konvenční slitiny železa či niklu. Běžnými postupy tavné i práškové metalurgie je však obtížné a nákladné tyto materiály připravit. Jako vhodná metoda se jeví prášková metalurgie využívající reaktivní sintraci. Předchozí výzkum ukázal, že legování křemíkem zlepšuje některé vlastnosti těchto slitin. V této práci bylo zkoumáno vysokoteplotní chování slitin Ti-Al-Si vyrobených reaktivní sintrací. Bylo testováno, jak přídavek křemíku ovlivňuje oxidační odolnost a stabilitu mechanických vlastností. Vzorky byly cyklicky a izotermicky oxidovány na vzduchu při teplotě 800 °C po dobu 400 hodin. Byla popsána kinetika oxidace.

Sekce : Kovové materiály I

Recyklace odpadních produktů z chemického niklování

Autor: Šárka Neumannová
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Petr Dvořák, Ph.D.

Práce se zabývala problematikou recyklace Ni z odpadních produktů po bezproudovém niklování. Základem byla lázeň po chemickém niklování, ve své podobě dále nevyužitelná. Na základě zpracované literární rešerše bylo pro získání Ni z lázně vyzkoušeno několik metod zahrnujících srážení pomocí různých činidel, kapalinovou extrakci a elektrolytické vylučování Ni. Cílem bylo získat Ni v kovové podobě nebo ve formě dále využitelné sloučeniny Ni.

Sekce : Kovové materiály I

Elektrolytické získávání Zn z různě znečištěných modelových elektrolytů

Autor: Miroslav Šíma
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Petr Dvořák, Ph.D.

Cílem práce bylo studium elektrolytického vylučování Zn z modelových elektrolytů znečištěných různými nečistotami. Byly připraveny roztoky ZnSO_4 s příměsí Mn^{2+} , Ni^{2+} , Cd^{2+} a Cl^- v různých kombinacích a byl sledován vliv nečistot na katodový proudový výtěžek a kvalitu vyloučeného Zn. Výsledky poslouží jako podklad pro vylučování Zn z reálných elektrolytů připravených z konečných produktů recyklace Zn-MnO₂ baterií.

Sekce : Kovové materiály I

Boridování slitin Fe-Al-Si

Autor: Hana Vacková
Ročník: B3
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Pavel Novák, Ph.D.

Boridování je jednou z dostupných technologií chemicko-tepelného zpracování oceli. V této práci byla testována možnost použití této technologie u slitiny FeAl₂₀Si₂₀ tvořené intermetalickými fázemi. Experimentální materiál byl připraven dvěma postupy. V prvním případě byla slitina FeAl₂₀Si₂₀ připravena lisováním a reaktivní sintrací při 950 °C, z prášků železa, křemíku a slitiny AlSi₃₀. Ta byla následně podrobena boridování v komerčním prášku DURBORD G po dobu 60-180 min. V druhém postupu byla slisovaná směs prášků reaktivně sintrována přímo v boridovacím prášku po dobu 60-120 min. Byly tedy sloučeny kroky reaktivní sintrace a boridování. U připravených vzorků byla hodnocena struktura povrchové vrstvy, tvrdost, odolnost proti abrazivnímu opotřebení a oxidace při 800 °C. Bylo zjištěno, že vzorek připravený prvním postupem umožňuje dosažení kompaktnějších povrchových vrstev a vyšší odolnosti proti opotřebení. Naopak druhá technologie nabízí vyšší odolnost proti vysokoteplotní oxidaci.

Sekce : Kovové materiály II

Charakterizace slitiny AlZn10Si8Mg

Autor: Tomáš Frýdl
Ročník: B1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jan Šerák, Ph.D.

Slitina AlZn10Si8Mg nachází stále větší uplatnění pro různé průmyslové účely díky své relativně dobré korozní odolnosti, tvrdosti, dobré plasticitě a leštitelnosti. Stále větší oblibu nachází v rámci technologie lití pod tlakem. V této práci byla studována mikrostruktura slitin ztuhlých při různých rychlostech ochlazování, vlastnosti této slitiny v tahu a tvrdost. Slitina byla dále tepelně zpracována a mechanické vlastnosti tepelně zpracované slitiny byly porovnány s vlastnostmi slitiny v litém stavu.

Sekce : Kovové materiály II

Koroze a ochrana zinkované oceli v prostředí betonu

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

Vzorky zinku, zinkované oceli a zinku opatřeném konverzními povlaky byly exponovány v modelových roztocích čerstvého betonu při pH 12,6, 13,0 a 13,5 s cílem objasnit vliv pH a vápenatých iontů na korozní chování a ochrannou funkci moderních konverzních povlaků před vylučováním plynného vodíku, které doprovází korozi jinak nechráněného zinku v prostředí betonu, což může negativně ovlivnit pórovitost cementového tmelu. Korozní chování bylo hodnoceno na základě měření samovolného korozního potenciálu a polarizačního odporu po dobu 6 dní a profilové prvkové analýzy zbývajících zinkového povlaku. V modelových pórových roztocích betonu vycházejících z nasyceného roztoku hydroxidu vápenatého je korozní odolnost výrazně snížena v porovnání s roztoky o téměř pH, ale bez obsahu vápenatých iontů. Čistý zinek koroduje i při nejnižší úrovni pH (12,6) v nasyceném $\text{Ca}(\text{OH})_2$ po celou dobu expozice v aktivním stavu za vývoje plynného vodíku. Na rozdíl od čistého zinku se zinkovaná ocel v průběhu expozice zapasivuje, ale až poté, kdy se zcela rozpustí povrchová vrstva čistého zinku. Při pH, které je realitě bližší (13; 13,5), koroduje zinkový povlak bez omezení. Ze zkoušených k životnímu prostředí šetrných konverzních povlaků se jako jediný účinný ukázal povlak na bázi Zr(IV) utěsněný organosilanem, který i při pH 13,5 vytváří odolnou bariéru.

Sekce : Kovové materiály II

Studium vlivu expozičních podmínek na morfologii tvorby nanotrubelek

Autor: Bc. Pavel Hryzák
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Ing. Luděk Joska, CSc.

Práce byla zaměřena na elektrochemickou oxidaci titanu - materiálu široce užívaného v humánní medicíně. Jedním z potenciálně nadějných postupů, který by umožnil zlepšit biokompatibilitu tohoto materiálu, je nanostrukturování povrchu. Cílem úpravy je v tomto případě vytvoření trubkovité nanostruktury metodou anodické oxidace při konstantním potenciálu. Každý z parametrů elektrochemické oxidace - potenciál, doba expozice, složení elektrolytu - ovlivňuje rozměry vznikajících trubiček.

Pro přípravu nanostruktur byl použit potenciostat Jaisle Potenciostat-Galvanostat IMP 88 PC-200V napojený na řídicí počítač. Potenciostat byl ovládán prostřednictvím operačního programu EcmWin. Vzorky byly anodicky polarizovány zvolenou rychlostí na zadaný potenciál, po jeho dosažení následovala potenciostatická expozice. Vytvořené struktury byly hodnoceny na elektronovém mikroskopu.

Dosavadní měření prokázala významný vliv předúpravy povrchu, složení elektrolytu i expozičních podmínek na vytvořenou nanostrukturu.

Sekce : Kovové materiály II

Příprava nanokrystalické práškové mědi

Autor: Daniel Jaksch
Ročník: B1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jan Šerák, Ph.D.

Nanokrystalické materiály v současné době nacházejí stále větší využití v mnoha oblastech technického a průmyslového využití. Tato práce byla zaměřena na přípravu a charakterizaci nanokrystalické práškové mědi připravené rozpouštěcí metodou. Binární slitiny AlCu s různými obsahy mědi byly rozpouštěny v roztoku KOH. Pomocí elektronového mikroskopu byla studována mikrostruktura výchozích slitin i připravených prášků kovové mědi, dále byla stanovena čistota připravených prášků.

Sekce : Kovové materiály II

Vliv materiálu a stavu povrchu na úhel smáčení

Autor: Štěpán Kadlec
Ročník: B1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Ing. Luděk Joska, CSc.

Povrchové vlastnosti materiálů kovových materiálů užívaných v humánní medicíně mají zásadní vliv na biologickou odezvu organismu - buněčnou kolonizaci implantátu a jeho následnou integraci s kostí. Významná je z tohoto hlediska jak smáčivost, tak energie povrchů. Práce byla zaměřena na určení výše uvedených vlastností pro materiály pokryté DLC vrstvami.

Povrchové vlastnosti byly určovány na vzorcích titanu a jeho slitin pokrytých DLC vrstvami. Povrchová energie a smáčivost povrchu byly určovány pomocí systému Surface Energy Evaluation System (Advex Instruments). Metoda je založena na sledování kapky na povrchu materiálu pomocí CCD kamery. Zaznamenané obrázky jsou vyhodnoceny uživatelem, což je nezbytné pro přesné určení kontaktního úhlu. Povrchová energie byla určena pomocí Kwok-Neumanova modelu. Všechna měření byla realizována za laboratorní teploty a desetkrát opakována. Smáčivost byla měřena s destilovanou vodou. Určení povrchové energie proběhlo metodou tří kapalin - použity byly voda, etylenglykol a glycerin.

Jak smáčivosti, tak povrchové energie se u vzorků pokrytých DLC vrstvami zásadním způsobem nelišily. Studované povlakované systémy byly hydrofilní, vyznačovaly se však poměrně vysokou povrchovou energií.

Sekce : Kovové materiály II

Vliv legujících prvků na strukturu a vlastnosti slitin Ti-Al-Si vyrobených reaktivní sintrací

Autor: Martin Klůčka
Ročník: B1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Pavel Novák, Ph.D.

Cílem práce bylo popsat vliv legujících prvků (niklu, kobaltu a chromu) na strukturu a vlastnosti slitin Ti-Al-Si. Slitiny byly připraveny technologií práškové metalurgie s využitím reaktivní sintrace. K výrobě byly použity prášky titanu, niklu, kobaltu, chromu, křemíku a slitiny AISi30. Směsi prášků byly lisovány za studena, a následně zahřátím na teplotu 950 °C proběhla reaktivní sintrace za vzniku intermediálních fází.

Byl zkoumán vliv uvedených legur na mikrostrukturu, pórovitost a tvrdost materiálu. Testy prokázaly mimořádnou tvrdost všech slitin při minimální hustotě. Přídavek dalšího kovu zvyšují tvrdost původní slitiny TiAl15Si15, přičemž nejvyšší je vliv niklu a chromu. Nikl rovněž významně snižuje pórovitost.

Sekce : Kovové materiály II

Příprava a vlastnosti slitin Fe-Al-Si-Ni

Autor: Lucie Mejzlíková
Ročník: B3
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Pavel Novák, Ph.D.

Slitiny Fe-Al a Fe-Al-Si jsou perspektivní materiály pro vysokoteplotní aplikace. Cílem této práce bylo popsat vliv niklu na proces přípravy slitin Fe-Al-Si a na jejich strukturu a vlastnosti. Pro přípravu těchto materiálů byla použita metoda práškové metalurgie s využitím reaktivní sintrace. Byla popsána mikrostruktura a fázové složení připravených materiálů v závislosti na obsahu niklu. Rovněž byla naměřena jejich tvrdost, odolnost proti abrazivnímu opotřebení a oxidační odolnost na vzduchu při 800 °C. Bylo zjištěno, že přidavek niklu vede ke snížení pórovitosti a ke zvýšení odolnosti proti opotřebení i oxidační odolnosti.

Sekce : Kovové materiály II

Korozní vlastnosti slitiny Nitinol povlakované ALD vrstvami

Autor: Bc. Hynek Moravec
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Ing. Luděk Joska, CSc.

Práce je zaměřena na určení náchylnosti vzorků slitiny Nitinol povlakované technologií ALD (atomic layer deposition) vrstvami oxidu hlinitého a oxidu titaničitého k nerovnoměrné korozi. Měření probíhala dle normy ASTM 2129-08. Vzorky ve formě tenkých plechů byly před měřením odmaštěny izopropylalkoholem a osušeny acetonem. Expozičním prostředím byl Hankův roztok (dle požadavku normy) teploty 37 °C. Měření je založeno na snímání obousměrných potenciodynamických křivek v rozmezí E_{kor} až 0,8 V/NKE (popř. do hraniční proudové hustoty) při rychlosti změny potenciálu 1 mV/s.

Ve většině případů se u vzorků náchylnost k nerovnoměrné korozi neprojevila. U dvou vzorků k výraznému nárůstu proudu, signalizujícímu lokální napadení, došlo. Důvodem byla pravděpodobně nehomogenita vrstev. Povlakování slitiny nikl-titan, která má řadu vlastností zajímavých z hlediska humánní medicíny, má za cíl eliminovat vliv niklu. Dosavadní měření prokázala, že technologie ALD by mohlo být perspektivní.

Sekce : Kovové materiály II

Biodegradabilní slitiny na bázi hořčíku

Autor: Bc. Ladislav Sita
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jan Šerák, Ph.D.

Biodegradabilní hořčíkové slitiny nacházejí v poslední době své uplatnění díky jedinečným vlastnostem, které ostatní typy slitin nemohou nabídnout. Začaly se používat v medicíně jako zpevňující prvky pro kosti – destičky, šrouby či hřeby, chirurgický šicí materiál a jako části protéz. Mezi unikátní vlastnosti těchto slitin patří biodegradabilita (rozložitelnost v těle) či mechanické vlastnosti blízké kosti, jako Youngův modul pružnosti a tažnost. Byl vypracován přehled legur vhodných pro použití v implantátech, dále přehled používaných slitin a jejich vlastností. Velká pozornost byla také věnována povlakům slitin. V experimentální části byly na základě literární rešerše v indukční peci připraveny nejpoužívanější typy těchto slitin, AZ91, AZ31 a MgCa1. Byla zkoumána jejich mikrostruktura a provedena XRD a XRF analýza.

Sekce : Kovové materiály II

Vliv parametrů tepelného zpracování na strukturu, mechanické vlastnosti a deformace ocelových součástí

Autor: David Šotka
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Dalibor Vojtěch

Rozměrové a tvarové změny součástí způsobené tepelným zpracováním způsobují velké finanční nároky na korekci vzniklých deformací. Tyto změny jsou závislé na materiálu, konstrukčním řešení součásti a nakonec i na samotném tepelném zpracování a jeho parametrech. Mezi materiálové faktory ovlivňující deformace patří homogenita (segregace, textura, velikost zrna), stav po žíhání a prokalitelnost. Deformace způsobené tepelným zpracováním vznikají především v důsledku teplotních gradientů uvnitř součásti, které jsou vytvářeny v průběhu ohřevu a ochlazování. Pokud jsou teplotní gradienty doprovázeny fázovými změnami, tak dochází k dalšímu výraznému pnutí a deformacím. Vakuové tepelné zpracování slibuje menší deformace součástí a jejich malý rozptyl.

Cílem práce je zhodnotit vliv postupu tepelného zpracování na výslednou strukturu, tvrdost a deformace ocelových součástí používaných v automobilovém průmyslu.

Sekce : Kovové materiály II

Struktura a vlastnosti slitiny AlCu5Ni1,5MnTi

Autor: Milan Valalík
Ročník: B2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jan Šerák, Ph.D.

Slitina AlCu5Ni1,5MnTi nachází stále větší uplatnění v automobilovém průmyslu pro svoje dobré pevnostní charakteristiky, odolnost při vyšších teplotách a nízkou teplotní roztažnost. V této práci byla studována mikrostruktura slitin ztuhlých při různých rychlostech ochlazování, vlastnosti této slitiny v tahu a tvrdost. Slitina byla dále tepelně zpracována a mechanické vlastnosti tepelně zpracované slitiny byly porovnány s vlastnostmi slitiny v litém stavu.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Lisování oxidové keramiky

Autor: Zuzana Andelová
Ročník: M1
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Doc. Dr. Willi Pabst

Lisování je standardní metoda pro výrobu tablet z farmaceutických prášků, ale také jedna z nejdůležitějších tvarovacích metod pro keramiku. V tomto příspěvku jsou identifikovány řídící parametry lisovacích procesů a prodiskutovány některé klíčové problémy této metody. Jsou představeny různé typy lisů a je vysvětlen význam granulace prášků. Na příkladě prášků Al_2O_3 je ukázána závislost objemové hmotnosti resp. relativní hutnosti na lisovacím tlaku, a to jednak přímo po lisování (tj. za syrova) a jednak po přezahu resp. výpalu na různé teploty (1200 - 1400 °C). Objemová hmotnost resp. pórovitost je určena jednak čistě geometricky jako poměr hmotnosti a objemu (u syrových těles), jednak pomocí Archimedovy metody (u přezahnutých resp. vypálených těles). Smrštění je měřeno posuvným měřítkem. Je ukázáno, jakým způsobem lze získat lisovací parametry proložením naměřených závislostí empirickými vztahy, jako např. tzv. Balšínovými zákony (tj. pomocí logaritmických resp. semilogaritmických dvouparametrových vztahů). Bylo zjištěno, že se - kromě očekávané závislosti mikrostrukturních parametrů a smrštění na teplotě výpalu - i po výpalu jasně projevuje závislost docílené hutnosti na lisovacím tlaku. V závěru jsou oddiskutovány projevy gradientů a anizotropie v mikrostruktuře těles.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Příprava titaničitých vrstev s antibakteriálními a bioaktivními vlastnostmi

Autor: Bc. Martina Urbanová
Ročník: M1
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Diana Horkavcová, Ph.D.

V dentální a chirurgické implantologii má titan a jeho slitiny široké využití hlavně z důvodu jejich biokompatibility s lidským organizmem. Protože je povrch těchto materiálů inertní, vyvíjejí se metody pro tvorbu povlaků, kdy se využijí mechanické vlastnosti kovu a bioaktivních vlastností povlaku. Jednou z efektivních a technicky nenáročných postupů tvorby vrstev je metoda sol-gel.

Titaničitý sol byl připraven z tetra-n-butyl ortotitanátu, acetylacetonu, kyseliny dusičné a etanolu. Pro zabezpečení antibakteriálních vlastností byl do tohoto základního Ti-solu přidán roztok obsahující stříbrné ionty. Prášek fosforečnanu vápenatého (β -TCP) byl přidán za účelem zabezpečení bioaktivních vlastností. Po 24-hodinovém míchání následovalo potahování předupraveného substrátu ponořením do solu za stálého míchání, při laboratorní teplotě. Po vysušení a vypálení potažených vzorků se hodnotila adheze vrstev metodou tape test (nalepení pásky na vryp tvaru mřížka a její následné odtržení) a bioaktivita vrstev in vitro testem za statických podmínek (expozice v simulované tělní tekutině). Potažené substráty se po výpalu, tape testu a in vitro testu sledovaly optickým mikroskopem.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Obalové sklo s nižší propustností v UV oblasti

Autor: Hana Dvořáková
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Miroslav Rada, CSc.

Cílem práce je zpracovat patentovou řešerši. S ohledem na její výsledky sestavit kmen, který by po utavení poskytoval relativně transparentní čirou obalovou sklovinu. Toto sklo musí mít minimální propustnost pro UV záření. UV záření způsobuje degradaci nápojů a organických materiálů. Obaly z tohoto skla bude možno použít v potravinářském a farmaceutickém průmyslu. Zákazník ocení možnost vidět výrobek (např. kvalitní víno) uvnitř lahve.

Hlavní technologickou výhodou čírého skla oproti sklu barevnému je jeho snadnější tavitelnost. Doposud se využívalo přidavku oxidů Ce, V, Ti, Mn, Co, Cu a Mo, případně vhodný poměr mezi oxidy železa a manganu. To však přinášelo celou řadu technologických problémů (zbarvování skla, devitrifikaci). V práci je hledán vhodný vzácný oxid zvyšující absorpci skla v UV oblasti. Vzácné oxidy zatím ve sklářském průmyslu nejsou z tohoto hlediska zcela prozkoumány. Přitom je známo, že tyto oxidy pozitivně ovlivňují některé důležité fyzikálně-chemické parametry.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Kinetika koroze Ba křišťálových skel

Autor: Lukáš Hrbek
Ročník: B3
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: prof. Ing. Aleš Helebrant, CSc.

Práce vychází z dříve získaných experimentálních dat [1] popisujících interakci čtyř typů Ba křišťálových skel s kyselinou octovou, citronovou a HCl při 60 °C. Jejím cílem je vyhodnocení difúzních koeficientů sodných draselných a barnatých iontů ve skle. Množství Si převedeného do roztoku bylo podle [1,2] minimální, při vyhodnocení bylo proto zanedbáno rozpouštění křemičité sítě a bylo uvažováno pouze selektivní vyluhování Na, K a Ba iontů ze skla interdifúzním procesem. Vyhodnocení vycházelo z předpokladu nekonečného vzorku a uniformního rozdělení koncentrace pohyblivých iontů v nekorodovaném skle. Nejnížší hodnoty difúzních koeficientů Ba iontů vykazuje ve všech testovaných prostředích sklo s nejvyšším obsahem ZnO. Na rozdíl od Pb křišťálových skel byly difúzní koeficienty při interakci s kyselinou octovou pro všechny ionty nižší než ve zbývajících kyselinách. Ve shodě s [2] lze proto pro testování odolnosti Ba křišťálových skel doporučit spíše kyselinu citronovou. Další zpřesnění vypočtených hodnot lze dosáhnout numerickým řešením Fickových zákonů, umožňujícím zahrnutí neuniformních koncentračních profilů do počáteční podmínky.

[1] Bilíková M.: Diplomová práce, Ústav skla a keramiky VŠCHT Praha, 2006

[2] Hradecká H., Bilíková M., Helebrant A.: Sklár a keramik 58, 1-7, (2008)

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Vliv poloměru PtRh kapiláry na výslednou hodnotu povrchového napětí sklovin při použití metody maximálního tlaku v bublině

Autor: Michal Kirchner
Ročník: M2
Ústav: 107
Školitel: Ing. Miroslav Rada, CSc.

Cílem zde prezentované práce bylo vyšetřit vliv průměru kapiláry a průtoku plynu kapilárou u stanovení povrchového napětí metodou maximálního tlaku v bublině a navrhnout ideální nastavení průměru kapiláry a průtoku plynu tak, aby se naměřená hodnota co nejvíce blížila spočteným hodnotám povrchového napětí podle Rubensteina.

Podle dostupné literatury by tyto dva parametry neměly mít žádný vliv na výslednou hodnotu naměřeného povrchového napětí. Oproti teorii bylo však prokázáno, že při měření metodou maximálního tlaku v bublině průměr kapiláry i průtok plynu podstatně ovlivňují výslednou stanovovanou hodnotu.

Závislost povrchového napětí na průměru kapiláry vykazovala téměř u všech zkoumaných sklovin parabolický průběh. Rozdíl hodnot při konstantní teplotě 1200 °C a průtoku plynu 7,6 ml/h zjištěných na kapiláře o průměru 1,395 mm a kapiláře o průměru 2,041 mm dosahoval v průměru 38 mN/m, oproti tomu rozdíl zjištěných hodnot při nejvyšším zvoleném průtoku 11.6 ml/h a nejnižším možném průtoku 4.6 ml/h dosahoval při teplotě 1200 °C a průměru kapiláry 1,395 mm v průměru 46 mN/m.

optimální podmínky měření: 1200 °C průměr kapiláry 1,395 mm a průtok plynu 5,8 ml/h.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Fotoaktivita a hydrofilita vrstev TiO₂ s obsahem Ag

Autor: Denisa Krychtálková
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: prof. Ing. Josef Matoušek, DrSc., Ing. Helena Hradecká

Oxid titaničitý je znám řadu let pro své fotokatalytické vlastnosti, díky nimž má schopnost po ozáření UV světlem degradovat některé pro lidský organismus škodlivé organické látky. Princip fotokatalytického účinku spočívá ve vzniku hydroxylových radikálů, jež mají silné oxidační vlastnosti a snadno reagují s organickými sloučeninami. V předložené práci byly metodou sol gel připraveny tenké vrstvy TiO₂ a TiO₂ dopované stříbrem (ve formě vodného roztoku AgNO₃ nebo acetylacetonátu Ag) a naneseny na skleněný substrát. Vrstvy byly poté vysušeny a vypáleny v peci při teplotě 400 °C a 500 °C po dobu 5 hodin. Následně byla sledována fotoaktivita a hydrofilita připravených vrstev. Výsledky měření ukázaly, že dobré fotokatalytické vlastnosti vykazují oba typy vrstev. V případě samotného TiO₂ teplota výpalu neovlivnila schopnost degradace barviva (methylenová modř), u vrstev dopovaných Ag byla degradace vyšší při výpalu 400 °C. Fotodegradační schopnost vrstev je nyní ověřována s použitím methylenové oranž místo methylenové modři. Hydrofilita všech vrstev byla výrazně vyšší než u samotného nepotaženého skleněného substrátu, nejvyšší hydrofilitu pak vykazovaly TiO₂ dopované Ag vypálené na 400 °C.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Model interakce rozpouštění hydroxyapatitu pro chirurgické aplikace

Autor: Bc. Lenka Kuncová
Ročník: M1
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Diana Horkavcová, Ph.D.

Hydroxyapatit (Ca₁₀(PO₄)₆(OH)₂), HA) je anorganická sloučenina přirozeně se vyskytující v kostech a zubech. Z tohoto důvodu je syntetizován pro medicínské aplikace jako látka díky své chemické kompozici snáze přijatelná organismem. Tento bioaktivní materiál vytváří řadou biochemických a chemických reakcí pevnou vazbu s hostitelskou tkání.

Byly studovány dva syntetické materiály, slinutý hydroxyapatit (BAS[®] - HA) vyrobený firmou Lasak spol. s.r.o. a porézní bovinní hydroxyapatit (BIO - OSS) od Geistlich Pharma. Dynamickým uspořádáním in vitro testu v roztoku SBF (simulated body fluid) se chce dosáhnout podobných podmínek panujících uvnitř organismu. Oba materiály byly vystaveny roztoku SBF po dobu 14 dnů ve dvou uspořádáních. V prvním typu uspořádání byly dvě průtočné cely zaplněny materiálem pouze do ¼ svého objemu (částice byly v lepším kontaktu s roztokem SBF), v druhém případě byly cely vyplněny materiálem zcela. Oba materiály byly po interakci s roztokem SBF pokryty novou, pravděpodobně hydroxyapatitovou fází (HAp). Došlo k nárůstu hmotnosti obou materiálů pro oba typy uspořádání. Tvorba nové vrstvy na jednotku hmotnosti probíhala rychleji u materiálu BIO - OSS. Avšak vzhledem k rychlosti srážení HAp na jednotku povrchu se ukázal aktivnější materiál BAS[®] - HA.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Korundová gradientní keramika

Autor: Helena Maříková
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Jana Andertová, CSc.

Pokročilé keramické materiály umožňují díky svým vlastnostem řadu náročných aplikací. Gradientní materiály s řízenou pórovitostí nacházejí uplatnění v mnoha inženýrských oborech, zvláště tam, kde tepelná, chemická nebo mechanická zátěž nedovoluje použití materiálů kovových nebo polymerních. Jedná se především o tepelně izolační aplikace, biokeramické materiály, filtry nebo membrány. Struktura pórů keramických membrán určuje řídící děj separačního procesu. Práce je zaměřena na studium přípravy porézních keramických materiálů metodou lití suspenzí do porézního bloku. Velikost pórů je řízena velikostí a rozdělením velikosti částic použitých prášků. Základem experimentu je studium přípravy stabilních Al_2O_3 vodných suspenzí s proměnnou velikostí částic v intervalu 0,7 – 1,7 μm . Pro dosažení stabilní suspenze bylo použito několik typů aditiv modifikujících mezičásticové interakce disperzního systému a studiem časové stability vybraných tokových parametrů bylo stanoveno optimální složení kineticky a agregátně stabilní suspenze. Dále byl studován vliv typu a přídavku aditiva na vybrané vlastnosti připravených vysokoteplotně zpracovaných těles.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Chemická odolnost funkčních násobných vrstev připravených metodou sol-gel

Autor: Simona Bártová
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Helena Hradecká, prof. Ing. Aleš Helebrant, CSc.

Dlouhodobý kontakt běžných křemičitých skel s vodným prostředím vyvolává převod složek skla do roztoku a tím i nevratné změny ve struktuře povrchu skla. Jeden ze způsobů zvýšení chemické odolnosti skla proti korozi je nanášení ochranných vrstev na povrch skla. Předložená práce se zabývala testováním chemické odolnosti tenkých křemičitých vrstev připravených metodou sol-gel z tetraethylorthosilikátu a směsi organických rozpouštědel za přítomnosti kyselého katalyzátoru metodou sol-gel. Připravený sol byl postupně nanášen v jedné až čtyřech vrstvách na skleněný podložní substrát technikou dip-coating. Každá z nanesených vrstev byla vždy vysušena a dále vypalována v peci 1h při 550 °C. Následně byla změřena tloušťka vrstev profilometrem a výsledné vrstvy byly podrobeny statickým loužícím testům v destilované vodě při teplotě 80 °C po dobu 1 h - 7 dní. Byla sledována časová závislost přechodu složek ze skla (Na, Si) do roztoku v závislosti na počtu nanesených vrstev. Výsledky ukázaly, že skla potažená jednou až čtyřmi vrstvami vykazují ochranný charakter oproti samotnému nepotaženému substrátu. Rozpouštění všech typů násobných vrstev bylo srovnatelné, výluh Na byl u vícenásobných vrstev nižší.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Model rozpouštění resorbovatelných materiálů pro chirurgické aplikace

Autor: Bc. Klára Zítková
Ročník: M1
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: prof. Ing. Aleš Helebrant, CSc.

Resorbovatelné materiály na bázi fosforečnanů vápenatých se využívají v chirurgické praxi především dvojím způsobem: jednak jako krátkodobé implantáty překlenující a urychlující fázi hojení kostního defektu (tyto jsou pak cele nahrazeny tělu vlastní tkání), v druhém případě poskytují tkáním trvalou oporu místo chybějící kosti.

Studovanými materiály byly Poresorb® (β -trikalcium-fosfát, TCP) a OssaBase (hydroxyapatit, HA) vyrobené firmou Lasak spol. s r.o.. Oba materiály se podobají svým iontovým složením, ale liší se krystalovou strukturou a dalšími fyzikálně-chemickými vlastnostmi. Materiály byly po dobu 13 dnů vystaveny v průtočných celách působení roztoku SBF (simulovaná tělní tekutina). Dynamické uspořádání testu bylo zvoleno s cílem maximálně napodobit podmínky, kterým je materiál vystaven v organismu. Srovnány byly dvě situace. Dvě cely byly materiálem úplně zaplněny, takže granule byly omývány malým množstvím tekutiny a povrchy jednotlivých granulí byly vzájemně v těsné blízkosti. V dalších dvou celách byl materiál volně položen a zaplňoval celu jen do poloviny objemu. Vztaheno k hmotnosti granulí, byl v interakci s roztokem aktivnější materiál OssaBase - HA, avšak vztaheno na jednotku povrchu se aktivnějším ukázal Poresorb® - TCP. K relativně vyšším přírůstkům docházelo u obou materiálů v nezaplňených celách.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Povrchy skiel a ich zmeny vplyvom elektrónového zväzku

Autor: Tadeáš Gavenda
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: doc. RNDr. Ondrej Gedeon, Ph.D.

V štúdiu povrchov skla je dôležitým parametrom drsnosť, ako miera nerovnosti povrchu skla. Drsnosť podmieňuje fyzikálne i chemické vlastnosti povrchu skla, ako napr. rozptyl svetla či koeficient trenia. Jednou z najdôležitejších metód na kvantitatívne štúdium drsnosti je mikroskopia atómových síl (AFM – atomic force microscopy).

Naprašovanie je významnou metódou prípravy tenkých vrstiev. Je to univerzálna metóda, ktorou možno deponovať rôzne druhy materiálov na širokú škálu podložiek a tak vznikajú vrstvy s rozličnými vlastnosťami.

V prípade vystavenia pevnej látky (povrchu skla) zväzku častíc (protónov, elektrónov, fotónov) dochádza k interakcii, pri ktorej sa menia vlastnosti pevnej látky. Zmeny sa líšia v závislosti na dávke, energii častíc a type častíc.

Cieľom tejto práce bolo porovnať drsnosti niektorých typov skiel (brúsené ploché sklo (Float), kremenné sklo a sklo s vrstvou sol-gel), naprašovaním na nich pripraviť tenké filmy Au/Pd a Pt a porovnať ich morfológiu a nakoniec vystaviť sklo borofloat pôsobeniu zväzku elektrónov a popísať zmeny, ktoré nastali na povrchoch študovaných skiel.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Vývoj fotosenzitivních skel pro fotoniku

Autor: Jan Krupička
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Dr. Ing. Martin Míka

Letošní práce pro SVK je zaměřena na shrnutí dosavadního výzkumu v oblasti fotosenzitivních skel, na kterém jsem se podílel. Hlavním cílem projektu je příprava fotosenzitivních skel, vhodných pro moderní fotoniku. Jejich výhodou je schopnost změny indexu lomu po ozáření světlem vhodné vlnové délky. Tento jev není zcela běžným a je ho docíleno speciálním složením skla, konkrétně přidávkem oxidu germaničitého. Ve sklech, která obsahují tento oxid, dochází po ozáření UV paprskem k vygenerování paramagnetických defektů s nepárovými elektrony, které mají vliv na změnu indexu lomu ve skle. Studovali jsme tedy jeho vliv na fotosenzitivitu a snažili se najít neoptimálnější složení skla, které by dosahovalo nejlepších výsledků.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Rentgenová optika pro velké vesmírné teleskopy

Autor: Martina Landová
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Dr. Ing. Martin Míka

Současná astronomie zabývající se zkoumáním vesmíru v rentgenové oblasti elektromagnetického záření kladé stále vyšší požadavky na kvalitu obrazu získávaného pomocí vesmírných teleskopů. Z tohoto důvodu jsou vyvíjeny nové, větší a citlivější optické systémy s vyšším rozlišením. Tato práce je zaměřena na vývoj technologie pro optiku těchto teleskopů. Podává přehled námi dosažených výsledků při tepelném tvarování skleněných desek. Ty slouží jako substráty pro vakuově nanosenou reflexní vrstvu. Výsledky dosažené tvarováním skla jsou srovnány s technologií tvarování křemíkových desek plastickou deformací. Obě metody poskytují zrcadla s vlastnostmi vyhovujícími pouze v některých oblastech. Řešením tohoto problému je použití obou technologií a optický systém vytvořit z tenkých křemíkových desek vlepených do vytvarovaných skleněných substrátů. Cílem práce je najít vhodný materiál pro spojení těchto dvou vrstev, popsat jeho vlastnosti a navrhnout technologii pro jeho použití. Experiment je zaměřen na zjištění podmínek použití skleněné pájky při spojování skleněné a křemíkové vrstvy. V práci jsou uvedeny a porovnány výsledky z měření teplotní roztažnosti použitých materiálů a pevnosti spoje pájkou při různých teplotách pájení.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Chemická odolnost olovnatých křišťálových skel

Autor: Štěpán Pech
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Helena Hradecká, prof. Ing. Aleš Helebrant, CSc.

Vyluhování olova z olovnatého křišťálu, používaného jako stolní nádoby či pro skladování nápojů (karafy), je v současné době přísně sledováno vzhledem k toxicitě olova. Limitní hodnoty pro výluhy Pb jsou dány mezinárodní normou ISO 7086. Vzhledem k tomu, že se očekává další zpřísnění legislativy v této oblasti a také se mění některé technologické postupy výroby křišťálů z důvodu snižování výrobních nákladů, je důležité sledovat tuto problematiku i nadále. Předložená práce se zabývá dlouhodobým loužením celistvých vzorků nápojových skel (vyrobených foukáním i lisováním) a z nich připravených drťových vzorků do různých typů roztoků (kyselina octová, HCl, dest.voda, alkohol). Sledováno bylo množství Pb a K ve výluzích metodou AAS, povrch vzorků po loužení byl sledován metodou ESCA. Bylo zjištěno, že se zvyšujícím se pH kyselých roztoků se snižuje přechod Pb do výluhů. Při dlouhodobém loužení (61 dní) klesalo množství Pb ve výluzích v řadě k.octová>dest. voda>alkohol. U dlouhodobě loužených celistvých vzorků nedošlo ani po 158 dnech k překročení limitní hodnoty výluhu olova dané normou pro 24h loužení (1,5 mg Pb/l). Výsledky měření koncentračních profilů jednotlivých složek na celistvých vzorcích loužených v modelových roztocích byly v relaci s výsledky loužení drťových vzorků ve stejných roztocích.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Charakterizace velikosti částic metodou laserové difrakce

Autor: Jana Šámalová
Ročník: M1
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Eva Gregorová, CSc.

Práce se zabývá stanovením velikosti a distribucí velikosti částic metodou laserové difrakce a srovnáním výsledků vyhodnocených pomocí Mieovy teorie (MT) a Fraunhoferovy transformace (FT). Měření byla prováděna za mokra na přístroji Analysette 22 NanoTec (Fritsch, SRN). Byly použity prášky různých tvarů (koule, tyčinky, destičky), velikostí (0,001 - 1 mm) a různého typu (diamanty, korundy, škroby, kaoliny, léčiva). Výsledky zřetelně potvrzují nezbytnost použití MT pro prášky nanometrických velikostí a shodu výsledků získaných oběma metodami při měření izometrických částic, jejichž velikost přesahuje 1 mikron. U výrazně anizometrických částic (destičky) je však třeba upřednostnit FT, vzhledem k základnímu předpokladu pro použití MT (kulaté částice). V závěru práce bylo provedeno srovnání výsledků distribuce velikosti částic různých kaolinů stanovené laserovou difrakcí a sedimentační analýzou. Byly diskutovány vzájemné rozdíly a ze získaných dat proveden výpočet průměrného aspect ratio jednotlivých typů kaolinů.

Sekce: Anorganické nekovové materiály II

Fixace toxických prvků (Cr^{6+}) v matrici aluminosilikátového polymeru

Autor: Bc. Denisa Trypesová
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: doc. RNDr. František Škvára, DrSc.

Tato práce si dala za cíl přispět k řešení problematiky fixace toxického Cr^{6+} s výraznými nežádoucími účinky na lidské zdraví. Matricí zvolenou pro fixaci Cr^{6+} se stal materiál na bázi aluminosilikátového polymeru. Základní používanou surovinou je český odpadní elektrárenský popílek, který po alkalické aktivaci (NaOH + sodné vodní sklo) dává vznik materiálu podstatně ekonomičtějšímu a ekologičtějšímu nežli představuje velmi blízký cement. Chrom byl vnášen do matrice aluminosilikátového polymeru ve formě $\text{Na}_2\text{Cr}_2\text{O}_7 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$. Příprava vzorků probíhala dvěma způsoby. Nejprve byly připravovány trámečky z plastických směsí s vodním součinitelem 0,36, následně válečky lisováním za sucha, kdy směs měla výrazně nižší vodní součinitel 0,16. Vzorky aluminosilikátových polymerů (s přísadou Cr^{6+}) byly po zatvrdnutí vypalovány při teplotách 600 °C, 800 °C, 1000 °C. U vypálených vzorků se stanovovala vyluhovatelnost Cr, As, Na z matrice aluminosilikátového polymeru (v souladu s vyhláškou Ministerstva životního prostředí 294/2005 Sb). Vzorky, které byly podrobeny výpalu na 1000 °C splňují pro I. třídu vyluhovatelnosti Cr. dle vyhlášky 294/2005 Sb. Dále byla zkoumána pevnost vzorků v ohybu a tlaku pro trámečky a pouze pevnost v tlaku pro válečky po 28 dnech.

Tato práce je součástí grantu GAČR 103/08/1639 a výzkumného záměru MSM 6046137302.

Sekce: Anorganické nekovové materiály II

Materiály na bázi aluminosilikátových polymerů

Autor: Bc. Lenka Vinšová
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: doc. RNDr. František Škvára, DrSc.

Byly připravovány materiály na bázi aluminosilikátových polymerů (geopolymerů) reakcí popílku s alkalickým aktivátorem (NaOH resp. KOH , sodné resp. draselné vodní sklo). V práci byl použit český odpadní elektrárenský popílek ze spalování hnědého uhlí s vysokým obsahem SiO_2 . Směsné alkalické aktivátory pro přípravu aluminosilikátových polymerů představují další perspektivu ve výzkumu těchto materiálů. V této práci byl použit K aktivátor (KOH + K vodní sklo), který je z hlediska žárových vlastností optimální oproti dalším kombinacím Na a K aktivátoru, s malým přídavkem mikromletého vápence (10 %). Připravené vzorky byly podrobeny výpalu na teploty 200 – 1000 °C. Po výpalu aluminosilikátových polymerů na teploty vyšší než 600 °C dochází k zhutnění struktury a výraznému snížení vyluhovatelnosti Na a K. U těchto materiálů vypálených na teploty nad 800 °C se prakticky neprojevují výkvěty při uložení ve vlhkém prostředí.

Cílem této práce bylo získat další informace o tomto materiálu. Aluminosilikátové polymery podrobené tepelnému zpracování (do 1000 °C) představují možný další typ keramických materiálů.

Tato práce je součástí grantu GAČR 103/08/1639 a výzkumného záměru MSM 6046137302.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Soli acetylsalicylové kyseliny

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

Aspirin se řadí mezi významné zástupce nesteroidních analgetik a patří mezi léčiva první volby při nachlazení nebo chřipce. Jako největší jeho nevýhoda je uváděno dráždění žaludeční sliznice, jež je způsobeno zejména jeho malou rozpustností ve vodě a rozkladem na kyselinu salicylovou a kyselinu octovou, kdy vzniká lokální kyselé prostředí.

Možným řešením by mohlo být převedení na formu soli, např. reakcí kyseliny acetylsalicylové s hydrogenuhličitanem sodným za přítomnosti malého množství vody pro nastartování reakce. Krystalizací z matečného roztoku v převaze isopropanolu mohou vzniknout dvě odlišné krystalové formy – dihydrát nebo anhydrát, přitom každá forma je odlišně stabilní. Struktura dihydrátu již byla vyřešena. Jehličkovitý anhydrát je velmi stabilní, ale krystaly kvůli jejich tvaru nejsou vhodné pro RTG difrakci na monokrystalu, proto byly analyzovány pomocí práškové RTG difrakce. Pro změnu krystalového habitu může být provedena rekrystalizace.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Polymerní materiály pro řízené uvolňování léčiv

Autor: Vladimíra Vosmanská
Ročník: M1
Ústav: Polymerů
Školitel: prof. Ing. Vratislav Ducháček, DrSc.

Tato práce se zabývá polymery, které se používají k výrobě léků s řízeným uvolňováním. Stručně poukazuje na důvody jejich používání a výhody oproti lékovým formám s okamžitým uvolňováním. Těžištěm práce je výčet dnes používaných polymerů pro výrobu hromadně vyráběných léčivých přípravků, jejich vlastností a možností použití. V experimentální části je dokázáno, že léková forma s prodlouženým uvolňováním se liší svým disolučním profilem od lékové formy s okamžitým uvolňováním. Stanovení bylo provedeno na přístrojích Sotax AT7 Smart a UV/VIS spektrofotometru Cary 50. Lékovou formu s okamžitým uvolňováním reprezentuje kyselina L-askorbová v želatinové tobolce. Lékovou formu s prodlouženým uvolňováním reprezentuje Vitamin C 500 mg s šípky s postupným uvolňováním od firmy MedPharma. Za prodloužené uvolňování kyseliny L-askorbové z tablety vitaminu C je zodpovědný hydroxypropylmethylether celulosy.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Predikce tvaru krystalů na základě znalosti struktury

Autor: Štefan Auer
Ročník: M1
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: Dr. Ing. Michal Hušák

V tomto projektu je hlavním zájmem využití modulu Morphology z programu Materials Studio. MS studio je produktem firmy Accelrys Software Inc., který předpovídá tvary krystalů krystalických látek na základě jejich známé krystalové struktury. Vstupní strukturní data se získají metodou RTG difrakce na monokrystalu. Měření na 4-kruhovém difrakotmetru pomocí optického mikroskopu poskytne také referenční data o skutečné morfologii krystalů, se kterými je možné predikce srovnat.

Prvním krokem projektu je zvládnutí konfigurace a kooperace s uživatelským rozhraním programu MS studio. Druhým krokem je predikce krystalových tvarů vybraných molekul, které tvoří snadno monokrystaly. Finálním krokem je porovnání krystalu z výsledků predikce s reálným monokrystalem, z čehož se následně odvodí spolehlivost různých metod predikčních výpočtů, a rozhodne se tak o případném využití programu v širší praxi. Výsledky této práce mohou napomoci zejména farmaceutickým firmám při řešení technologických problémů spjatých s krystalovou strukturou neznámých látek.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Interkalace salicylátu a flobufenu do Mg-Al a Mg-Fe hydrotalcitu

Autor: Kamila Ctiborová
Ročník: M1
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: doc. Ing. František Kovanda, CSc.

V práci byla studována interkalace aniontů kyseliny salicylové a flobufenu do struktury Mg-Al a Mg-Fe hydrotalcitu. Interkalace byla provedena pomocí aniontově-výměnných reakcí s použitím prekurzorů Mg-Al a Mg-Fe v dusičnanové a chloridové formě. Anionty kyseliny salicylové i flobufenu se podařilo interkalovat do Mg-Al hydrotalcitu, což prokázaly výsledky práškové rentgenové difrakční analýzy a infračervené spektroskopie. Množství interkalovaných aniontů odpovídalo 63, resp. 100 % aniontově-výměnné kapacity hostitelské struktury. Aniontově-výměnnou reakcí ani alternativními postupy (přímou syntézou srážecí reakcí a rehydratační reakcí směsného oxidu) se anionty léčiv nepodařilo interkalovat do struktury Mg-Fe hydrotalcitu. Infračervená spektroskopie produktů a analýza použitých roztoků pomocí UV-VIS spektroskopie ale prokázaly imobilizaci určitého množství aniontů v pevné fázi, pravděpodobně v důsledku adsorpce na vnějším povrchu částic. Rychlost uvolňování interkalovaných léčiv byla stanovena pomocí disolučních testů v destilované vodě a zředěné HCl (0,1 mol/l).

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Farmaceutické amorfny hydráty

Autor: Iva Koupilová
Ročník: M1
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc.

V předvedené prezentaci bude přiblížen nový pojem ve farmaceutické průmyslu, a to amorfny hydráty. Je to docela mladá podskupina amorfnych fází, mluvíme zde o tzv. polyamorfismus, která ještě zdaleka není popsána. Pro farmaceutický průmysl jsou důležité především díky své stabilitě a hygroskopicitě.

Dále se prezentace bude věnovat obsahu vody v molekule, analytickému stanovení amorfny fáze a obsahu vody a vlastnostem amorfnych hydrátů. V poslední řadě bude vyvozena jejich definice.

Zpracování amorfnych hydrátů vedlo k napsání článku Farmaceutické amorfny hydráty panem prof. RNDr. Bohumilem Kratochvílem, DSc. a mnou, který se objeví v 1. vydání roku 2011 v Chemických listech.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Interkalace paracetamolu do struktury hydrotalcitu

Autor: Bc. Zuzana Maryšková
Ročník: M2
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: doc. Ing. František Kovanda, CSc.

V práci byla studována interkalace paracetamolu do Mg-Al hydrotalcitu. Hydrotalcit se často používá jako hostitelská struktura pro interkalaci různých aniontů, farmaceuticky aktivní substance jsou zpravidla interkalovány ve formě aniontů karboxylových kyselin. Paracetamol anionty netvoří, což jeho interkalaci komplikuje. Proto běžně používané postupy jako přímá syntéza koprecipitační reakcí nebo aniontová výměna nevedly ke vzniku interkalátu. Paracetamol se do hostitelské struktury podařilo interkalovat rehydratační reakcí směsného oxidu, který byl připraven tepelným rozkladem Mg-Al hydrotalcitu v dusičnanové formě. Podmínky rehydratační reakce byly upraveny tak, aby se zamezilo nežádoucí degradaci paracetamolu na iminochinon. Připravené vzorky byly charakterizovány pomocí práškové rentgenové difrakční analýzy, infračervené spektroskopie a termické analýzy. Množství interkalovaného paracetamolu určené pomocí UV-VIS spektroskopie odpovídalo 45 % aniontové výměnné kapacity hostitelské struktury. V mezivrstvě jsou dále přítomny anionty OH⁻ a molekuly krystalové vody. Disolučními testy provedenými ve vodě a zředěné HCl (0,1 mol/l) byla zjištěna rychlost uvolňování paracetamolu z interkalovaného produktu.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Metoda laserové difrakce a její použití ve farmaceutickém průmyslu

Autor: Michal Šimek
Ročník: M1
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: Prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc.

V prezentované práci bude představen vývoj metody pro měření distribuce velikosti částic laserovou difrakcí. První část vývoje metody představuje zvolení pevných parametrů (kapalné médium, smáčedlo, index lomu). V druhé části je třeba určit hledané parametry (rychlost míchání, doba a intenzita sonifikace). Vždy je nutné zmíněné parametry volit s ohledem na fyzikálně-chemické vlastnosti API. Na závěr je nutné provést statistické vyhodnocení opakovatelnosti a metodu validovat dle požadavků GMP.

Parametr velikosti částic je v charakterizaci farmaceuticky aktivní substance (API) významný, zejména proto, že částice o různé velikosti a tvaru mohou významně ovlivnit chování lékové formy v těle (desintegrace tablet, pevnost tablet a disoluce).

Laserová difrakce patří mezi rutinní techniky stanovení distribuce velikosti částic a využívá ji většina farmaceutických firem pro vstupní resp. výstupní kontrolu API.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Srovnávací studie algoritmů pro stanovení struktury z práškových dat

Autor: Bc. Jana Vachová
Ročník: M2
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: Dr. Ing. Michal Hušák

Stanovení krystalové struktury organických látek je důležitým krokem pro charakterizaci pevných lékových forem. Tato práce navazuje na mou bakalářskou práci, v níž jsem se zabývala stanovením limitu kvality práškových difrakčních dat nutných pro řešení struktury s ohledem na experimentální chyby a nestandardní vlastnosti vzorku. Dalším krokem tohoto výzkumu je stanovit vliv použitého algoritmu (implementovaných v programech DASH a FOX) na získání správného výsledku. Program DASH pracuje s rigidní molekulou a během řešení mění pouze pozici molekuly a její torzní úhly. Program FOX pracuje s flexibilním modelem molekuly s tím, že pouze stanovuje odchylky od originálního modelu. Po matematické stránce software DASH pracuje s metodou "simulated annealing", která může skončit v lokálním minimu. Zatímco program FOX dokáže problém lokálního minima vyřešit pomocí algoritmu "parallel tempering", z čehož vyplývá mnohem větší náročnost na čas. Srovnávací studie byla provedena na modelové látce - simvastatinu. V programu FOX jsem prováděla stejné testy jako v programu DASH a poté získaná data z obou programů porovnávala pomocí programu Crystal CMP a Mercury.

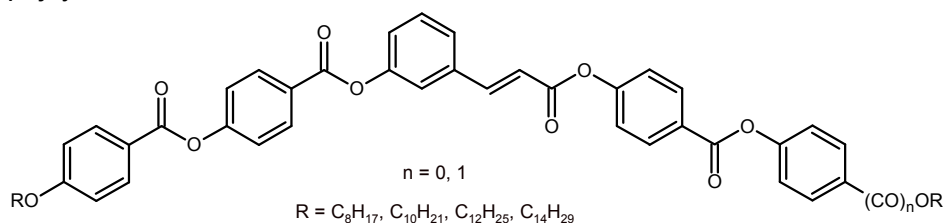
Sekce : Organická chemie B

Nové kapalné krystaly na bázi 3-hydroxykořicové kyseliny

Autor: Jiří Tůma
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Michal Kohout, Ph.D., prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

Kapalné krystaly jsou materiály běžně užívané např. v zobrazovací technice, či polovodičových součástkách. Díky svým unikátním vlastnostem se v posledních letech dostávají do popředí zájmu tzv. lomené kapalné krystaly tvořené disubstituovaným většinou aromatickým jádrem s úhlem přibližně 120° mezi bočními prodlužujícími řetězci.

V naší studii jsme se zaměřili na lomené struktury odvozené od 3-hydroxykořicové kyseliny. Připravili jsme sérii materiálů obsahujících pět esterových spojek s různými terminálními alkylovými řetězci. Mezomorfní vlastnosti těchto látek jsme zkoumali optickou polarizační mikroskopií a diferenční skenovací kalorimetrií. Získané výsledky jsme porovnali s dříve připravenými látkami se stejným centrálním jádrem, které obsahovaly místo terminální esterové spojky etherovou funkci.

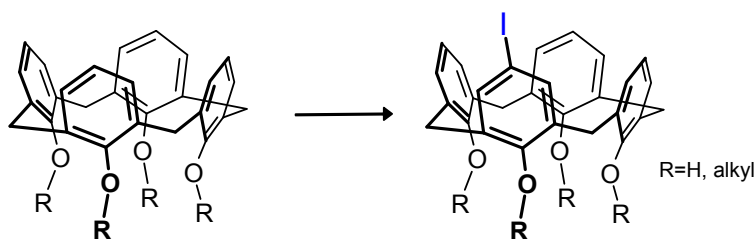


Sekce : Organická chemie B

Příprava jodovaných derivátů calixarenů

Autor: Petr Slavík
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Karolína Flídrová

Jodované deriváty calixarenů hrají významnou roli v syntéze složitějších molekulárních systémů pomocí cross-couplingových reakcí sloužících k selektivní komplexaci různých látek, například fullerénů. Příprava bromderivátů calixarenu je dnes již velmi dobře zvládnuta, bohužel však tyto deriváty v couplingových reakcích nereagují buď vůbec, nebo jen s nízkým výtěžkem. Naopak s jodderiváty calixarenu je popsáno mnoho různých cross-couplingových reakcí s velmi dobrými výtěžky, ovšem jejich syntéza je problematická. Dosud bylo popsáno jen několik syntetických postupů pro získání několika základních jodderivátů calixarenu. Cílem této práce je najít takové metody, které by umožňovaly jodaci nejen calix[4]arenu, ale i jeho vyšších homologů a dále aby bylo možno snadno ovlivňovat regioselektivitu reakce.



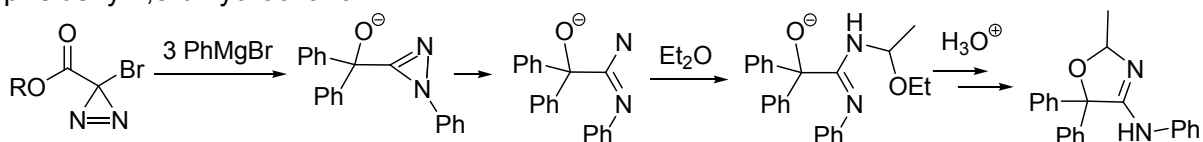
Sekce : Organická chemie B

Reakce 3-brom-3-karbalkoxydiazirinů s C-nukleofily

Autor: Václav Čmolík
Ročník: B3
Ústav: Organická chemie
Školitel: Ing. Tomáš Martinů, Ph.D.

3-Brom-3-karbalkoxydiaziriny reagují s některými nukleofily ve smyslu acylové nukleofilní substituce. Odstupující skupinou je 3-bromdiazirinylový aniont, který pravděpodobně spontánně disociuje za vzniku diazirinylidenu (CN_2), nového cyklického singletového karbenu. Silně elektrofilní CN_2 reaguje s dalším ekvivalentem nukleofilu za vzniku nového diazirinylového aniontu, jehož rozkladné produkty umožňují nepřímou identifikaci průběhu reakce. Prezentovaná práce zkoumá možnosti využití C-nukleofilů při generování CN_2 z diazirinů a následné tvorbě a reaktivitě C-substituovaných diazirinylových aniontů.

Esterová skupina zmíněných bromdiazirinů reaguje se dvěma ekvivalenty fenylmagnesiumbromidu v diethyletheru, avšak odstoupení bromdiazirinylového aniontu ze vzniklého alkoxidu je pomalejší než tvorba *N*-fenyldiazirinu, podléhajícího otevření na iminonitren. Insercí nitrenu do C-H vazby diethyletheru a následnou cyklizací vzniká příslušný 2,5-dihydrooxazol.



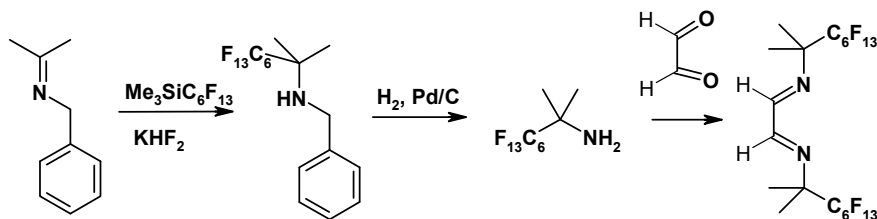
Sekce : Organická chemie B

Syntéza a aplikace aminů s terciárními polyfluoralkylovými skupinami

Autor: Eva Vrbková
Ročník: B3
Ústav: Organická chemie
Školitel: doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Mým cílem je připravit aminy s terciárními polyfluoralkylovými skupinami, které by se dále využily pro syntézu NHC ligandů pro Hoveyda-Grubbsovy katalyzátory.

Výchozí látkou pro syntézu je *N*-benzylpropan-2-imin, který jsem připravila podle publikovaného postupu reakcí benzylaminu s acetonem. Adice perfluorhexylmagnesiumbromidu a perfluorhexyllithia na imin poskytly složitou směs produktů. Oproti tomu adice trimethyl(perfluorhexyl)silanu byla úspěšná a poskytla žádaný chráněný amin ve výtěžku 22 %. V dalším kroku jsem provedla deprotektaci benzylové skupiny pomocí H_2 . Reakcí aminu a glyoxalem jsem pak získala klíčový intermediát pro přípravu NHC ligandu.

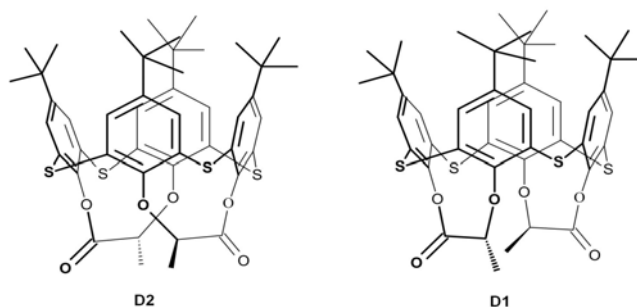


Sekce : Organická chemie B

Určení struktury inherentně chirálních diastereomerů přemostěného thiacalix[4]arenu pomocí NMR spektroskopie

Autor: Lukáš Vrzal
Ročník: B2
Ústav: Centrální laboratoře VŠCHT Praha
Školitel: Ing. Jiří Vlach, Ph.D.

Předmětem mé práce bylo určit strukturu inherentně chirálních diastereomerů thiacalix[4]arenu přemostěného na spodním okraji (D1, D2). Pomocí standardních NMR experimentů (^1H , ^{13}C , COSY, HMQC, HMBC) jsem přiřadil všechny ^1H i ^{13}C rezonance ve strukturách D1 a D2. Využitím nukleárního Overhauserova efektu (NOE) jsem potvrdil stereochemické uspořádání obou diastereomerů. Tyto výsledky jsou ve shodě se strukturami vypočtenými pomocí metody molekulové mechaniky (MM2).

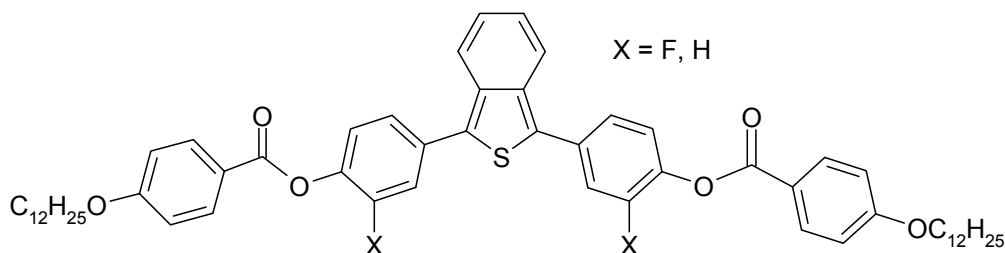


Sekce: Organická chemie B

Syntéza nových kapalných krystalů odvozených od benzo[c]thiofenu

Autor: Martin Horčic
Ročník: 3.
Ústav: Organická chemie
Školitel: prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

V rámci přípravy nových kapalných krystalů lomeného tvaru jsme se zabývali přípravou a studiem fluorescenčních vlastností a mesomorfního chování nových kapalných krystalů obsahující benzo[c]thiofen jako centrální jádro. S cílem ovlivnit fluorescenční vlastnosti těchto sloučenin jsme se rozhodli modifikovat fenylové skupiny zavedením atomu fluoru. V této práci bude diskutována syntéza, její problémy, a dále mesomorfní vlastnosti cílových sloučenin v porovnání s již dříve syntetizovanými nesubstituovanými deriváty.

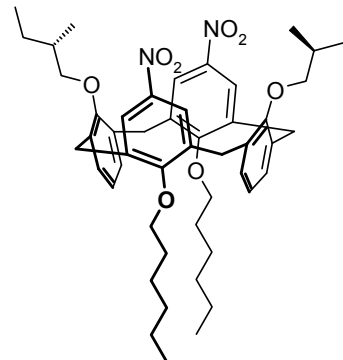


Sekce : Organická chemie B

Alkylace – alfa a omega syntézy prekurzorů chirálních aniontových receptorů

Autor: Filip Botha
Ročník: B2
Ústav: Organická chemie
Školitel: doc. Ing. Jan Budka, Ph. D.

Mezi jedny z nejefektivnějších receptorů aniontů neodmyslitelně patří distální bis(fenylureido)deriváty calix[4]arenu v 1,3-alternující konformaci. Cílem mé práce je příprava tohoto typu receptoru, nesoucího chirální alkylové řetězce. Již v počátečních krocích je navržena několikastupňová syntéza zatížena nepříjemnými úskalími, a to především nízkými výtěžky a relativně komplikovanými chromatografickými purifikacemi. V budoucnu plánujeme zavést chiralitu také do ureidoskupiny a provést komplexační studie připravených receptorů.

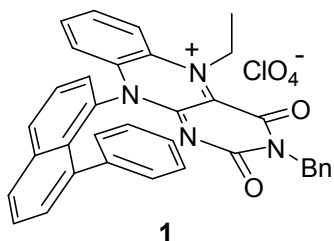


Sekce : Organická chemie B

Studium vlivu reakčních podmínek na stereoselektivní oxidaci thioanisolu katalyzovanou chirálními flaviniovými solemi

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

Flaviniové soli katalyzují oxidace sulfidů, aminů a Bayer-Villigerovy oxidace, čehož lze využít při syntézách vyžadujících nepřítomnost kovů jako katalyzátorů, například při syntéze chirálních léčiv. V naší laboratoři byla připravena planárně chirální flaviniová sůl 3-benzyl-5-ethyl-10-(8-fenyl-naftalen-1-yl)isoalloxazinium-perchlorát (**1**), která katalyzuje stereoselektivní



1

oxidace aromatických sulfidů. Předmětem mé práce byla příprava čistých enantiomerů flaviniové soli **1** a studium vlivu teploty a rozpouštědla na stereoselektivitu oxidace katalyzované touto solí. Dále jsem se zabývala studiem možného vlivu DNA na průběh a stereoselektivitu oxidace katalyzované solí **1** a jejími jednoduchými achirálními deriváty: 5-ethyl-3,10-dimethylisoalloxazinium-perchlorátem, 5-ethyl-1,3-dimethylalloxazinium-perchlorátem, 5-ethyl-3-methyl-10-naftylisoalloxazinium-perchlorátem.

Sekce : Organická chemie B

Syntéza merkapturových kyselin odvozených od toxických metabolických intermediátů styrenu

Autor: Milan Mališ
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: doc. Ing. Igor Lingart, CSc., Ing. Jan Krouželka

N-Acetyl-*S*-(2-hydroxy-1-fenylethyl)-L-cystein a *N*-acetyl-*S*-(2-hydroxy-2-fenylethyl)-L-cystein jsou již dlouho známé metabolity styrenu. Nově nalezené minoritní metabolity v moči - tři isomerní vinylfenylmerkapturové kyseliny *N*-acetyl-*S*-(2-vinylfenyl)-L-cystein, *N*-acetyl-*S*-(3-vinylfenyl)-L-cystein, *N*-acetyl-*S*-(4-vinylfenyl)-L-cystein, které jsou připravovány dvoustupňovou syntézou, odhalily novou metabolickou cestu. Pro jejich možné využití jako indikátoru expozice styrenu je potřeba připravit tyto látky v dostatečném množství a v analytické čistotě jako autentické standardy pro stanovení těchto metabolitů v moči.

Vinylfenylmerkapturové kyseliny byly připraveny dvoustupňovou reakcí dimethylesteru *N,N'*-diacetyl-L-cystinu s vinylfenylboronovými kyselinami a následující hydrolyzou vzniklého esteru.

N-acetyl-*S*-(2-hydroxy-1-fenylethyl)-L-cystein a *N*-acetyl-*S*-(2-hydroxy-2-fenylethyl)-L-cystein se připravují v literatuře popsanou reakcí *N*-acetyl-L-cysteinu s fenyloxiranem. Protože tato reakce poskytla neuspokojivé výsledky, připravujeme tyto látky reakcí methylesteru *N*-acetyl-L-cysteinu s fenyloxiranem.

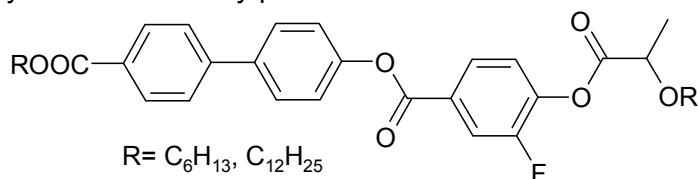
Sekce : Organická chemie B

Ferroelektrické kapalné krystaly s laktátovou chirální skupinou

Autor: Danuše Vavřínová
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Michal Kohout, Ph.D., prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

V posledních desetiletích se kapalné krystaly staly nedílnou součástí našeho každodenního života. Své uplatnění našly v zobrazovací technice, vodivých polymerech nebo světelných clonách. Nejrozšířenější aplikací kapalných krystalů jsou bezesporu LCD panely.

Současné displeje pracují na bázi tzv. zkřížených nematik a využívají nejrůznější směsi achirálních nematogenních materiálů. Významného zlepšení v kontrastu a odezvě na elektrické napětí lze dosáhnout použitím chirálních látek. Předmětem našeho studia byly materiály, které by mohly vykazovat fázový přechod de Vriesova typu. Cílem práce bylo navázat na výzkum již dříve připravených materiálů s laktátovou chirální skupinou. Vhodnou substitucí fluoru jsme se snažili snížit přechodové teploty a modifikovat mesomorfní chování. Připravené látky byly charakterizovány pomocí DSC a POM.

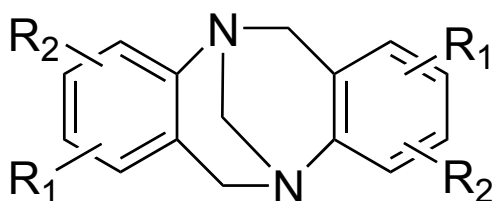


Sekce: Organická chemie M1

Příprava Troegerovýchází s flavinovými podjednotkami

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

Troegerovy báze (sloučeniny s chirálními centry na atomech dusíku) jsou jedním ze základních supramolekulárních fragmentů. Jejich spojením s flavinovými jednotkami se získá útvar kombinující výhody obou molekul – chirální povahu s pevně definovanou kavitou troegerovy báze a fotochemické a redoxní vlastnosti flavinu. Taková molekula by představovala možný fotoreceptor či enantioselektivní katalyzátor v organické syntéze. V práci byla vypracována syntéza prekursorů Troegerovýchází obsahujících ve svém skeletu flavinové podjednotky. Byly provedeny pokusy o převedení připravených prekursorů na cílové molekuly (příklad viz schéma).



Sekce : Organická chemie M1

Sirné glykolurily - stavební jednotky pro deriváty cucurbiturilů

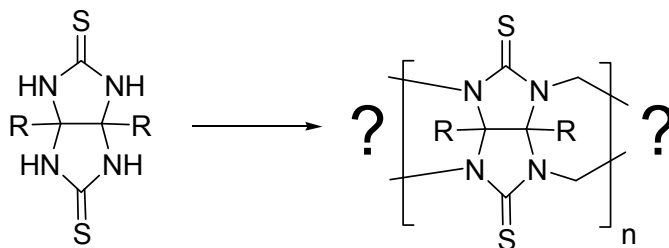
Autor: Markéta Zajícová
Ročník: M2
Ústav: Organické chemie
Školitel: doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.

Cucurbiturily jsou makrocyclické sloučeniny s rigidním skeletem a velmi nízkou rozpustností v běžných rozpouštědlech. Derivatizace skeletu může vést ke zvýšení rozpustnosti a hlavně k získání látek s naprosto odlišnými vlastnostmi než měl původní cucurbituril. Teoretických míst modifikace skeletu je několik - záměna C-H skupiny v glykolurilové stavební jednotce, modifikace methylenových můstků a výměna karbonylových kyslíků například za síru.

Derivatizaci skeletu lze provést buď přímo, na již připraveném cucurbiturilu, nebo je možné modifikovat glykoluril ještě před syntézou cucurbiturilu.

Cílem této práce je záměna karbonylových kyslíků za síru, tedy syntéza sirných derivátů glykolurilu, které mohou být pak použity jako stavební kameny pro sirné cucurbiturily.

V literatuře je popsána syntéza jediného sirného derivátu glykolurilu - dithiodifenyglykolurilu. Thiocucurbiturily nejsou zmiňovány vůbec. Využití připravených derivátů sirných glykolurilů pro syntézu thiocucurbiturilů je předmětem dalšího zkoumání.



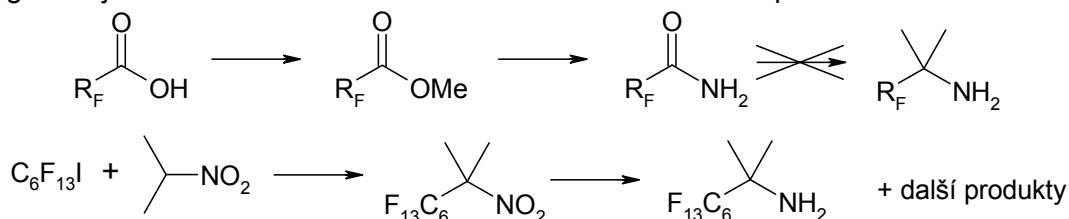
Sekce : Organická chemie M1

Fluorové aminy s terciární polyfluoralkylovou skupinou

Autor: Ladislav Plaček
Ročník: M1
Ústav: Organické chemie
Školitel: doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Fluorové NHC ligandy zlepšují stabilitu a katalytickou účinnost katalyzátorů pro metatezi alkenů a umožňují jejich recyklaci pomocí fluorových separačních metod. Klíčovými prekurzory pro přípravu nových typů NHC ligandů jsou fluorované primární aminy substituované terciární alkylovou skupinou. Studoval jsem dvě syntetické cesty přípravy těchto aminů, a to jednak reakci methylceriumchloridu s deriváty fluorovaných karboxylových kyselin, jednak přípravu a redukci odpovídajících nitrosloúčenin. V případě první cesty jsem nejdříve syntetizoval amidy a nitrily fluorovaných karboxylových kyselin. Reakcí amidů byla získána pouze složitá směs produktů, reakcí nitrilů byl získán neznámý produkt obsahující tři perfluoralkylové skupiny.

V rámci druhé cesty jsem nejprve připravil 2-nitro-2-(perfluorhexyl)propan. Jeho katalytickou hydrogenací jsem z důvodu nízké konverze získal složitou směs produktů.

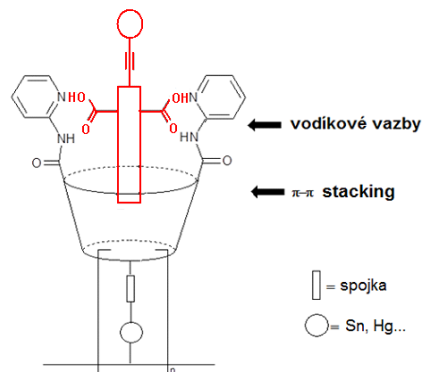


Sekce : Organická chemie M1

Nosiče molekulárních rotorů na bázi calix[6]arenů

Autor: Barbora Podlešáková
Ročník: M1
Ústav: Organické chemie, Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i.
Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc., Ing. Miroslav Dudič, Ph.D. (ÚOCHB)

Cílem práce je jak syntéza vhodně substituovaného calixarenu (molekulárního nosiče), který bude schopen komplexovat tzv. molekulární rotor (sloučenina dipólového charakteru). Takto vytvořený systém by mohl tvořit monovrstvu, kde jsou molekulární rotory v trigonálním uspořádání (jedna z nutných podmínek pro vznik ferroelektrického materiálu). V první fázi tohoto projektu byl připraven tri-*terc*-butyl-hexamethoxycalix[6]aren, hlavní prekurzor pro přípravu modelové látky, která bude využita při ^1H NMR studiích interakce calixaren-molekulární rotor. Optimalizací celého procesu, který je kombinací konvenční a mikrovlnné syntézy, byla vypracována metoda, která je velmi robustní a finální produkt je izolován s využitím minima purifikačních kroků.



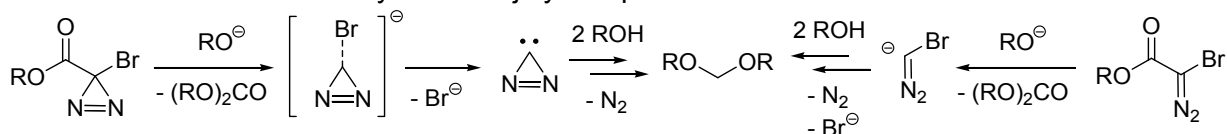
Sekce : Organická chemie M1

Bromdiazirinylový aniont - komplex diazirinylidenu a bromidového iontu

Autor: Bc. Eva Hanzlová
Ročník: M2
Ústav: Organická chemie
Školitel: Ing. Tomáš Martinů, Ph.D.

3-Brom-3-karbalkoxydiaziriny reagují s alkoxidy ve smyslu acylové nukleofilní substituce za vzniku příslušných karbonátů ve vysokém výtěžku. Kvantově-chemické výpočty ukazují, že odstupující skupinou při této reakci je 3-bromdiazirinylový aniont. Při spontánní disociaci této částice v polárním prostředí pravděpodobně vzniká diazirinyliden (CN₂), dosud nepopsaný, strukturně jednoduchý cyklický singletový karben. Je-li alkoxidové štěpení diazirinu provedeno za přítomnosti alkoholu, je vedle nezměněného množství karbonátu získán rovněž dialkoxymethan, očekávaný rozkladný produkt zachycení diazirinylidenu systémem alkoxid/alkohol.

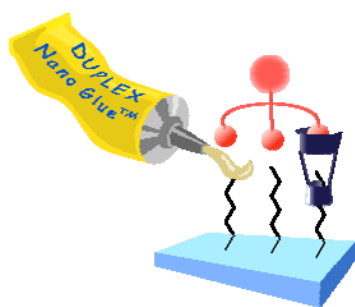
Alkyl-bromdiazaoacetáty, valenční izomery uvedených diazirinů, rovněž reagují s alkoxidy/alkoholy za vzniku karbonátu a dialkoxymethanu, avšak podle kvantově-chemických výpočtů je příslušný intermediát acylové nukleofilní substituce, bromdiazomethylový aniont, klasickým karbaniontem, který na rozdíl od bromdiazirinylového aniontu spontánně nedisociuje na příslušný karben. Při reakci diazoacetátů je proto mechanismus vzniku dialkoxymethanu jiný než při reakci diazirinů.



Sekce : Organická chemie M1

Self-assembly na tuhých površích: duplexní cyklodextriny jako molekulární lepidlo

Autor: Petr Koutník
Ročník: M2
Ústav: Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i.
Školitel: Mgr. Tomáš Kraus, Ph.D.



Byl syntetizován a izolován dimerní cyklodextrin spojený dvěma disulfidickými vazbami, odvozený od nativního α- a β-cyklodextrinu. Tento duplexní cyklodextrin byl poté použit jako divalentní supramolekulární spojka (molekulární lepidlo) mezi monomolekulární vrstvou kovalentně vázanou na tuhém povrchu a adamantylovými skupinami připojenými k fluorescenční značce, která umožňuje vizualizaci této nekovalentní interakce. Byly též nalezeny vhodné podmínky pro přípravu jednoduchých a směsných monomolekulárních vrstev na bázi (glycidyloxypropyl)trimethoxysilanu a (n-oktyl)trimethoxysilanu s využitím samoskladby na tuhém povrchu. Při řešení byly použity techniky supramolekulárního micro-contact printingu, fluorescenční mikroskopie a AFM.

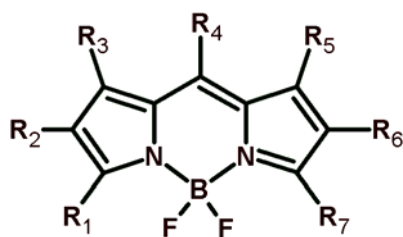
Sekce : Organická chemie M1

Nové BODIPY farbivá a ich využitie

Autor: Michal Pozník
Ročník: M1
Ústav: Organická chemie
Školitel: prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

BODIPY fluorescenčné farbivá napriek tomu, že ich základná štruktúra je známa už relatívne dlho, predstavuje pre svoje pestré aplikácie stále atraktívnu oblasť záujmu. Medzi ich hlavné výhody patrí dobrá tónovateľnosť, vysoké kvantové výťažky a stabilita.

Vo svojej práci som sa zaoberal prípravou nových BODIPY fluorescenčných farbív pre rôzne využitia. Pripravil som BODIPY s veľkou vlnovou dĺžkou absorpcie a emisie na možné pripojenie ako značidla v biologických systémoch. Rovnako som pripravil BODIPY s konjugovanými dvojitémi väzbami, ktorých katalytickou epoxidáciou a tým narušením konjugácie sme dosiahli zmenu farby. Túto zmenu som úspešne aplikoval na štúdium kinetiky dejov prebiehajúcich v porfyrínových rotaxánoch. Moje momentálne štúdium sa zaoberá syntézou doposiaľ nepripravených kondenzovaných diBODIPY derivátov.

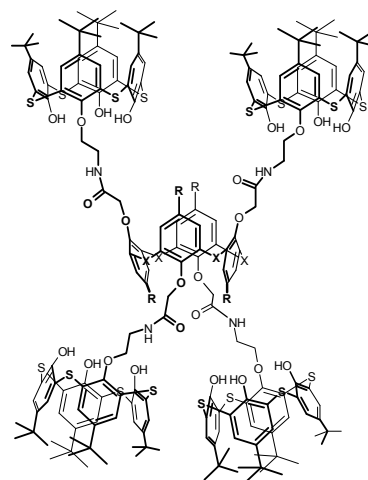


Sekce : Organická chemie M2

Design a syntéza dendritických štruktúr na bázi thiacalix[4]arenů

Autor: Jan Holub
Ročník: M1
Ústav: Organické chemie
Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Thiacalix[4]areny jsou zajímavou skupinou organických látek vykazující výjimečné komplexační vlastnosti, díky nimž mohou interagovat jak s neutrálními molekulami, tak i s ionty. Na základě komplexačních studií prováděných na jednoduchých thiacalix[4]arenech byly navrženy a syntetizovány oligo-(thia)calix[4]areny v konické a 1,3-alternující konformaci, u kterých očekáváme vyšší hodnoty asociačních konstant. Kromě těchto oligocalixarenů byly připraveny i deriváty PAMAM dendrimerů s vnitřní thiacalix[4]arenovou funkcionalizací. Dalším cílem této práce je derivatizace periferních skupin PAMAM dendrimerů, které mohou nabízet řadu zajímavých vlastností, a to nejen komplexačních.

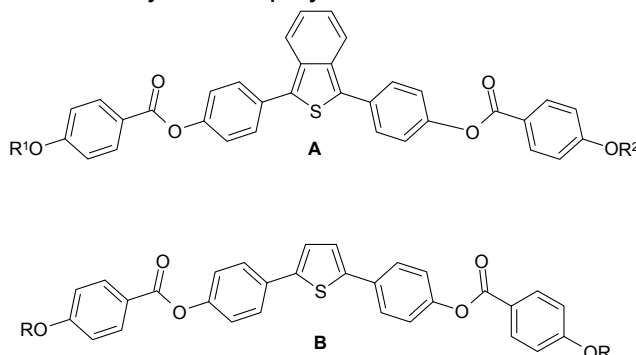


Sekce : Organická chemie M2

Nový typ kapalných krystalů lomeného tvaru

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

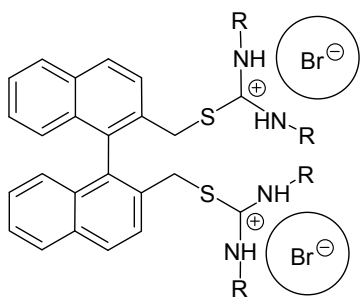
V rámci výzkumu nových kapalných krystalů lomeného tvaru a v návaznosti na zjištěné mesomorfní chování látek odvozených od benzo[c]thiofenu (struktura **A**) vykazujících přes jejich lomenou strukturu typické calamitické fáze. Ve své práci zabývám syntézou nové řady lomených kapalných krystalů, kde centrální jádro představuje 2,5-difenylthiofen (struktura **B**). Jako koncová ramena byly použity p-alkoxybenzoáty nesoucí jak dlouhé (C_{10} , C_{12} , C_{14}), tak i krátké (C_2 , C_3 , C_4) terminální alkylové skupiny.



Sekce : Organická chemie M2

Příprava isothiuroniových solí

Autor: Eva Konečková
Ročník: M1
Ústav: Organická chemie
Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.



Thiomočoviny jsou známé svou schopností vázat některé anionty lépe než příslušné močoviny. Konkrétně například tetraedrické anionty - fosfát, sulfát. Pro zlepšení komplexačních schopností byly syntetizovány isothiuroniové soli, u kterých je posílena komplexační schopnost přítomností alkylu na atomu síry, což zvyšuje kyselost atomů vodíku na atomech dusíku a zvyšují se komplexační schopnosti ligandu. Tato skutečnost byla již studována a potvrzena. Další využití thiomočoviny našly jako katalyzátory enantioselektivních syntéz. Molekuly nesoucí isothiuroniové jednotky by měly,

v porovnání s příslušnými thiomočoviny, být lépe rozpustné v polárních rozpouštědlech. Moje práce se zabývá syntézou thiomočoviny a následně isothiuroniových solí pro jejich další použití např. pro komplexaci aniotů nebo pro použití jako katalyzátory při enantioselektivních syntézách. V připravovaných strukturách jsem se zaměřila na zavedení známého chirálního prvku - binaftalenu, který je velmi často používán pro vnesení chiralitu do různých molekul.

Sekce : Organická chemie M2

Optimalizace syntézy deschlorhalopemidů

Autor: Anna Šuláková

Ročník: M1

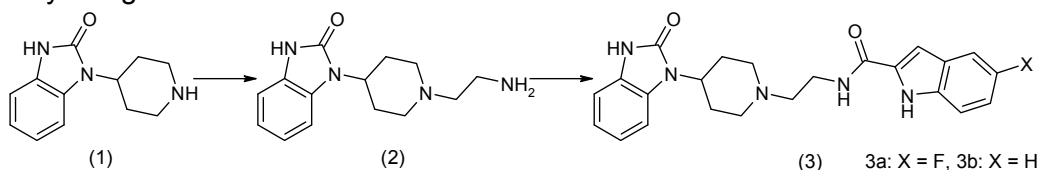
Ústav: Organické chemie

Školitel: Ing. Michal Himl, Ph.D., doc. Ing. Igor Linhart, CSc.

Deschlorhalopemidy byly identifikovány jako velmi účinné a selektivně působící inhibitory fosfolipasy D - enzymu, který je zapojen do mnoha významných vnitrobuněčných procesů. Jeho činnost je spojována s růstem rostlinných buněk, ale také se zánětlivými pochody a procesy šíření rakovinných buněk u vyšších živočichů.

Cílem práce bylo na základě neúplného popisu přípravy látky v literatuře navrhnout a optimalizovat syntézu 5-fluor-2-indolyldeschlorhalopemidu (3a) a připravit také jeho analog 2-indolyldeschlorhalopemid (3b). Byly optimalizovány reakční podmínky, izolace meziproductů i finálního produktu. Důraz byl kladen zejména na volbu vhodného kondenzačního činidla.

Syntéza vycházela z komerčně dostupného 4-(2-oxobenzimidazolin-1-yl)piperidinu (1). Jeho *N*-alkylací *N*-Boc-2-bromethylaminem a následným odstraněním chránicí skupiny byl připraven meziproduct (2). Jako kondenzační činidlo vhodné pro kondenzační reakci intermediárního aminu (2) s příslušnými indolkarboxylovými kyselinami se osvědčil 1,1'-karbonyldiimidazol. Obě látky byly syntetizovány pro testy inhibice růstu rostlin v rámci výzkumu fyziologie rostlin.



Sekce : Organická chemie M2

SADDLEQUAT: DFT výpočet a realita

Autor: Bc. Lukáš Severa

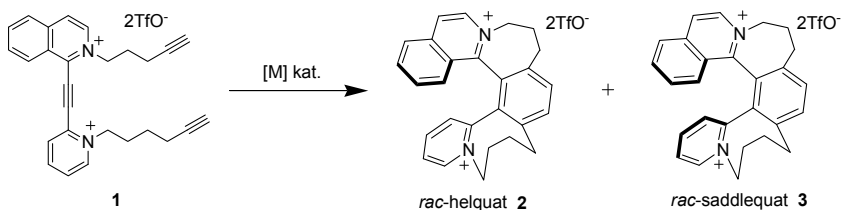
Ročník: M2

Ústav: Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i.

Školitel: Mgr. Filip Teplý, Ph.D. (ÚOCHB)

V naší skupině byla nedávno vyvinuta robustní syntéza nové skupiny helikálních dikationtů, tzv. helquatů. Při kvantově-chemickém modelování jejich racemizačního procesu jsem zjistil, že u některých struktur je sedlová struktura mezi *P* a *M* helixem minimem natolik hlubokým, že se dalo uvažovat o případné izolaci této látky. Látku sedlové struktury se nám nakonec skutečně podařilo připravit, dokonce ve dvou případech. Například při [2+2+2] cykloizomeraci triynu **1** vzniká směs helikální látky **2** a sedlové látky **3** - tzv. saddlequat.

Saddlequat **3** se podařilo izolovat, rozštěpit na enantiomery, strukturu potvrdit pomocí X-ray difrakce a termicky ho převést na helquat **2** - jak jsem výpočetně předpověděl - bez ztráty chirální informace.

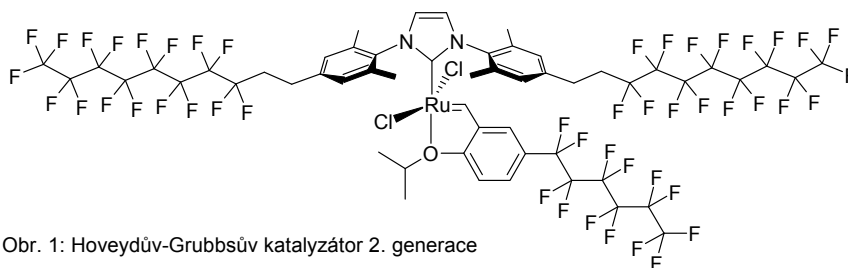


Sekce : Organická chemie M2

Hoveydovy-Grubbsovy komplexy modifikované fluorovými NHC ligandy

Autor: Vendula Kelbichová
Ročník: M2
Ústav: Organická chemie
Školitel: doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Ve své práci se zabývám přípravou a komplexací fluorových N-heterocyklických karbenových (NHC) ligandů a jejich reakcemi s rutheniovými komplexy s cílem získat katalyzátory metateze alkenů, které by bylo možno recyklovat fluorovými separačními metodami. Nejprve jsem připravila vhodné imidazoliové soli, které jsem deprotonací s terc-pentylalkoholátem draselným v hexanu převedla na karbeny. Jejich reakcí s Grubbsovým katalyzátorem 1. generace a následnou reakcí s vhodně substituovanými styreny jsem získala Hoveydovy-Grubbsovy katalyzátory 2. generace (Obr. 1). Aktivitu připravených katalyzátorů pro modelové metateze s uzavřením cyklu jsem sledovala s využitím různě substituovaných diethyl-diallylmalonátů. Studovala jsem i možnost recyklace katalyzátoru s využitím fluorové separace na pevné fázi.



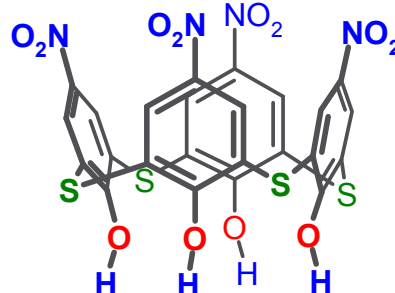
Obr. 1: Hoveyduv-Grubbsuv katalyzátor 2. generace

Sekce : Organická chemie M2

Základní transformace tetranitrothiacalix[4]arenu

Autor: Michaela Mačková
Ročník: M1
Ústav: Organická chemie
Školitel: Ing. Michal Himl, Ph.D.

Využití thiacalixareňů pro syntézu složitějších supramolekulárních systémů je mnohdy znemožněno díky chybějící metodice transformací jejich základního skeletu. V literatuře popsány 5,11,17,23-tetranitrothiacalixaren-25,26,27,28-tetraol by tak byl, z důvodu své velmi špatné rozpustnosti, jen zajímavá molekula bez dalšího syntetického využití. Zavedením alkylových řetězců na spodní okraj tohoto tetranitrothiacalix[4]arenu by se nejen zvýšila jeho rozpustnost, ale dal by se také lépe využít pro následné transformace jeho horního okraje. Cílem práce bylo vypracovat metodu pro přípravu tetraalkylovaných derivátů, provést redukci nitroskupin a vzniklé tetraaminoderiváty transformovat na příslušné močoviny, Schiffovy báze, isokyanáty, apod., které budou následně dále zkoumány.



Sekce : Organická chemie M3

Použití konjugátů cyklodextrinů s isoalloxazinem ke katalýze

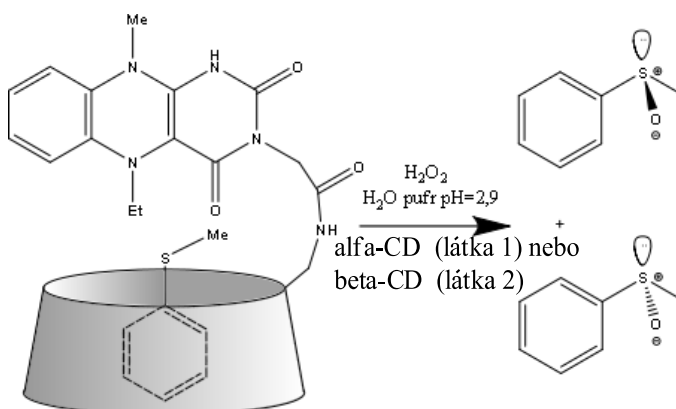
Autor: Vladimír Herzig

Ročník: M2

Ústav: Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i.

Školitel: doc. Ing. Radek Cibulka, Ph.D., Mgr. Tomáš Kraus, Ph.D. (ÚOCHB AV ČR)

Flaviny jsou známé svou schopností katalyzovat oxidaci organických sulfidů na sulfoxidy peroxidem vodíku. Připojení cyklodextrinových makrocyklů k molekulám flavinu umožňuje katalyzátorům vytvářet inkluzní komplexy se substráty, což ovlivňuje stereoselektivitu jimi katalyzovaných reakcí a navíc umožňuje provedení ve vodném prostředí. Zatím byly mnou testovány a připraveny dva katalyzátory odvozené od derivátů alfa- a beta-cyklodextrinu (CD) spojené amidovou vazbou s flavinem. Beta-CD konjugát (látko 1) byl použit na oxidaci aryl(methyl)sulfidů a alfa-CD konjugát (látko 2) na oxidaci alkyl(methyl)sulfidů. Oba vykazují značné katalytické účinky pro řadu substrátů a enantiomerní přebytky vzniklých sulfoxidů. Nejlepšího výsledku bylo dosaženo v případě *p*-tolyl(methyl)sulfidu v přítomnosti 1 mol% konjugátu (látko 1) (konverze 95% za 2 h, ee 41%).



Sekce : Organická chemie M3

Syntéza supramolekulárních receptorů vhodných pro modifikaci silikagelů

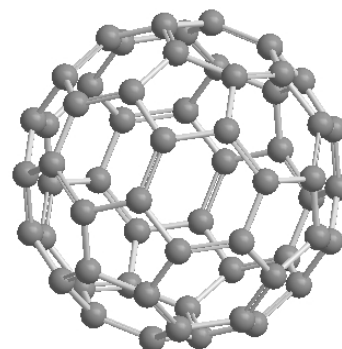
Autor: Jan Slavíček

Ročník: M1

Ústav: Organické chemie

Školitel: Ing. Michal Himl, Ph.D.

Dnešní doba klade vysoké nároky na vývoj nových materiálů, léčiv, kosmetických přípravků, dalších nových produktů a technologií. Ve středu zájmu se objevují fullereny, jejichž masovému využití brání vysoká cena, která je spojena s procesem jejich výroby a separace. Tato práce se zabývá syntézou supramolekulárních receptorů na bázi calix[n]arenů, porfyrinů a jejich modifikací pro snadné kotvení na silikagel. Takto modifikovaný silikagel bude primárně využíván pro separaci fullerenu metodou kapalinové chromatografie. Cílem této práce je zvýšit účinnost/rychlost a snížit náročnost separace hlavně vyšších fullerenu, které jsou dnes využívány minimálně oproti nejběžnějšímu fullerenu C_{60} .

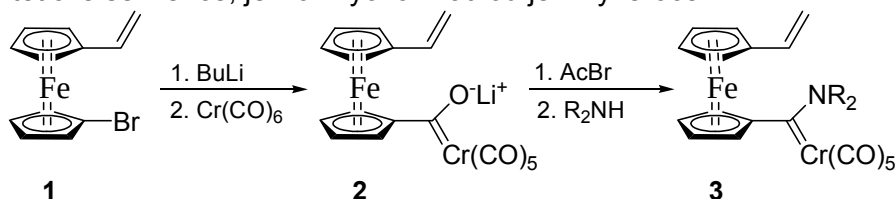


Sekce : Organická chemie M3

Příprava aminokarbenových komplexů ferocenu

Autor: Ivana Jurásková
Ročník: M1
Ústav: Organická chemie
Školitel: prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.

Fisherovy karbenové komplexy jsou důležitými reaktanty v mnoha organických syntézách. Cílem práce je příprava aminokarbenových komplexů (**3**) odvozených od 1'-vinylferocenu. Tyto komplexy vznikají reakcí $\text{Na}_2[\text{Cr}(\text{CO})_5]$ s příslušnými terciárními amidy 1'-vinyl-1-ferocenkarboxylové kyseliny, avšak ve velmi nízkém izolovaném výtěžku. Proto byl hledán jiný způsob přípravy, který by tento problém eliminoval. Vhodným postupem se ukázala reakce 1-lithio-1'-vinylferocenu s $\text{Cr}(\text{CO})_6$, která vede ke vzniku lithné soli (**2**). Acetylací této soli acetylbromidem vzniká acyloxykarbenový komplex, který nukleofilní substitucí vhodným aminem poskytuje aminokarbenový komplex (**3**). Využití této reakce navíc umožňuje zkrácení syntetické sekvence, jelikož výchozí látkou je vinylferocen.



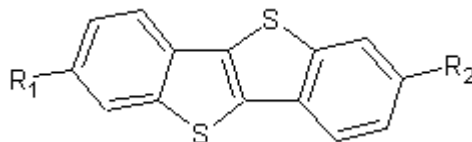
Sekce : Organická chemie M3

Syntéza kondenzovaných heterocyklických sloučenin pro použití v elektronice

Autor: Ondřej Píša
Ročník: M1
Ústav: Organická chemie
Školitel: Ing. Václav Kozmík, CSc.

OFET (Organic Field-Effect Transistors) představují do budoucna levnou alternativu za současně používané polovodičové materiály na bázi amorfního křemíku. Výhoda spočívá zejména v tom, že metody zpracování nevyžadují vysoké teploty, a ve snadné modifikaci sloučenin, která nabízí širší variabilitu vlastností.

Současný výzkum se soustřeďuje na syntézu materiálů s vysokou vodivostí, stabilitou, dobrou rozpustností atp. Jako slibné materiály se ukázaly 2,7-dialkylbenzothienobenzothiofeny (BTBT), které byly již dříve připraveny v naší laboratoři. V rámci dalšího studia této skupiny sloučenin jsem se zabýval syntézou a reaktivitou derivátů BTBT s cílem získat nové sloučeniny s potenciálním využitím v elektronice.

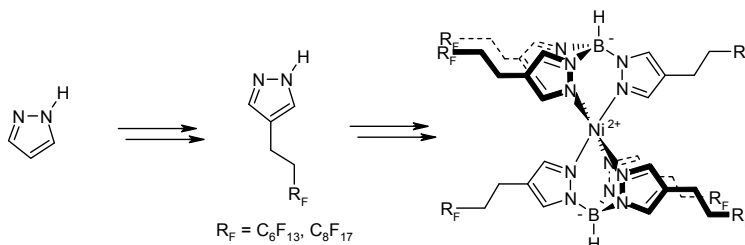


Sekce : Organická chemie M3

Tripyrazol-1-ylboráty (šcorpionáty) s polyfluorovanými řetězci

Autor: Marie Dymičová
Ročník: M2
Ústav: Organická chemie
Školitel: doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Šcorpionáty jsou novou skupinou ligandů isoelektronickou s cyklopentadienidy. Jodací pyrazolu v poloze 4, ochráněním NH funkce tritylovou skupinou, následnou Heckovou reakcí s (perfluor-alkyl)etheny, deprotekcí a redukcí dvojné vazby polyfluoralkenylového substituentu jsem syntetizovala klíčové intermediáty, 4-[2-(perfluoralkyl)ethyl]pyrazoly. Jejich reakcí s NaBH_4 nebo KBH_4 v tavenině jsem získala cílové fluorové tripyrazolylboráty. Takto připravené šcorpionáty jsem dále podrobila reakcím se solemi přechodných kovů za vzniku sandwichových oktaedrických komplexů s vysokou fluorofilitou. Získané komplexy jsou potenciální katalyzátory recyklovatelné pomocí fluorových separačních metod.

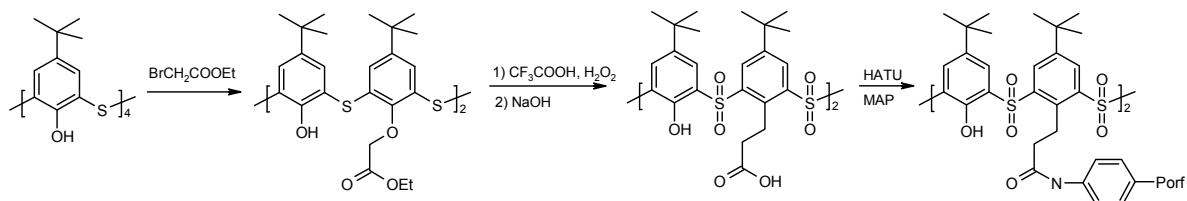


Sekce : Organická Chemie M3

Syntéza amidů na spodním okraji sulfinyl- a sulfonyl-calix[4]arenu: cesta k novým molekulárním pinzetám

Autor: František Stejskal
Ročník: M2
Ústav: Organická Chemie
Školitel: prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Zavedením porfyrinových kruhů do skeletu calix[4]arenu lze získat tzv. molekulární pinzetu použitelnou pro selektivní rozpoznávání molekul fullerenu. Cílem tohoto projektu je vyvinout metodiku přípravy amidů na spodním okraji sulfinyl a sulfonylcalix[4]arenu a syntézu receptorů s monoaminoporfyrinem. Doposud nebyly publikovány žádné způsoby této derivatizace a prvotní experimenty ukázaly, že klasické metody (např. přes acylchlorid) selhávají, zaměřili jsme se tedy na použití moderních amidačních činidel (PyBop, PyBrop, HATU, HBTU a TBTU). U připravených receptorů je zkoumána schopnost komplexace fullerenu. Schéma vyjadřuje postup přípravy výchozí látky a způsob amidace spodního okraje sulfonylcalix[4]arenu.

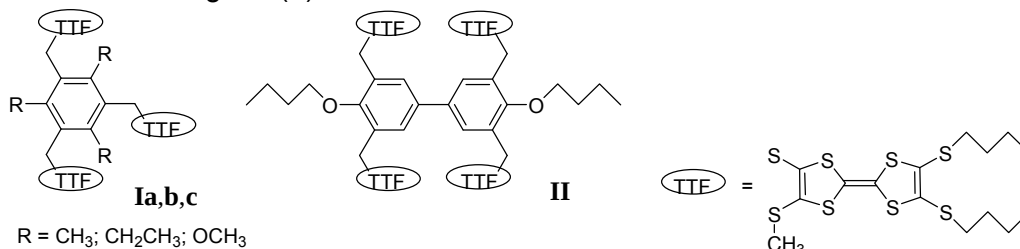


Sekce : Organická chemie M3

Elektron-donorové ligandy s TTF-skupinami

Autor: Bc. Jan Holec
Ročník: M1
Ústav: Organická chemie
Školitel: Dr. Ing. Jana Hodačová

Tetrathiafulvalen a sloučeniny z něj odvozené (TTF- deriváty) jsou často užívanými stavebními prvky v supramolekulární chemii. Tetrathiafulvalenové jádro je elektronově bohaté a tak TTF-deriváty jsou schopny interakce s elektron-deficitními systémy. Pro studium komplexace elektronově chudých molekul fullerenu byla navržena série ligandů, v nichž z centrální jednotky vychází několik ramen, nesoucích TTF-jednotky. Tyto ligandy jsou snadno dostupné reakcemi TTF-monothiolátu, který je in situ generován bazickým štěpením kyanoethylsulfanylové skupiny TTF-prekursoru, s brommethylovými skupinami centrálních aromatických jednotek. Příklady syntetizovaných sloučenin jsou tři tridentální ligandy (Ia,b,c) a jeden tetradentální ligand (II).



Sekce : Syntéza a výroba léčiv I

Název Separace biomarkerů z kondenzátu vydechovaného vzduchu pomocí magnetických nanočástic práce

Autor: Erika Gedeonová
Ročník: B1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Kamila Syslová, doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Současná diagnostika Asthma Bronchiale je založena na metodách semi-invazivních až invazivních. Předkládaná práce se zabývá vývojem alternativní cesty současných diagnostických postupů, kterou lze charakterizovat jako naprosto neinvazivní. Popisovaná metoda je založena na kvantifikaci specifických látek (tzv. biomarkerů) v kondenzátu vydechovaného vzduchu. Koncentrační hladiny těchto biomarkerů jsou v důsledku patologických procesů probíhajících v plicích významně zvýšeny. Předkládaná práce se zabývá přípravou a charakterizací imunomagnetických nanočástic, které slouží k separaci biomarkerů Asthma bronchiale (cysteinylovaných leukotrienů) z kondenzátu vydechovaného vzduchu. Principem separace je specifická reakce monoklonální protilátky, zakotvené na magnetické částici, s příslušným antigenem (= biomarkerem) za vzniku komplexu, který je separován pomocí vnějšího magnetického pole. Detekce je následně realizována vysoce citlivou a selektivní metodou hmotnostní spektrometrie. Vyvinutá metoda je charakterizovatelná vysokou citlivostí, nízkou chybou stanovení a v neposlední řadě v sobě zahrnuje i možnost vývoje biočipu pro automatické, rychlé a na obsluhu nenáročné řešení uvedeného diagnostického principu.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv I

Screening markerov pľúcnych onemocnení a monitorovanie ich cirkadiálnych rytmov

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

Pľúcne onemocnenia je možné identifikovať už v ranom štádiu pomocou kvantitatívnej analýzy doprovodných metabolitov vzniknutých pri ochorení, tzv. biomarkerov. V tomto prípade sa jedná predovšetkým o radu aldehydov, ktoré v tele vznikajú ako produkty peroxidácie fosfolipidov na membránach buniek vplyvom voľných kyslíkových radikálov (reactive oxygen species – ROS).

Predložená práca sa zaoberá vývojom multimarkerového screeningu pre identifikáciu a kvantifikáciu markerov pľúcnych onemocnení (azbestóza, silikóza) pomocou LC-MS. Vyvinuté metódy pre stanovenie markerov sa dajú charakterizovať vysokou presnosťou, nízkymi limitami detekcie a kvantifikácie a vysokým výťažkom analytickej metódy. Boli testované dva spôsoby derivatizácie aldehydov pomocou 2,4-dinitrofenylhydrazínu a Girardova činidla T, pre ktorý sa analytická metóda ukázala približne osemkrát citlivejšia. Súčasťou práce je taktiež klinická štúdia, ktorá overila vhodnosť metódy pri diagnostike oxidatívneho stresu.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv I

Příprava analogů pikoplatiny, cytostatika 4. generace

Autor: Michaela Hrdá
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Jitka Housková, doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Předkládaná práce je orientována do oblasti přípravy analogů platinových komplexů s cytostatickou aktivitou. Jednou z nadějných sloučenin překonávající rezistenci nádorových buněk na cisplatinu je komplex *cis*-[Pt(NH₃)(2-methylpyridin)Cl₂], označovaný jako pikoplatina. Jednou z nevýhod terapeuticky používaných platinových komplexů je jejich nízká rozpustnost ve vodě, která je např. u pikoplatiny nižší než 1 g/l. Cílem této práce bylo hledání nových a patentově volných analogů pikoplatiny, které by měly stejnou aktivní formu di-aquakomplexu, ale vyšší rozpustnost ve vodě. Byly navrženy tři nové platinové komplexy, které v literatuře nebyly dosud popsány (absence CAS RN): *cis*-[Pt(NH₃)(2-methylpyridin)dimesylát], *cis*-[Pt(NH₃)(2-methylpyridin)ditosylát] a *cis*-[Pt(NH₃)(2-methylpyridin)oxalát]. Příprava těchto komplexů byla realizována s využitím stříbrných solí příslušných ligandů. Pozornost byla zaměřena na přípravu těchto nových látek ve vysoké čistotě a jejich charakterizaci. Značná pozornost byla věnována vývoji nové metody odstranění zbytkového stříbra z připravených produktů s využitím směsného iontoměníče v H⁺/OH⁻ cyklu v kombinaci s aktivním uhlím a ultrafiltrací. Možný obsah stříbra v konečném produktu *cis*-[Pt(NH₃)(2-methylpyridin)oxalát] je méně než 5 ppm, což je hodnota umožňující použití této látky jako API v injekční lékové formě.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv I

Matematické modelování mísení práškových směsí v rotačním mísiči

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

Práce je zaměřena na popis kinetiky mísení práškových směsí pevných lékových forem v rotačním mísiči buňkovým modelem. Model parametrizuje základní vlastnosti mísené směsi a pracovní podmínky homogenizátoru (stupeň zaplnění mísiče, frekvenci otáčení a případně další konstrukční parametry) a v závislosti na nich popisuje mísení.

2D model radiálního mísení v homogenizátoru byl vytvořen v programovacím nástroji MATLAB. Byla využita metoda konečných prvků, na jejímž základě byl homogenizátor rozdělen na optimální počet izoparametrických buněk. Program je schopen rozlišit prázdné buňky od zaplněných a u zaplněných buněk rozeznat, zda náleží ke statické nebo dynamické oblasti mísení pomocí analýzy působení gravitační, tlakové a odstředivé síly. Program také analyzuje jednotlivé dílčí toky z buňky do buňky včetně jejich směru na základě vzájemného silového působení.

Dále bylo připraveno experimentální zařízení pro laboratorní studium vlivu parametrů na průběh homogenizace a jeho funkce byla odzkoušena na modelových experimentech. Výsledky těchto experimentů byly kvalitativně porovnány s modelem, přičemž byla pozorována shoda trendů v experimentálních a simulovaných datech.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv I

Příprava syntetických vonných látek aldolovou kondenzací

Autor: Bc. Lucie Makovcová
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Iva Paterová, Ph.D.

Předkládaná práce se zabývá aldolovou kondenzací benzaldehydu s acetonem. Žadáným produktem této syntézy je benzylidenaceton, jehož následnou hydrogenací vzniká vonná látka benzylaceton, která má rozsáhlé využití v parfumářském průmyslu.

Kondenzace benzaldehydu s acetonem může být katalyzována jak bazicky, tak kysele. Obvykle je homogenně katalyzována hydroxidem sodným. Těžiště této práce spočívá v přípravě benzylidenacetonu na pevných katalyzátorech. Byla studována možnost nahrazení homogenního katalyzátoru kyselými heterogenními katalyzátory zeolitového typu.

V sérii experimentů byl nejprve vybírán vhodný kyselý katalyzátor, který byl použit pro další optimalizaci reakčních podmínek. Byl sledován vliv teploty, molárního poměru výchozích látek a použitého rozpouštědla na průběh reakce.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv I

Příprava polymerních částic pro separaci biomarkerů z tělních tekutin

Autor: Annamarie Némethová
Ročník: B3
Ústav: Organické technologie
Školitel: doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Předkládaná práce se zabývá vývojem molekulární diagnostické sondy pro rychlou separaci, identifikaci a kvantifikaci specifických látek - „biomarkerů“ vyskytujících se v tělních tekutinách (kondenzát vydechaného vzduchu, moč, krevní plazma). Princip metody zahrnuje vysoce specifickou separaci biomarkerů plicních onemocnění (8-isoprostanu, 8-hydroxyguanosinu a dalších), založenou na reakci monoklonální protilátky, která je zakotvená na polymerní čočce s příslušným antigenem. Detekce biomarkerů je následně realizována vysoce citlivou a selektivní metodou na bázi hmotnostní spektrometrie. V neposlední řadě v sobě metoda zahrnuje i možnost vývoje diagnostického proužku pro rychlé, orientační a na obsluhu nenáročné řešení uvedeného diagnostického principu i pro laickou veřejnost.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv I

Příprava platinových sloučenin s 1R,2R-diamincyklohexanovým ligandem jako prekurzorů moderních cytostatik

Autor: Iva Nováková
Ročník: B3
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Jitka Housková, doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Předkládaná práce je orientována do oblasti přípravy platinových komplexů s 1R,2R-diamincyklohexanovým ligandem (DACH). Sloučeniny tohoto typu jsou používány jako výchozí látky při výrobě cytostatik 4. generace, například oxaliplatiny nebo komplexu AP5346.

Nevýhodou současně používaných výchozích látek (DACHPtCl₂ a DACHPtI₂) je jejich velice nízká rozpustnost ve vodě, která nepřesahuje 0,3 g/l. Práce je proto zaměřena na přípravu komplexů DACHPtY s variabilními odstupujícími ligandy, které mají vyšší vodorozpustnost. Výchozí látkou při přípravě těchto látek je komerčně dostupný DACHPtCl₂, který reakcí s příslušnou stříbrnou solí poskytuje požadovaný platinový komplex. Byly připraveny komplexy DACHPtBr₂, DACHPtF₂, DACHPt(dimethansulfonát), DACHPt(ditoluensulfonát) jako potenciálně využitelné alternativy v průmyslové praxi. Jelikož nejsou v literatuře známa data o krystalových strukturách těchto typů sloučenin, byly připraveny roztoky komplexů ke krystalizaci a metodou RTG difrakce byl již změřen monokrystal DACHPtI₂. Připravený komplex DACHPtF₂ pak představuje zcela originální sloučeninu, která je proto v současné době velmi intenzivně zkoumána. Pro stanovení čistoty připravených komplexů byla vyvinuta analytická metoda HPLC-UV/VIS, pro kvalifikaci látek byly použity hmotnostně-spektroskopické metody.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv I

Metoda suchých stěrů pro validaci mycího procesu farmaceutického zařízení

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

Práce je zaměřena na vývoj techniky kontroly čistoty zařízení, pro kterou je použita metoda suchých stěrů s využitím černých polyesterových utěrek. Byla navržena standardizovaná technika nanášení modelového znečištění rozpustné nebo nerozpustné substance na modelové leštěné nerezové povrchy. Pro několik vybraných léčivých přípravků nebo léčivých látek byla vytvořena série modelových znečištění v rozmezí 0 – 500 $\mu\text{g}\cdot\text{dm}^{-2}$ a stanovena mez vizuální detekce znečištění. Z modelového znečištění byly získány suché stěry. Intenzita setřené kontaminace byla vždy úměrná nanášenému množství znečištění. I při nejmenší hodnotě 25 $\mu\text{g}\cdot\text{dm}^{-2}$ modelového znečištění byla patrná intenzita kontaminace, naopak u kontrolního pokusu při nulové hodnotě modelového znečištění nebyla na stěru vizuálně patrná žádná stopa znečištění. Byla vytvořena technika kvantifikace intenzity pomocí suchých stěrů s využitím počítačové analýzy obrazu. Pro provozní aplikaci se zdá být nejvhodnějším způsobem použití metody vizuálního porovnání stěru získaného v provozních podmínkách se standardním stěrem připraveným v laboratorních podmínkách metodou modelového znečištění. Bylo prokázáno, že kontrola čistoty metodou suchých stěrů byla nejméně o řád citlivější než pouhá vizuální kontrola.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv I

Teoretická studie role báze v mechanismu asymetrické transfer hydrogenace iminů

Autor: Jiří Václavík
Ročník: B3
Ústav: Organické technologie
Školitel: doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D., Ing. Marek Kuzma, Ph.D.

Potenciální rozdílná účinnost chirálních molekul (antipodů) v biologických systémech vyvolává stálou a vysokou poptávku po efektivních způsobech přípravy opticky čistých látek. Asymetrická transfer hydrogenace (ATH) je jednou z nejvýznamnějších metod katalytické enantioselektivní hydrogenace C=O a C=N dvojných vazeb poskytující ceněné chirální alkoholy a aminy. V tomto systému, jenž využívá rutheniových organokomplexů, je často využívaným zdrojem vodíku kyselina mravenčí v přítomnosti triethylaminu.

Stimulem vzniku předkládané teoretické studie bylo primární zjištění, že při použití jiných bází v H_2 -donorové směsi reakce vykazuje značné rozdíly v reakční rychlosti a stereoselektivitě, následované experimentálním důkazem vodíkové vazby mezi bází a Ru katalytickým komplexem pomocí spektroskopických metod. Předkládaná práce nabízí vysvětlení tohoto jevu pomocí DFT modelů diastereomerních transitních stavů, z nichž je patrné, že báze přítomná na Ru komplexu sterickou interferencí s aromatickým ligandem do jisté míry snižuje selektivitu reakce. Kompletní objasnění mechanismu role báze ve studovaném ATH systému přidává další možnosti optimalizace reakčních podmínek do již tak velmi rozmanitého uspořádání katalytické asymetrické redukce.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv II

Imobilizace amonium nitrátů na pevné nosiče a jejich použití pro štěpení β -pinenoxidu

Autor: Bc. Lucie Abelová
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Ivana Luštická

Heterogenizace homogenních katalyzátorů je velmi populární zejména v průmyslu. Tento proces má mnoho nesporných výhod, k těm nejdůležitějším patří jednoduchá separace z reakční směsi a možnost opětovného použití katalyzátoru.

Amonium nitráty jsou krystalické látky nabízející široké spektrum použití. Jednou z možností jejich přípravy je reakce aminu s kyselinou dusičnou. Tato práce je zaměřena na ukotvení amonium nitrátů na pevné nosiče a jejich použití jako katalyzátory pro štěpení β -pinenoxidu.

Amonium nitráty byly imobilizovány na různé typy nosičových materiálů při teplotách 20 – 80 °C. Jako rozpouštědla byla použita voda a ethanol. Uchycené množství amonium nitrátů na nosiči bylo stanoveno pomocí UV-vis spektrofotometru. Imobilizované nitráty byly použity ke štěpení β -pinenoxidu při teplotě 70 °C.

Následující experimenty budou zaměřeny především na studium katalytických vlastností imobilizovaných nitrátů a optimalizaci transformace β -pinenoxidu na perillový alkohol.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv II

Kompletní příprava magnetických nanočástic pro separaci biomarkerů z tělních tekutin

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

Předkládaná práce se zabývá přípravou maghemitových nanočástic, které jsou používány pro separaci látek specifických pro určitá onemocnění (tzv. biomarkerů) z komplexní biologické matrice (KVV, moč, krevní plazma ad.). Principem separace z matrice je vysoce specifická tvorba komplexu antigen-protilátka na povrchu připravené magnetické nanočástice, přičemž tento komplex je z roztoku snadno separován pomocí externího magnetického pole. Hlavní pozornost je v práci věnována vlivu reakčních podmínek na velikost, monodisperzitu, tvar a magnetické vlastnosti připravovaných částic. Pozornost je v rovněž věnována stabilizaci magnetických jader pomocí chitosanu či jiných polymerů a navázáním monoklonálních protilátek na stabilizované nanočástice. Pro charakterizaci vlastností připravených nanočástic jsou používány techniky jako TEM, AFM, XRD či DLS. Připravené nanočástice jsou testovány pro separaci biomarkerů z tělních tekutin pro diferenciální diagnostiku vybraných plicních onemocnění. Vyvinutá metoda je charakterizovatelná vysokou citlivostí, nízkou chybou stanovení (< 9%) a možností vícenásobného použití připravených částic. Vyvinutý diagnostický nástroj v kombinaci s LC/MS detekcí navíc vykazuje značné výhody oproti standardně používaným metodám (ELISA, ad.), jako je absence falešně pozitivních/negativních výsledků.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv II

Štěpení β -pinenoxidu

Autor: Pavla Hladíková
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Iva Paterová Ph.D.

Tato práce je součástí série prací zabývajících se vypracováním technologie výroby komerčně žádané vonné látky Mayolu. Práce byla zaměřena na štěpení β -pinenoxidu za vzniku perillového alkoholu a jeho isomerů, které jsou vhodnou výchozí surovinou pro syntézu Mayolu hydrogenací. Tato studovaná reakce může být katalyzována homogenně i heterogenně, ale z důvodu snazší separace katalyzátoru z reakční směsi byla testována katalýza heterogenní. Na základě prací dříve realizovaných na Ústavu organické technologie bylo pro štěpení β -pinenoxidu vybráno osm kyselých katalyzátorů dodaných firmou Süd Chemie. Byly modifikovány acidobazické vlastnosti těchto katalyzátorů opracováním vodní parou a kalcinací a následně byl sledován vliv na jejich aktivitu při štěpení β -pinenoxidu a selektivitu k žádaným produktům.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv II

Redukce skořicového aldehydu na skořicový alkohol

Autor: Dana Irglová
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Eliška Vyskočilová Ph.D., Ing. Iva Paterová Ph.D.

Skořicový alkohol je žádanou vonnou látkou, která se vyrábí redukcí dostupného skořicového aldehydu. Jednou z cest jeho přípravy je hydrogenace s použitím kovových nosičových katalyzátorů, jako jsou například platina či ruthenium. Při hydrogenacích je velmi důležitým aspektem selektivita vzhledem k velkému množství možných produktů. Nejvyšší selektivity ke skořicovému alkoholu je dosahováno s použitím katalyzátorů Ru-Sn, avšak cena těchto katalyzátorů nedovoluje jejich široké průmyslové využití.

V této práci byla studována jiná možnost přípravy skořicového alkoholu pomocí selektivní Meerwein-Ponndorf-Verleyovy redukce skořicového aldehydu v přítomnosti oxidů či alkoxidů kovů. Redukce byla prováděna v propan-2-olu s použitím aluminiumisopropoxidu jako katalyzátoru. Bylo zjištěno, že oproti hydrogenaci chemická redukce v tomto případě nabízí vyšší selektivitu vzhledem k žádanému alkoholu. Následně budou testovány možnosti využití i jiných, zejména heterogenních katalyzátorů.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv II

Studium základních faktorů ovlivňujících homogenitu farmaceutické směsi

Autor: Pavlína Kyselá
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: prof. Ing. Zdeněk Bělohav, CSc.

Obsahová stejnoměrnost účinné látky ve farmaceutickém přípravku je základním kritériem pro zajištění kvality výsledných produktů. Homogenity sypkých farmaceutických směsí je dosahováno v procesu mísení, kdy se míchá aktivní ingredience s pomocnými látkami podle zásad správné výrobní praxe. Na homogenitu výsledné práškové směsi má zásadní vliv velikost částic, tvar částic, způsob a doba homogenizace.

Cílem práce bylo studovat vliv různých faktorů na výslednou homogenitu práškové směsi. Pro laboratorní experimenty byl zvolen přípravek Paralen Extra, který kromě pomocných látek obsahuje dvě účinné látky paracetamol a kofein. V první fázi pokusů bylo provedeno předmísení homogenizované směsi práškového kofeinu s pomocnou látkou, dalším zkoumaným faktorem byla granulace a briketace účinných látek, dále bylo testováno síťování kompaktních účinných látek a závěrem byla analyzována doba homogenizace směsi.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv II

Vliv velikosti částic aglomerátů na homogenizaci sypkých směsí

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

Cílem práce bylo experimentálním studiem modelových směsí tvořených paracetamolem a kofeinem v podobě granulátu a briketáže zjistit, do jaké míry velikost částic aglomerátů ovlivňuje homogenizační proces. U výchozích komponent byla síťovou analýzou stanovena distribuce velikosti částic. Výchozí komponenty byly poté síťováním rozděleny do několika frakcí. S vybranými frakcemi byly provedeny homogenizační experimenty v laboratorním rotačním homogenizátoru o objemu 0,8 l. Homogenita výsledné směsi byla charakterizována pomocí relativních směrodatných odchylek obsahů složek v odebraných vzorcích. Nezbytné analýzy byly provedeny metodou HPLC. Z výsledků vyplynul výrazný vliv distribuce velikosti částic na mísení. Homogenizovaný produkt byl podroben opětovné síťové analýze a v síťových podílech bylo stanoveno složení. Výsledky těchto analýz prokázaly, že při mísení docházelo k částečné tvorbě agregátů a k částečnému rozmělnění výchozích aglomerátů vlivem otěru. Intenzita tohoto pochodu byla poměrně výrazně závislá na typu použitého aglomerátu.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv II

Derivatizace bílkovinných biomarkerů oxidativního stresu

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

Cílem práce bylo optimalizovat podmínky derivatizace biomarkerů oxidativního poškození bílkovin, vyvinout analytickou metodu pro jejich stanovení a tuto metodu validovat. Biomarkery jsou specifické látky, které vznikají při poškození buňky reaktivními kyslíkovými nebo dusíkovými částicemi (ROS/RNS). Monitorováním biomarkerů v řadě tělních tekutin (kondenzát vydechaného vzduchu (KVV), moč a krevní plasma) lze získat obraz o míře poškození organismu v důsledku působení ROS. Mezi markery oxidativního stresu řadíme 8-iso prostaglandin F_{2α}, malondialdehyd a 4-hydroxynonenal (poškození lipidů), o-tyrosin, 3-nitrotyrosin a 3-chlortyrosin (poškození bílkovin) a 8-hydroxyguanosin a 8-hydroxyguanine (poškození nukleových kyselin). Stanovení jejich koncentračních hladin může sloužit jako prostředek medicínské diagnostiky k potvrzení řady onemocnění (např. rakovina plic, azbestóza, silikóza ad.). Derivatizace biomarkerů byla provedena při různých teplotách a pH prostředí a podmínky byly optimalizovány. Analýza byla prováděna citlivou a selektivní detekční metodou na bázi hmotnostní spektrometrie, metody budou následně validovány a zkoušeny v klinické studii.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv II

Hodnocení disoluce kofeinu v závislosti na jeho formulaci

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

Rychlost uvolňování léčivých látek může být ovlivněna zejména vlastnostmi pevné fáze, jako je vzhled krystalů, amorfie, polymorfie, velikost částic, specifický povrch atd. Velký vliv mohou mít i vlastnosti aglomerátů, které se pro výrobu finálních lékových forem používají. Klasická zkouška disoluce se uplatňuje ve vývoji i kontrole kvality léčivých přípravků až na úrovni finálních lékových forem. Při vývoji formulace PLF je však užitečné znát charakteristiku disolučního chování látky v závislosti na její formě. Cílem této práce proto bylo sledovat rychlost uvolňování modelové léčivé látky - kofeinu - z různých forem částic, které se používají pro formulaci finálních lékových forem a dále nalézt vztah mezi rychlostí uvolňování látky z částice tabletoviny a z finální lékové formy. Kofein ve formě prášku, briquet a granulátu byl podroben disoluci pomocí různých technik. Byl použit přístroj pro stanovení pravé rychlosti rozpouštění podle Wooda, disoluční přístroj s průtokovou celou pro stanovení rychlosti uvolňování z částic a aglomerátů a přístroj s pádly pro stanovení rychlosti uvolňování z tablet a tobolek. Porovnáním dat z těchto technik mohl být odděleně posouzen vliv typu a vlastností aglomerátů na rychlost uvolňování kofeinu a vliv komprese aglomerátů na rychlost uvolňování kofeinu. Zobecněné výsledky provedených testů i analogické testy s konkrétními vývojovými vzorky lze využít ke snadnějšímu návrhu formulace pevné lékové formy u nově vyvíjených přípravků.

Sekce : Chemická a farmaceutická technologie

Selektivní katalytické hydrogenace anhydridu naftalen-1,8-dikarboxylové kyseliny

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

Předkládaná práce se zabývá selektivní katalytickou hydrogenací anhydridu naftalen-1,8-dikarboxylové kyseliny, jejímž produktem by měl být tzv. Naftilid, látka, která vzniká selektivní eliminací jedné oxoskupiny výchozího substrátu. Z experimentálně získaných dat je zřejmé, že není možné dosáhnout dobré konverze ani selektivity reakce s běžnými katalyzátory. Z řady testovaných katalytických systémů které byly použity (Ru/C, Rh/C, Pd/C, Pt/Al₂O₃, Raney-nikl, a CuO.Cr₂O₃.) bylo nejlepších výsledků dosahováno na katalyzátoru CuO.Cr₂O₃. Na základě těchto poznatků byly pro následující screening zvoleny katalyzátory typu Cr₂CuO₄.CuO a jejich modifikovaná analoga. V následujících experimentálních činnostech byl kladen důraz na optimalizaci procesu. Součástí experimentální činnosti byl i vývoj analytických metod pro monitorování kinetického průběhu, stejně jako nalezení vhodných charakterizačních metod katalytických systémů.

Sekce : Chemická a farmaceutická technologie

Platinové komplexy amidinů na dusíkatých heterocyklech

Autor: Tereza Loužilová
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Jitka Housková, doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

V této práci byly připravovány nové sloučeniny s potenciálně cytostatickou aktivitou, pozornost byla věnována především komplexům strukturně podobným pikoplatině. Byla použita výchozí látka K₂[PtCl₄], která reagovala s ligandem pyridin-2-karboxamidinem, pyridin-3-karboxamidinem nebo pyridin-4-karboxamidinem. Reakce komplexu s ligandem byla sledována HPLC-UV analytickou metodou. Při přípravě žádaného produktu pouhým smícháním výchozích látek bylo dosaženo pouze rovnovážné složení reakční směsi, kdy byl v produktu zastoupen výchozí komplex K₂[PtCl₄], což bylo nežádoucí vzhledem k následné nesnadné separaci platinových komplexů. Proto byla reakce upravována tak, aby tato výchozí látka nebyla v produktu zastoupena. Příprava di-aquakomplexu reakcí výchozí látky s AgNO₃ byla vhodná z hlediska zreagování veškerého K₂[PtCl₄], ovšem problémem zůstával možný obsah stříbra v produktu. Postup byl proto změněn tak, že byla hodnota pH reakční směsi upravována na předem stanovené rozmezí a tím byla postupně uvolňována amidinová báze do reakce. Dále byla zvýšena reakční teplota pro snížení reakční doby. Výsledný produkt byl finálně přečištěn pomocí směsného iontoměníče v H⁺/OH⁻ cyklu a ultrafiltrací. Připravené komplexy jsou dosud v literatuře nepopsanými látkami a budou použity ve vazebných farmakologických studiích.

Sekce : Chemická a farmaceutická technologie

Monitoring průmyslového procesu parciální oxidace uhlovodíků

Autor: Luděk Boháček
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: prof. Ing. Zdeněk Bělohav, CSc., doc. Ing. Tomáš Herink, Ph.D.

Parciální oxidace uhlovodíků (POX) je proces, při kterém se z těžkých ropných frakcí jako je visbreakingový zbytek, vakuové zbytky či černý destilát vyrábí syntézní plyn (směs oxidu uhelnatého a vodíku). Jedná se o zplyňování suroviny v přítomnosti kyslíku a vodní páry za vysoké teploty a zvýšeného tlaku. Během procesu vznikají vedlejší produkty, zejména saze, methan, sulfan a kyanidy. Na výrobně POX v Unipetrolu Litvínov se z části vzniklých sazí, na další jednotce Chezacarb, vyrábí granulované saze s obchodním názvem CHEZACARB využitelné např. jako sorbenty nebo kompozity. Nezpracované saze jsou deponovány spolu ve směsi s popílčkem z tepláren na skládce ve vytěženém dole.

Cílem práce byl detailní průzkum a zhodnocení všech sledovaných parametrů procesu POX ve společnosti Unipetrol RPA. Hlavní pozornost byla věnována analýze parametrické citlivosti zplyňovacího reaktoru (generátoru) z hlediska kvantity produkovaných sazí. Sledovanými veličinami byly především zplyňovací poměry kyslík/surovina a pára/surovina ve vztahu k produkci sazí. Dále bylo cílem práce porovnat režimy dvou ze šesti instalovaných reaktorů Shell. Reaktoru R1, který je provozován za účelem maximalizace produkce sazí určených na další přepracování a reaktoru R3, který je provozován s důrazem na minimální produkci sazí určených pro deponování.

Sekce : Chemická a farmaceutická technologie

Příprava perillyl-acetátu a jeho využití k přípravě Mayolu

Autor: Bc. Jan Holář
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Iva Paterová, Ph.D.

Tato práce vznikla ve spolupráci s firmou Aroma a.s. a zaměřuje se především na přípravu perillyl-acetátu, který dále slouží jako surovina pro syntézu Mayolu. V kosmetickém průmyslu patří Mayol k velmi žádaným vonným látkám, hlavně díky jeho květinovému aroma připomínající vůni bílých okvětních lístků a květů mnoha bylin. Postup syntézy spočívá v katalytickém štěpení β -pinenoxidu na perillyl-acetát, přičemž se reakce může být katalyzována jak heterogenně tak homogenně, dále v saponifikaci perillyl-acetátu na perillový alkohol alkalickým vodným roztokem a nakonec v hydrogenaci dvojných vazeb perillového alkoholu na výsledný Mayol. Cílem práce bylo optimalizovat reakční podmínky a navrhnout vhodné katalyzátory s ohledem na ekonomiku a výtěžek reakce.

Sekce : Chemická a farmaceutická technologie

Vliv koncentrace peroxidu vodíku a jeho potence organickými bázemi na degradaci derivátů benzaldehydu v kapalné fázi

Autor: Jiří Kovářik
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D., Ing. Jiří Švrček, Ph.D.

Práce navazuje na předchozí studie v oblasti výzkumu dekontaminačního procesu a zároveň vývoje dekontaminační metody využívající jako účinné agens páry peroxidu vodíku (VPHP = Vapor Phase Hydrogen Peroxide), zejména v jejich kombinaci s přísadkou alifatických i aromatických aminů jako základních látek potenciujících oxidační účinky peroxidu vodíku. Za účelem zobrazení mechanismů spojených s dekontaminací chemických látek pomocí peroxidu vodíku byla navržena a experimentálně testována skupina strukturně podobných modelových substrátů (substituční deriváty benzaldehydu). Cílem předkládané práce bylo studovat vliv peroxidu vodíku a jeho kombinace s triethylaminem a pyridinem na degradaci vybraných modelových substancí v kapalné fázi. Byl porovnáván vliv koncentrace peroxidu vodíku a přísadky triethylaminu a pyridinu na rychlost degradace. Byla stanovena míra degradace modelových látek v čase (vyjádřená jako konverze dané látky v čase) a identifikovány degradační produkty. Hlavním cílem práce bylo porovnat rychlost a hloubku degradace v kapalné a parní fázi (VPHP).

Sekce : Chemická a farmaceutická technologie

Cykleny a jejich použití ve farmacii

Autor: Jaroslav Pfeifer
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

V dnešní moderní medicíně se často setkáváme s látkami, které využívají prvků přechodných kovů. Takovéto látky mají své využití v medicíně, kde se hojně používají jako látky kontrastní v MRI (magnetické rezonanci). MRI se zabývá sledováním molekul vody vystaveným vnějšímu magnetickému poli. Chování molekul vody ovlivňuje přítomnost paramagnetických látek. Pro kontrastní látky se proto používá ion gadolinia. Ten je však značně toxický a proto se musí komplexovat s vhodnými ligandy. Takto vytvořené komplexy však musí být dostatečně stabilní. Jako ligandy se dnes používají deriváty 1,4,7,10-tetraazacyklododecanu (cyklenu). V této práci se budeme věnovat syntéze trisubstituovaných cyklénů, pro kterou byl vyvinut syntetický postup přípravy s eliminací následných reakcí, ke kterým dochází při použití přímé alkylace cyklenu. Tímto postupem jsme schopni připravit tris(ethyloxykarboxymethyl)cyklen v čistotě vyšší než 97%. Tento syntetický postup bude nadále rozšiřován na další deriváty cyklenu.

Sekce : Chemická a farmaceutická technologie

Strukturní vliv ligandů katalytického komplexu na asymetrickou hydrogenaci cyklických iminů

Autor: Bc. Jan Přech
Ročník: B1
Ústav: Organické technologie
Školitel: doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Polosendvičové komplexy ruthenia Noyoriho typu jsou v současné době úspěšně využívány pro asymetrickou hydrogenaci C=O a C=N dvojné vazby za vzniku chirálních alkoholů a aminů.

Studovaný katalytický komplex Noyoriho typu obsahuje dvojici ligandů. Aromatický ligand a C2 symetrický chirální mono *N*-sulfonylovaný difenylethylendiaminový ligand. Jemným laděním struktury obou ligandů je možné významně ovlivnit rychlost i selektivitu reakce, a tím optimalizovat strukturu katalyzátoru přesně pro žádaný substrát.

Předkládaná práce se zabývá srovnáním a vysvětlením vlivu struktury aromatického ligandu na průběh hydrogenace cyklických iminů v kombinaci s různými katalytickými bázemi. Dále je diskutován vliv struktury diaminového ligandu na konfiguraci produktu a aktivitu katalyzátoru pro hydrogenaci různých iminů. Bylo zjištěno, že při využití různých bazí (ve směsi s kyselinou mravenčí, která slouží jako donor vodíku) s katalyzátorem obsahujícím *p*-cymen jako aromatický ligand můžeme pozorovat významnou citlivost selektivity reakce na strukturu použité báze. Naopak při použití katalyzátoru obsahujícího benzen tento vliv mizí.

Sekce : Chemická a farmaceutická technologie

Příspěvek k řešení aktuálního problému technologie měděného nosičového katalyzátoru

Autor: Jiří Spiegl, Gabriel Toth
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: doc. Ing. Bohumír Dvořák, CSc.

Nedefinované změny v technologii komerčního měděného nosičového katalyzátoru, způsobené nahodilými neuvědomělými odchylkami od procesních podmínek, byly příčinou výrazných změn mechanických vlastností jeho tablet při jejich kalcinaci. Cílem této práce bylo na základě analýzy vlastností prekursoru katalyzátorové hmoty a finálního produktu přispět: a) k nalezení jednotkové operace a odchylek v hodnotách procesních parametrů, které mohou být příčinou nežádoucích vlastností produktu, b) k objasnění podstaty vlivu příslušného parametru na změnu mechanických vlastností prekursoru katalyzátorové hmoty.

Na základě kvalifikovaného rozboru sledu jednotkových operací v technologii katalyzátoru byla vytipována operace směsného srážení a parametr pH srážení jako potencionální příčina řešeného problému. Byla navržena pracovní hypotéza a vybrány experimentální metody k indikaci a potvrzení a) možných změn ve složení rtg. amorfního prekursoru katalyzátorové hmoty, vyvolaných změnami hodnot pH-srážení, b) souvislosti mezi složením prekursoru a stabilitou mechanických vlastností tablet při jejich kalcinaci.

Sekce : Chemická a farmaceutická technologie

Vývoj technologického postupu přípravy 6-deoxy sacharidů

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

Prezentovaná práce se zabývá výzkumem uceleného syntetického postupu přípravy 6 deoxy sacharidů. Cílem bylo nalezení patentově volné, technologicky schůdné a ekonomicky výhodné přípravy 6 deoxy hexóz - ceněných prekurzorů řady nových virostatik. Vyvinutá čtyřstupňová syntetická cesta vychází z monosacharidu jako suroviny a kombinuje silylové chránění OH skupin se selektivní bromací a parciální desilylací uhlíku C6, po níž následuje hydrogenolýza. Závěrečným krokem je pak desilylace OH skupin v polohách C1-C4.

Vyvinutá syntetická cesta se vyznačuje snadnou separací meziproduktů, vysokými výtěžky všech dílčích reakčních kroků a výbornou čistotou výsledného produktu. Tento postup lze charakterizovat vysokou univerzálností, která byla ověřena na řadě různých hexóz.

V současné době jsou v laboratorním měřítku experimentálně ověřovány alternativní způsoby redukce, jiné varianty bromáčnických činidel a další kroky zaměřené na zjednodušení průmyslové aplikace. V současné podobě je syntetický postup používán v provozním měřítku a zpracováván do formy patentové přihlášky.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Vliv vlhkosti kaučukové směsi na vulkanizační charakteristiky

Autor: Jakub Bareš
Ročník: B2
Ústav: Polymerů
Školitel: doc. Ing. Antonín Kuta, CSc., Ing. Drahomír Čadek

Vlhkost v přírodním kaučuku zhoršuje zpracovatelské chování, jako míchání a vytlačování, ale ovlivňuje i samotný průběh vulkanizace. Vlhkost doprovází přírodní kaučuk již od počátku jeho výroby, tj. od pěstitelské činnosti, přes zpracování latexu na tuhý přírodní kaučuk, až po jeho skladování.

V tomto případě je studován vliv vzdušné vlhkosti na kaučukové směsi, které se liší použitým urychlovačem sírné vulkanizace. U směsí se čtyřmi různými urychlovači - CBS, MBT, TMTD, ZDBDC - je studován vliv na samotný průběh vulkanizace. Jak je totiž v některých člancích uvedeno, tak voda obsažená v kaučukové směsi může reagovat se samotným urychlovačem. To pak může mít za následek změnu charakteru průběhu vulkanizační křivky a v extrémních případech i změnu samotných mechanických vlastností získaného vulkanizátu.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

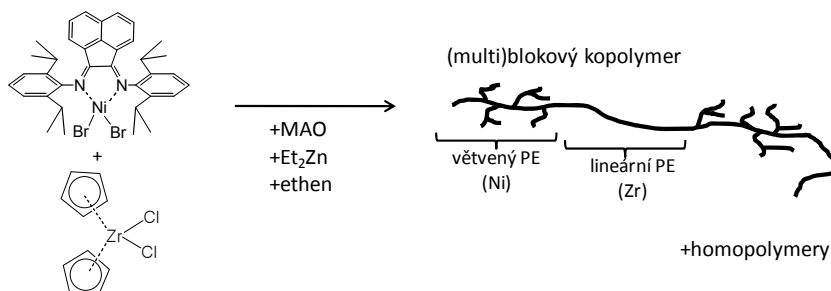
Vliv přítomnosti diethylzinku na polymerizaci ethenu katalyzovanou komplexy niklu a zirkonia

Autor: Bc. Viviana Tandlerová
Ročník: M1
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Jan Merna, Ph.D.

Jednou z možností přípravy nových materiálů na bázi polyalkenů (polyolefinů) je příprava jejich blokových kopolymerů (OBC). Tu je možné provádět pomocí živé koordinační polymerizace, která však ve srovnání s komerčními způsoby nemůže obstát kvůli nízké polymerační aktivitě dané vznikem pouze jednoho polymerního řetězce na jednu molekulu katalyzátoru. Efektivnější možností přípravy OBC je využití tzv. chain shuttling procesu využívajícího přenosu polymerních řetězců mezi dvěma katalytickými centry poskytujícími polymer s různými vlastnostmi.

Cílem této práce je studium polymerace ethenu katalyzované duálním katalytickým systémem na bázi komplexů niklu (poskytující amorfní větvený PE) a zirkonia (poskytující semikrystalický lineární PE)

v přítomnosti Et_2Zn jako přenosového činidla. Tvorba OBC byla zjišťována pomocí frakcionace a následné analýzy mikrostruktury frakcí pomocí DSC a ^1H NMR.



Sekce : Chemie a technologie polymerů

Redukce obsahu oxidu zinečnatého v gumárenských směsích II.

Autor: Bc. Anna Brodská
Ročník: M2
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Zdeněk Hrdlička, Ph.D., Ing. Jiří Brejcha (Mitas a.s.)

Gumárenský průmysl Evropské unie ročně spotřebuje asi 100 000 tun oxidu zinečnatého, který je využíván především jako aktivátor sirné vulkanizace. Ačkoli je zinek považován za jeden z nejméně nebezpečných těžkých kovů, běžně se vyskytuje v přírodě a je pro ni nepostradatelný, bylo zjištěno, že některé vodní ekosystémy jsou velmi citlivé již na jeho velmi nízké koncentrace. Ke snižování obsahu oxidu zinečnatého v gumárenských směsích jsme proto motivováni nejenom jeho vysokou cenou, ale především aspekty ekologickými.

Náplní mé práce je sledovat vliv typu a koncentrace oxidu zinečnatého na vlastnosti pryže. Bylo připraveno 16 laboratorních směsí lišících se typem a koncentrací oxidu zinečnatého. U těchto směsí byly sledovány vulkanizační charakteristiky, tahové vlastnosti a tvrdost Shore A. Práce dále pokračuje přípravou plněných směsí podle reálné receptury. Byl také rozšířen počet vzorků oxidu zinečnatého a počet sledovaných parametrů.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Reakce růstových center poly(hex-1-en)u připraveného živou polymerací iniciovanou diiminovými komplexy niklu

Autor: Bc. Darja Hasalíková
Ročník: M1
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Jan Merna, Ph.D.

Polyalkeny jsou nepolárními polymery, což může být v některých aplikacích značně omezující (horší barvitelnost, potiskovatelnost). Zavedením polárních skupin do polyalkenového řetězce je možné spektrum využití významně rozšířit. Reakcemi s řadou činidel byla zkoumána možnost zavedení koncových funkčních skupin do řetězců poly(hex-1-en)ů získaných živou koordinační polymerizací iniciovanou *N,N'*-bis(2,6-diisopropylfenyl)-[2,3-(naftalen-1,8-diyl)-1,4-diazabuta-1,3-dien]dibromidem nikelnatým za kokatalýzy methylaluminoxanem (MAO). Pro tento účel byly syntetizovány nízkomolekulární poly(hex-1-en)y ($M_n=3000-10000 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$), které byly terminovány halogeny, isoprenem, propylenoxidem, kyslíkem, *p*-chlorstyrenem, diethylzinkem, trimethylsilylchloridem, styrenem, methylakrylátem a methylakrylátem, jehož esterová skupina byla stíněna (chráněna) trimethylalumiem. Získané produkty byly charakterizovány ^1H NMR spektroskopii. Reakce s většinou terminačních činidel k zabudování koncových skupin nevedla. Polymery terminované styrenem vykazovaly ve spektrech signály naznačující možnost zavedení fenylových koncových skupin.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Hydrolytická odolnost alifatických a aromaticko-alifatických polyesterů

Autor: Ilona Herzigová
Ročník: B3
Ústav: Polymerů
Školitel: doc. Ing. Irena Prokopová, CSc., Ing. Jana Turečková

V práci byla testována hydrolytická odolnost vybraných alifatických a aromaticko-alifatických (ko)polyesterů, která nepřímo indikuje jejich možnou biologickou rozložitelnost. Alifatické (ko)polyestery získané (ko)polymerací L-laktidu a kaprolaktonu s potenciální aplikací v medicíně byly podrobeny abiotické hydrolýze ve fyziologickém roztoku při 30 °C. Aromaticko-alifatické kopolyestery na bázi poly(ethylenetereftalátu) z použitých nápojových lahví a kyseliny mléčné nebo glykolové byly testovány ve formě submikronových vláken. Hlavní pozornost byla zaměřena na jejich hydrolyzovatelnost při teplotě 30 °C v přítomnosti enzymů obsažených v pracím prášku. Efekt hydrolytického působení prostředí na testované polymery byl sledován na základě změny jejich hmotnosti a změny molární hmotnosti, resp. redukované viskozity roztoků vzorků. Molekulová struktura kopolyesterů byla charakterizována pomocí NMR. Cílem další práce bude sledovat možný katalytický vliv lipázy izolované z kvasinky *Candida rugosa* na hydrolýzu polyesterů.

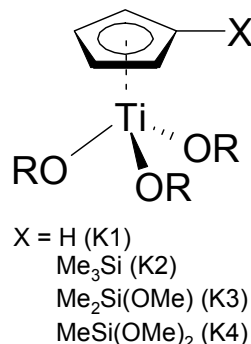
Sekce : Chemie a technologie polymerů

Polymerizace styrenu katalyzovaná cyklopentadienylovými komplexy titanu

Autor: Bc. Ondřej Hylský
Ročník: M2
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Jan Merna, Ph.D.

Metalocenové katalyzátory umožňují přípravu vysoce syndiotaktického polystyrenu (sPS), který proti běžnému polystyrenu vyniká vysokým obsahem krystalické fáze, teplotou tání kolem 270 °C, vysokou elasticitou a velkou tepelnou a chemickou odolností. sPS tak představuje inženýrský plast pro řadu náročných aplikací.

Ve svojí práci jsem vyhodnocoval vliv substituce cyklopentadienylových ligandů na polymerizační aktivity katalytických komplexů K1-K4 aktivovaných methylalumoxanem. Dále byl zjišťován vliv poměru Al/Ti a teploty na polymerizační aktivitu. Takticita vzniklého polystyrenu byla posuzována pomocí DSC a ^{13}C NMR.



Sekce : Chemie a technologie polymerů

Biodegradační potenciál poly(ε-kaprolaktonu-co-laktidu)

Autor: Bc. Jakub Janák
Ročník: M1
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Václava Benešová, doc. Ing. Jiří Brožek, CSc.

Kopolymery na bázi laktidu a glykolidu byly prvními syntetickými polymery používanými jako vstřebatelné šicí materiály v lékařských aplikacích. Kopolymerací laktidu s cyklickými estery (laktony) a volbou reakčních podmínek je možno efektivně ovlivnit termické a mechanické vlastnosti kopolymerů a tedy i jejich citlivost k biodegradaci.

Práce je zaměřena na kopolymeraci laktidu a ε-kaprolaktonu v monomerní fázi iniciovanou sloučeninami cínu. Struktura kopolymerů a jejich termické a mechanické vlastnosti byly určovány poměrem vstupních komonomerů v polymerační násadě a teplotou polymerace.

Citlivost k degradaci připravených folií byla testována pomocí abiotické hydrolyzy po dobu až 6 týdnů. Rozsah degradace byl vyhodnocen z úbytku hmotnosti a ze změn entalpie tání. Morfologie povrchu před a po degradaci byla sledována pomocí SEM a korelována se strukturou polymeru a podmínkami jeho přípravy.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Dynamické reologické vlastnosti provozních kaučukových směsí a jejich korelace s vlastnostmi vstupních surovin

Autor: Bc. Alena Kadeřábková
Ročník: M2
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Zdeněk Hrdlička, Ph.D., Ing. Jiří Brejcha (Mitas a.s.)

Kvalita výrobků gumárenského průmyslu a její rovnoměrnost je zásadní pro uplatnění výrobce v dravé konkurenci při čím dál náročnějších požadavcích zákazníka. Zavedené metody provozního hodnocení kaučukových směsí však nejsou schopny odhalit vlivy některých faktorů, přitom v současnosti existuje celá řada sofistikovaných přístrojů, u nichž ovšem chybí jednoduchá vazba naměřených hodnot na vlastnosti materiálu.

Předmětem práce je dlouhodobá analýza dynamických reologických vlastností reálných běhounových kaučukových směsí dvou receptur. Měření probíhalo na bezrotorovém reometru RPA 2000. Sledovanými vlastnostmi jsou reálná složka smykového modulu (elastický modul) a mechanický ztrátový činitel ($\tan \delta$) v závislosti na proměnných podmínkách namáhání vzorku (amplituda deformace, frekvence). Tyto veličiny byly sledovány u surových směsí i u vulkanizátů; přístroj umožňuje takové měření z jediného vzorku. Cílem práce bylo korelovat naměřené vlastnosti s vlastnostmi vstupních surovin.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Studium termické stability vysoce větveného polyimidu

Autor: Martin Špergl
Ročník: B3
Ústav: Polymerů
Školitel: doc. Ing. Petr Sysel, CSc., Mgr. Evgenia Minko

Důležitou součástí skupiny termicky odolných polymerů jsou aromatické polyimidy. V nedávné době byla množina aromatických lineárních a síťovaných typů rozšířena o vysoce větvené polyimidy. Uspořádání jejich řetězců s omezenými vzájemnými interakcemi ovlivňuje některé vlastnosti, např. transportní charakteristiky. Vliv na termickou stabilitu, jakožto jejich vlastnost nejvíce ceněnou, však dosud nebyl detailněji sledován. Proto tato práce byla zaměřena na podrobnější ohodnocení termické stability vysoce větveného polyimidu připraveného na bázi 4,4',4''-triaminotriphenylmethanu a 4,4'-oxydifthalanhydridu. Bylo provedeno porovnání s lineárním polyimidem připraveným z 4,4'-diaminodifenylmethanu a 4,4'-oxydifthalanhydridu. Pomocí termogravimetrické analýzy v atmosféře dusíku byly vyhodnoceny teploty odpovídající příslušné ztrátě hmotnosti materiálů a aktivační energie termického rozkladu. Kombinace termogravimetrie s IČ spektrometrií umožnila analyzovat rozkladné produkty materiálů vznikající při termické expozici a navrhnout základní rámec mechanismu rozkladu. Též byly sledovány teploty skelného přechodu (dynamicko-mechanický analyzátor) a mechanické vlastnosti (Instron) výše specifikovaných materiálů v původním stavu a po expozici při 275 °C.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Poly(trimethylenkarbonát): Syntéza monomeru a jeho polymerace

Autor: Robert Mundil
Ročník: B3
Ústav: Polymerů
Školitel: doc. Ing. Irena Prokopová, CSc., Ing. Jana Turečková

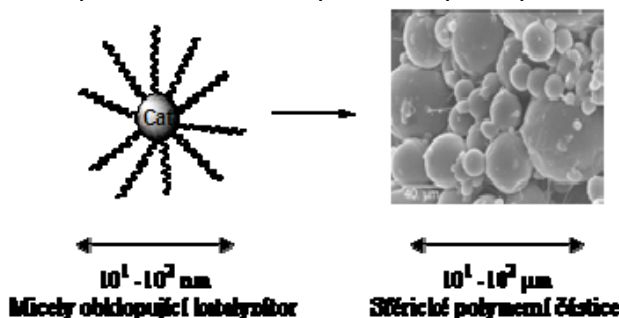
Cílem této práce byla syntéza trimethylenkarbonátu (1,3-dioxan-2-on), monomeru pro přípravu biodegradovatelných polymerů s využitím v medicíně, který je komerčně dostupný pouze v omezené míře. Produkt syntézy byl po opakovaných cyklech čištění charakterizován pomocí termické analýzy, elementární organické analýzy a infračervené spektroskopie. Získaný cyklický monomer byl podroben polymeračnímu testu za iniciace 2-ethylhexanoátem cínatým při teplotě 130 °C v časovém rozmezí 24 – 72 hodin. Produkt polymerace byl přesrážen z chloroformového roztoku metanolem a charakterizován pomocí NMR. Trimethylenkarbonát bude využit jako komonomer při kopolymeraci s cyklickými estery.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Řízení morfologie PE částic pomocí katalyzátorů na bázi diiminových komplexů niklu enkapsulovaných v polybutadienových micelách

Autor: Bc. Zdeněk Hošťálek
Ročník: M2
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Jan Merna, Ph.D.

Nevýhodou všech homogenních katalyzátorů je neschopnost řízení morfologie vznikajících částic během technologického procesu, což může vést k zablokování reaktorů. Pro průmyslové využití je nezbytná jejich heterogenizace, neboli navázání na nosič. Cílem této práce bylo vyvinutí nového katalytického systému schopného řídit výslednou morfologii vznikajících částic. Pro tento účel byl zvolen diiminový katalyzátor (*N,N'*-bis (2,4,6-trimetylfenyl)-2,3-(1,8-naftyl)-1,4-diazabutadien)nikl dibromid, který byl následně enkapsulován do polymerních micel a použit pro polymerizaci etyleny. Jako nosič katalytického systému byl použit *cis*-1,4-polybutadien končený karboxylovými skupinami, získaný esterifikační reakcí komerčně dostupného hydroxyl-terminovaného kaučuku s maleinanhydridem nebo s chloridem kys. trimelitové. Připravené nosiče byly charakterizovány pomocí ^1H a ^{13}C NMR spektroskopie, MALDI-TOF spektroskopie a pomocí SEC-MALLS. Schopnost nosičů tvořit micely v heptanu byla ověřena pomocí DLS. Morfologie výsledných polymerů byla stanovena pomocí SEM mikroskopie. Dále byla u výsledných polymerů stanovena teplota tání a množství krystalické fáze pomocí DSC. Pro zjištění molární hmotnosti a distribuce molárních hmotností byla použita metoda vysokoteplotní GPC.



Sekce : Chemie a technologie polymerů

Příprava polyesteramidů postupnou polymerizací ϵ -kaprolaktonu a ϵ -kaprolaktamu

Autor: Bc. Kateřina Nytrová
Ročník: M2
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Jana Kredatusová, doc. Ing. Jiří Brožek, CSc.

Kopolymery na bázi ϵ -kaprolaktonu (CLO) a ϵ -kaprolaktamu (CLA) – polyesteramidy (PEA) – patří mezi zajímavé biodegradabilní materiály. S rostoucím obsahem CLO jednotek v kopolymeru roste jejich citlivost k biologické rozložitelnosti, zároveň ale dochází k poklesu modulu pružnosti v tahu a k nárůstu houževnatosti. Pokles modulu lze omezit přípravou PEA nanokompozitů (PEA NC). Jednou z možností přípravy PEA NC je polymerizace CLA v přítomnosti poly(ϵ -kaprolaktonového) NC.

Cílem této práce je optimalizovat syntézu PEA pro přípravu PEA NC. PEA byly připraveny postupnou polymerizací CLO a CLA s využitím dvou iniciátorů: 2-ethylhexanoátu cínatého pro polymerizaci CLO a ethylmagnesiumbromidu pro polymerizaci CLA. Polymerizace byly provedeny pro poměry CLA/CLO v násadě 80/20 a 60/40 v teplotním rozmezí 110 – 150°C. Obsah polymeru byl stanoven extrakcí a korelován s podmínkami polymerizace. Extrahovaný polymer byl dále charakterizován diferenciální skenovací kalorimetrií (DSC).

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Příprava polyesteramidů pro elektrostatické zvlákňování

Autor: Bc. Michaela Stolinová
Ročník: M2
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Lenka Malinová, doc. Ing. Jiří Brožek, CSc.

Polyesteramidy (PEA) na bázi ϵ -kaprolaktamu a ϵ -kaprolaktonu v sobě kombinují dobré mechanické vlastnosti pocházejících od polyamidu 6 s biodegradabilitou poly(ϵ -kaprolaktonu). Z těchto PEA byly úspěšně připraveny nanovláknenné vrstvy technikou elektrostatického zvlákňování z roztoků PEA v kyselině mravenčí či ve směsi s kyselinou octovou. Současným trendem je však omezit používání rozpouštědel. Zajímavým řešením přípravy nano-/mikrovláknenných vrstev je technika zvlákňování z taveniny, v případě PEA jsou nevyhovující reologické vlastnosti jejich tavenin (příliš vysoká molární hmotnost).

Cílem této práce je příprava referenčních PEA a PEA se sníženou molární hmotností. Jako regulátor molární hmotnosti byl použit δ -valerolakton v různém poměru k ϵ -kaprolaktonu. Všechny PEA byly charakterizovány obsahem polymeru, diferenciální skenovací kalorimetrií a poklesem molárních hmotností vyhodnocených ze změn redukováných viskozit. PEA se sníženou molární hmotností budou použity k přípravě nano-/mikrovláknenných vrstev zvlákňováním z taveniny s možným využitím na výrobu filtrů pro bioremediaci vody kontaminované průmyslovými polutanty.

Sekce: Materiálové inženýrství se zaměřením na materiály pro elektroniku a biomateriály

Mikropolarimetrie

Autor: Tereza Amrůzová
Ročník: M2
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Pavel Novotný, CSc.

Studium optické aktivity léčiv a přechod od racemického k opticky čistému léčivu je trendem dnešního farmaceutického průmyslu. Je to dáno omezením nežádoucích účinků, často rychlejším nástupem účinku a v neposlední řadě také snížením finančních nákladů při vývoji a registraci léčiv. K charakterizaci opticky aktivních léčiv se používá měření specifické otáčivosti klasickou polarimetrií.

Metoda mikropolarimetrie, která pro měření optické otáčivosti využívá polarizační mikroskop s vysokou rozlišovací schopností, se jeví vhodná také pro měření pevných látek. Mikroskopický obraz je snímán přes CCD kameru, která je propojena s PC, kde je nainstalován software pro analýzu obrazu. Je možno měřit jak „na průchod“, což odpovídá klasické polarimetrii, tak „na odraz“. Měření jsou získány závislosti intenzity světla na úhlu otočení vzájemné polohy polarizátorů, pro které je charakteristické lokální minimum. Jako modelový materiál byl použit magnetický granát $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$, zkoumaným materiálem byla zvolena folie kyseliny polymléčné.

Sekce: Materiálové inženýrství se zaměřením na materiály pro elektroniku a biomateriály

Studium Au vrstev na PET a PTFE

Autor: Adéla Vošvrdová
Ročník: M1
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Petr Slepíčka, Ph.D.

V této práci byly studovány tenké vrstvy zlata naprášené na polymerní folii. Z obdržených polymerních folií (PET a PTFE) jsem připravila vzorky 2x2 cm. Na tyto vzorky byly naprašovány zlaté vrstvy a to při různém naprašovacím proudu (10 a 30 mA) a různé době depozice. Na takto modifikované vzorky byly dále naprášeny zlaté kontakty. Na vzorcích byl měřen odpor a to pomocí multimetru nebo pomocí přístroje Keithley 487 pro měření velmi vysokých odporů. Samotné polymery i vzorky s naprášenou zlatou vrstvou byly dále analyzovány pomocí laserové rastrovací mikroskopie a AFM. Byla určena mez spojitosti naprášené Au vrstvy a morfologie původních polymerů a polymerů se spojitou Au vrstvou.

Sekce: Materiálové inženýrství se zaměřením na materiály pro elektroniku a biomateriály

Vliv fyzikálně-chemických parametrů LAB na buněčnou viabilitu

Autor: Bc. Markéta Bačáková
Ročník: M2
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: prof. Ing. Václav Švorčík, DrSc.
Bertrand Guillotin, PhD., Inserm U 577 Biomateriály a tkáňové inženýrství,
Univerzita Victor Ségalen Bordeaux 2, Francie

Práce se zabývá studiem fyzikálně-chemických parametrů LAB (Laser Assisted Bioprinting) z hlediska vlivu na buněčnou viabilitu. Vliv energie laseru a tloušťky vrstvy přijímacího substrátu (Matrigel) byly studovány u endoteliální buněčné linie (Ea.hy926) a kmenových buněk izolovaných z tukové tkáně (ADSC), u kterých byl navíc studován význam viskozity biologického materiálu. Energie laseru byla nastavena v rozmezí 8 – 24 μJ a jako přijímací substrát byl volen Matrigel o tloušťce vrstvy 20 – 100 μm . Viskozita biologického materiálu byla modulována pomocí koncentrace alginátu sodného (0,5 % (m/v), 0,8 % a 1 %). Buněčná viabilita byla měřena metodou live/dead vždy 24 hodin po experimentu.

Výsledky ukazují, že buněčná viabilita roste s klesající energií laseru, s rostoucí tloušťkou matrigelu a s rostoucí viskozitou biologického materiálu. ADSC jsou schopné odolávat vyšší energii laseru než EA.hy 926. Z dosažených výsledků vyplývá, že vhodné nastavení parametrů LAB je odvozené od použitého buněčného typu.

Sekce: Materiálové inženýrství se zaměřením na materiály pro elektroniku a biomateriály

Depozice uhlíkových vrstev na polymerní substráty

Autor: Bc. Milada Čechová
Ročník: M2
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Tomáš Hubáček

Tato práce se zabývá charakterizací uhlíkových vrstev napařených na povrch polymerních substrátů PET, PTFE a PS. Povrchové vlastnosti vrstev byly studovány v závislosti na vzdálenosti depozice, použitém substrátu a působení teploty. Změny povrchu uhlíkových vrstev způsobené tepelným namáháním byly studovány na skle. Mezi studované vlastnosti patří smáčivost povrchu, plošný elektrický odpor, morfologie povrchu vrstev a změna optických vlastností.

Smáčivost povrchu vrstev byla měřena goniometricky sledováním kontaktního úhlu. Pro měření plošného odporu byla použita dvoubodová metoda. Morfologie povrchu vrstev byla stanovena metodou AFM, optické vlastnosti UV-VIS spektroskopii.

Napařování uhlíkových vrstev na polymerní substráty zvyšuje smáčivost povrchu vzorků. Rostoucí vzdálenost vzorku od zdroje uhlíku při depozici způsobí růst plošného odporu. Morfologie napařených uhlíkových vrstev závisí na morfologii použitého substrátu. Optické vlastnosti závisí na vzdálenosti při depozici.

Sekce: Materiálové inženýrství se zaměřením na materiály pro elektroniku a biomateriály

Vlastnosti Au nanovrstev na izolantu

Autor: Robert Krajcar
Ročník: B3
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Jakub Siegel, Ph.D.

Principem této práce bylo studovat strukturu a některé fyzikální vlastnosti zlatých nanovrstev. Naprašováním na skleněné podložky byla připravena řada vzorků různých tloušťek v závislosti na době naprašování. U těchto vzorků byl měřen měrný elektrický odpor. Následné teplotní zatížení po dobu jedné hodiny teplotami 100 °C, 200 °C a 300 °C ukázalo značnou změnu vodivostních vlastností a struktury vzorků. Změny struktury byly pozorovány metodou AFM.

Sekce: Materiálové inženýrství se zaměřením na materiály pro elektroniku a biomateriály

Imobilizace kyseliny *p*-hydroxybenzoové a *p*-hydroxybenzaldehydu na silikátové materiály

Autor: Petra Parobková
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Paterová Iva, Ph.D.

Imobilizace různých aktivních substancí na nosičové materiály se může používat například pro pomalejší nástup účinku léčiv a jejich eliminaci z organismu. Dalším využitím je imobilizace katalyzátorů, kde hraje důležitou roli stálost vazby mezi nosičovým materiálem a katalyzátorem. Vhodným nosičovým materiálem se může jevit například silika, hydrotalcity či mesoporézní molekulové materiály, jako je SBA-15 a MCM-41 a další, jejichž vlastnosti jsou v této práci zkoumány.

Cílem práce bylo ukotvení kyseliny *p*-hydroxybenzoové, *p*-hydroxybenzaldehydu, syringové kyseliny a syringového aldehydu na silikátové materiály (mezoporézní siliku, mezoporézní molekulová síta) a hydrotalcity.

Silikátové materiály byly imobilizovány jak nemodifikované, tak upravené pomocí tzv. spacerů, které dodávají na povrch silikátového materiálu jinou funkční skupinu než je původní hydroxylová.

Byl zde zkoumán také vliv rozpouštědla na imobilizované množství substrátu.

Výsledky jednotlivých experimentů byly analyzovány UV-VIS spektrofotometrií.

Sekce: Materiálové inženýrství se zaměřením na materiály pro elektroniku a biomateriály

Zvyšování adheze zlata na polymeru

Autor: Petr Šimek
Ročník: M2
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Ondřej Kvítek

Struktury polymer-kov (izolant-vodič) jsou vrstvy často využitelné v mikroelektronice. Velkým problémem je „špatná“ adheze kovu na polymerní substrát. Jednou z možností jak adhezi zvýšit, je roubovat aktivovaný povrch polymeru funkčními skupinami, které následně reagují s Au atomy.

Povrch polymeru se nejprve aktivuje v plazmatickém výboji Ar plynu. Polymerní řetězce a boční chemické vazby se začnou štěpit a vytváří se reaktivní radikály. Takto modifikovaný polymer se vystaví působení roztoku vybraného dithiolu. Je obecně známo, že –SH skupina velice ochotně reaguje s uhlíkovým radikálem. Vznikne tak vazba mezi polymerem a molekulou dithiolu. Druhá thiolová skupina zůstává ze sterických důvodů nezareagována a je možné ji využít při nanášení zlaté vrstvy. Přestože je zlato inertní kov, má schopnost se chemicky vázat na thiolovou skupinu. Vznikne vazba –S–Au, což by se mělo projevit zvýšením adheze zlata k povrchu polymeru.

Přítomnost síry na povrchu polymeru byla prokázána měřením metodou XPS a FTIR-ATR. Spojitost zlatých vrstev byla charakterizována měřením plošného odporu, protože tvorba elektricky spojitě vrstvy je doprovázena prudkým nárůstem její vodivosti.

Sekce: Materiálové inženýrství se zaměřením na materiály pro elektroniku a biomateriály

Tenké uhlíkové vrstvy na polymeru

Autor: Marek Staszek
Ročník: B3
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Tomáš Hubáček

Tato práce se zabývá charakterizací plošného elektrického odporu uhlíkových vrstev napařených na povrch polymerních substrátů PET a PTFE. Plošný elektrický odpor vrstev byl studován v závislosti na vzdálenosti depozice, použitém substrátu a teplotě.

Měření probíhalo od dusíkové teploty do teploty 20 °C a k záznamu plošného odporu byl použit program labview. Rostoucí vzdálenost vzorku od zdroje uhlíku při depozici způsobí růst plošného odporu. Naopak rostoucí teplota vzorku má za následek zmenšování plošného odporu.

Sekce: Materiálové inženýrství se zaměřením na materiály pro elektroniku a biomateriály

Studium povrchu polymerních substrátů

Autor: Simona Trostová
Ročník: M2
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Petr Slepíčka, Ph.D.

Práce se zabývá charakterizací povrchu polymerních substrátů. Studovanými materiály byly PMP (poly-4-methyl-1-penten) a PLLA (poly(L-mléčná kyselina)).

Vliv modifikace Ar plazmatem na polaritu (smáčivost) povrchu polymerů v závislosti na době modifikace a velikosti výkonu plazmatického výboje byl měřen goniometricky sledováním kontaktního úhlu ihned po modifikaci. Povrchová morfologie původních a modifikovaných vzorků polymerů byla studována metodou AFM. Změny ve struktuře povrchu PMP, resp. PLLA po tepelném namáhání (v závislosti na velikosti teploty a době vystavení tepelnému zatížení) byly měřeny metodou LRM a AFM.

Sekce: Materiálové inženýrství se zaměřením na materiály pro elektroniku a biomateriály

Technologie přípravy optických metamateriálů

Autor: Jiří Tůma
Ročník: M2
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: doc. Ing. Ivan Hüttel, DrSc., Mgr. Oleksiy Lyutakov, Ph.D.

Optickými metamateriály se označují uměle připravené kompozitní materiály, které mají zvláštní elektromagnetické vlastnosti, jež se v přírodě nevyskytují (záporná permitivita, permeabilita a index lomu). Stavební prvky jejich povrchu jsou menší než vlnová délka záření, se kterým interagují. Struktura je tvořena velkým počtem symetricky a periodicky rozmístěných prstencových rezonátorů, které jsou kapacitně a indukčně vázány. Rezonátor se při dopadu elektromagnetické vlny chová jako magnetický dipól. Imaginární část permeability vytváří rezonanční pík, reálná část má v oblasti frekvencí těsně nad rezonancí výraznou zápornou hodnotu. Tyto vlastnosti metamateriálů bývají prezentovány jako cesta k "plášti neviditelnosti".

Popsané struktury byly připravovány technologií laserového skenování konfokálním rastrovacím mikroskopem Lext OLS 3100. Na skleněný substrát byla metodou spin-coating nanosená vrstva PMMA dotovaného porfyrinem, který absorbuje optické záření 405 nm (odpovídá pracovní vlnové délce mikroskopu). Vzniklým teplotním gradientem v místě dopadu laserového svazku a současným posuvem vzorku v příčném a následně podélném směru vznikala žádaná struktura o periodicitě 2 μm a amplitudě 0,5 μm , která byla potvrzena SEM mikroskopií.

Sekce: Technologie restaurování a konzervování

Povrchová úprava slitin stříbra proti ztrátě optických vlastností povrchu reakcí se sulfidy

Autor: Martina Anisová
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jan Stouilil, Ph.D.

Ačkoli je stříbro řazeno mezi ušlechtilé kovy, jeho povrch snadno reaguje se sulfidy, a to i v suché atmosféře. V rámci práce bylo sledováno několik konverzních povlaků pro stabilizaci povrchu proti napadení sulfidy (SEAL Cu, MS4, ZrO_2). Vzorok ze slitiny Ag-Cu7,5 byly podrobeny expozici v parách 0,02% roztoku Na_2S a následně hodnoceny pomocí digitální analýzy obrazu a coulometrickou redukcí korozních produktů. Jako velmi stabilní se ukázaly povlaky jak na bázi organosilanu, tak ZrO_2 .

Sekce : Technologie restaurování a konzervování

Průzkum nástěnné malby a zdiva v presbytáři kostela sv. Jiljí v Uhlířských Janovicích

Autor: Bc. Tereza Tribulová
Ročník: M2
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: doc. Ing. Petr Kotlík, CSc.

V rámci tohoto projektu byla navázána studentská spolupráce VŠCHT v Praze s Fakultou restaurování Univerzity Pardubice. Pod dohledem svých školitelů se snažíme řešit reálnou problematiku obnovy historického objektu (státem chráněné památky), vytipovat a odstranit příčiny poškození základních stavebních a výtvarných prvků a navrhnout koncept stavebních oprav, konzervace a restaurování části nástěnných maleb z 90. let 14. století, které jsou integrální součástí tohoto objektu.

Předpokladem pro to je soubor průzkumů, kombinujících umělecko-historické, výtvarné i technologické poznatky s řadou exaktních analýz, díky kterým lze dospět k detailnímu poznání použitých materiálů včetně jejich vlastností a technologií. Zároveň bude navržen i projekt následné komplexní ochrany objektu včetně programu preventivní péče.

V průběhu všech těchto prací je snahou uplatnit vysokou míru etiky památkové péče (jsou preferovány nedestruktivní metody průzkumu) a demonstrovat nutnost interdisciplinarity v tomto oboru (prostřednictvím spolupráce s dalšími institucemi).

Sekce : Technologie restaurování a konzervování

Odolnost malt z románského cementu a vápenného hydrátu vůči krystalizaci solí

Autor: Barbora Benetková
Ročník: B3
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Kateřina Doubravová, Ph.D.

Práce sleduje vliv krystalizace $\text{Na}_2\text{SO}_4 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ na degradaci malt v závislosti na jejich složení a době tvrdnutí. Byly připraveny vzorky malt s různým poměrem románského cementu a vápenného hydrátu. V průběhu tvrdnutí byly pravidelně zvlhčovány, aby byla zajištěna dostatečná vlhkost potřebná pro jejich hydrataci. Vzorky byly testovány na odolnost vůči krystalizaci dekahydrátu síranu sodného po 7, resp. 14 dnech tvrdnutí. Výsledky měření porovnávají odolnost vzorků vzhledem k jejich složení a době tvrdnutí.

Sekce : Technologie restaurování a konzervování

Stabilizace předmětů kulturního dědictví směsnými povlaky na bázi tanátu a dekananu

Autor: Anna Fialová
Ročník: B2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jan Stouilil, Ph.D.

V rámci práce byl sledován synergický efekt kodepozice tanátového a dekananového povlaku. Směsný povlak byl nanášen najednou i postupně a byl porovnáván s povlaky čistými a komerčním roztokem tanátu (Pragokor 100). Vlastnosti byly hodnoceny pomocí stanovení úhlů smáčivosti a expoziční zkoušky v klimatické komoře při 60 °C a 95 % relativní vlhkosti. Směsný povlak, který je nanášen najednou ze směsného roztoku poskytuje výbornou alternativu ke standardním povlakům při zachování výhod obou povlaků (optický vzhled, stabilita, hydrofobicita).

Sekce : Technologie restaurování a konzervování

Využití křemeliny jako pucolánové přísady

Autor: Zuzana Gazdová

Ročník: B3

Ústav: Chemické technologie restaurování památek

Školitel: doc. Ing. Petr Kotlík, CSc., Konzultant: Ing. Kateřina Doubravová, Ph.D.

Práce se zaměřuje na studium vlastností křemeliny, které mají vliv na možnosti jejího použití jako pucolánové přísady do vápenné malty. Bylo provedeno granulometrické stanovení velikosti částic původní a mleté křemeliny, mikroskopické pozorování charakteru částic, RTG fázová analýza a termická analýza. Dále byl sledován průběh tuhnutí vápenného hydrátu s příměsí křemeliny v závislosti na jejím množství v porovnání s průběhem tuhnutí směsi vápenného hydrátu obsahující siloxid nebo metakaolin.

Sekce : Technologie restaurování a konzervování

Vliv přírodních barviv na degradaci hedvábí

Autor: David Kohout

Ročník: B3

Ústav: Chemické technologie restaurování památek

Školitel: Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.

Cílem práce bylo experimentálně prozkoumat vliv přírodních barviv (košenila, brazilské dřevo, světlice barvířská a mořena barvířská) na tepelnou a fotooxidační degradaci hedvábných tkanin. Degradace textilního materiálu byla urychlena dvěma způsoby, tepelným fotooxidačním stárnutím 21 dnů při teplotě 50 °C a 60 % relativní vlhkosti, UV složka 1 Wm⁻² a přístupu vzduchu a tepelným stárnutím 28 dnů při teplotě 90 °C a 80 % relativní vlhkost. Metody zkoumání textilního materiálu (před a po umělém stárnutí) byly měření hodnoty pH výluhů vzorků, měření viskozity rozpuštěných vláken v nasyceném roztoku LiBr, gelová elektroforéza (SDS-PAGE), termogravimetrická a derivační termogravimetrická analýza (TG/DTG), diferenciální snímání kalorimetrie (DSC), infračervené spektroskopie. Kvalitativní a kvantitativní analýzy barviv pomocí reverzní vysokoúčinné kapalinové chromatografie s UV-Vis detekcí a detekcí pomocí tandemové hmotnostní spektrometrie.

Sekce : Technologie restaurování a konzervování

Elektrochemické odstraňování chloridů z modelové štěrbiny

Autor: Alžběta Kopecká
Ročník: B3
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Šárka Msallamová

Železné archeologické nálezy bývají v různé míře kontaminovány chloridovými ionty a jejich přítomnost způsobuje korozní napadení předmětů i v atmosféře s nízkou relativní vlhkostí (RH kolem 20 %), vzhledem k hygroskopickým vlastnostem chloridu železitého. Tato práce byla zaměřena na zkoumání účinnosti elektrochemické a difúzní metody odstraňování chloridů v roztoku pitné vody z trhlin v korozních produktech. Trhliny v korozních produktech byly modelovány pomocí přípravku z uhlíkové a nerezové oceli. Chloridy do vnitřního prostoru štěrbiny byly dávkovány zasolenými kroužky z filtračního papíru. Šířka modelové štěrbiny byla cca 0,1 mm. Z výsledků vyplývá, že odstraňování chloridů při různé míře polarizace modelové štěrbiny je neúčinné vzhledem k odporu prostředí v ní a úbytek chloridů ze štěrbiny byl zprostředkován pouze difúzí.

Sekce : Technologie restaurování a konzervování

Stabilizace povrchu měděných slitin konverzními povlaky

Autor: Zuzana Sedláková
Ročník: B2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jan Stoužil, Ph.D.

V rámci práce byl sledován vliv parametrů galvanického vylučování povlaků na bázi ZrO_2 . Byl stanovován obsah Zr na povrchu pomocí metody ICP-OES. Dále byl tento typ povlaku porovnáván s dalšími typy komerčních konverzních povlaků MS4 a SEAL Cu (Pragochema). Vzorky čisté mědi s povlaky byly podrobeny expoziční zkoušce v kondenzační komoře s obsahem SO_2 . Byly rovněž hodnoceny bariérové vlastnosti povlaků pomocí elektrochemické impedanční spektroskopie v roztoku 0,1M Na_2SO_4 . Jako nejlepší alternativa se ukázal povlak SEAL Cu na bázi organosilanu. Povlaky ZrO_2 jsou příliš tenké na to, aby mohly poskytnout dostatečnou stabilizaci povrchu.

Sekce : Technologie restaurování a konzervování

Ověření metodiky identifikace anorganických pigmentů

Autor: Eva Štemberová
Ročník: M2
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Kateřina Doubravová, Ph.D.

Identifikace anorganických pigmentů v laboratoři je obvykle realizována využitím mikroskopických pozorování a mikrochemických stanovení. Některé postupy užívané pro identifikaci pigmentů jsou při laboratorní práci obtížně průkazné nebo nedostatečně citlivé. Práce se zabývá ověřením této metodiky na běžně užívaných přírodních a několika syntetických pigmentech. Cílem práce bylo vybrat spolehlivé postupy sloužící k jednoznačné identifikaci těchto pigmentů. Zároveň prověřit možnosti identifikace pigmentů bez využití instrumentálních metod a možnosti identifikace sledováním dalších charakteristických vlastností (tepelných, magnetických) pigmentů.

Sekce : Technologie restaurování a konzervování

Stabilizace a konzervace archeologických železných nálezů z lokality Sudoměř

Autor: Kateřina Tomšová
Ročník: B2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Šárka Msallamová

Ze soukromé sbírky bylo sběratelem poskytnuto 8 železných předmětů z lokality Sudoměř (rukojeť, zvoneček, čepel, tři hřebíčky, spona, očko), jejichž bližší datace není známá. Všechny tyto silně zkorodované předměty byly odsoleny ponořením do destilované vody po dobu jednoho týdne v prostředí s nízkým obsahem kyslíku; následovalo sušení předmětů při 105 °C a nakonec stabilizace korozních produktů tanátováním roztokem taninu s kyselinou fosforečnou. Nálezy byly konzervovány akrylátovým lakem Paraloid B72 a jejich povrch byl zmatněn mikrovoskem Revax. Byl navržen ochranný režim předmětů s ohledem na možnou přítomnost zbytkových chloridů v korozních produktech: relativní vlhkost 20 %, teplota 15-25 °C.

Sekce : Technologie konzervování a restaurování

Ověření vlivu roztoku Chelatonu II a dithioničitanu sodného na vlastnosti papíru

Autor: Kristýna Kolářová
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Michal Ďurovič

Při povodních v roce 2002 byly vodou zasaženy i novodobé archiválie, které jsou sepnuty ocelovými kancelářskými sponami a sešivacími skobičkami. Jde převážně o aktový materiál, například soudní spisy. Problém je ale běžný i u dalších archiválií, které nebyly zasaženy vodou při povodních 2002. Kromě svorek a sponek se objevuje také koroze kovových prvků různých typů kroužkových vazeb nebo nýtků používaných k připevňování fotografií do průkazů a jiné. Ocelové předměty na papíře vlivem nestabilních podmínek a velké vlhkosti korodují a způsobují nevzhledné skvrny. Zároveň ionty železa katalyzačním účinkem urychlují degradaci papíru. Dále se ukazuje, že ionty železa mohou hrát roli ve foxingu papíru. Proto je žádoucí korozní produkty odstraňovat.

Pro odstranění skvrn způsobených korozi ocelových předmětů je možné použít roztok Chelatonu II a dithioničitanu sodného. Cílem této práce je ověření možného vlivu tohoto roztoku na vlastnosti papíru po umělém stárnutí a upozornit na případná rizika jeho použití. Sledovány jsou mechanické vlastnosti (tržné zatížení, odolnost v přehýbání), optické vlastnosti (celková barevná změna) i chemické vlastnosti papíru (hodnota pH studeného vodného výluhu). Zároveň byla ověřována také stabilita roztoku dithioničitanu sodného za různých podmínek.

Sekce : Technologie restaurování a konzervování

Studium koroze skla vystaveného alkalickému prostředí

Autor: Bc. Marie Netušilová
Ročník: M1
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Dr. Ing. Dana Rohanová

Alkalické prostředí je považováno za nejagresivnější pro rozpouštění skelné matrice. I přesto jsou silně zásadité roztoky (na bázi K_3PO_4) používány v restaurátorské praxi k odstranění korozních produktů na historickém skle a Na_2CO_3 tvoří hlavní složku detergentů používaných v myčkách nádobí se sloganem "soda-efekt". Proto cílem práce byl průzkum vlivu vybraných alkalických roztoků na sklo běžného chemického složení (SiO_2 - Na_2O - K_2O - CaO). Vlastním experimentem byly šestihodinové až čtyřměsíční statické testy (tj. korozní médium se neobměňuje) ve třech silně alkalických roztocích ($pH > 10$) – K_3PO_4 , $NaOH$, Na_2CO_3 . Testy byly provedeny v 5% a nasycených roztocích, při teplotách 37 a 60 °C. Pro porovnání byly vzorky exponovány i do demineralizované vody. Pro analýzu výluhů byla použita metoda AAS (Si, Ca). Povrchy vzorků byly pozorovány pod optickým mikroskopem a jejich chemické složení bylo stanoveno pomocí SEM-EDS. Profily prvků v povrchové vrstvě byly zjištěny metodou GDS (Glow discharge spectroscopy), která byla pro skleněné materiály použita nově a přinesla neočekávaně dobré výsledky, navíc v porovnání s ESCA bylo odprašování vzorku velmi rychlé.

Tato práce jednoznačně potvrdila, že v daných alkalických prostředích dochází ke značnému rozpouštění skla, přičemž devastující účinek přímo souvisí se stoupající hodnotou pH.

Sekce : Restaurování a konzervování kovů

Restaurování souboru granátových šperků

Autor: Andrea Černá
Ročník: B3
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jiří Děd, CSc.



Restaurovaný soubor granátových šperků z jičínského muzea, sestávající z granátových náušnic, prstenu s dvojitou nástavbou a prstenové obroučky s pěti kameny, byl vyrobený odkrývanou technikou kolem roku 1890. Cílem restaurování šperků bylo jejich uvedení do stavu blízkému původnímu. Šperky byly prohlédnuty stereomikroskopem, bylo zdokumentováno poškození v podobě chybějících částí a předchozí zásahy. Kvalitativní a semikvantitativní prvková analýza odebraných vzorků použitých materiálů byla provedena na elektronové mikrosondě Hitachi S-450 s EDS analyzátozem Kevex Delta V. Kameny byly určeny RNDr. Tomášem Řídkošilem z Muzea Českého ráje v Turnově. Šperky jsou vyrobeny ze slitiny stříbra 30 - 50 % a mědi 25 - 50 % s nízkým obsahem zlata 20 - 45 %. Mezi předchozí zásahy patří velké množství cínové pájky (57% Sn, 43% Pb) na náušnicích, stříbrná obroučka a mosazná nástavba (34 % Zn) na prstenu s dvojitou nástavbou. Ve špercích chybí granáty - pyropy. Při restaurátorském zásahu byla z náušnic odstraněna cínová pájka, byly vyrobeny nové středové obruby s novými kameny - almandiny. Byly připájeny nové patentové závěry. Do prstenu s dvojitou nástavbou byly zasazeny chybějící kameny a byla vyrobena chybějící středová obruba. Podle prstenové obroučky byla vyrobena kopie celého prstenu s pěti pyropy.

Sekce : Restaurování a konzervování kovů

Restaurování Relikviáře Panny Marie

Autor: Lenka Dlabolová
Ročník: B4
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Šárka Msallamová, Jaroslav Prášil s restaurátorskou licencií

Tématem práce je restaurování relikviáře z biskupství Litoměřic pocházejícího z roku 1780. Relikviář je klášterní prací jeptišek a má svůj specifický výtvarný a duchovní význam. Tvoří jej dřevěná prosklená skříňka, která obsahuje pevný papírový základ, na němž jsou našité kovové dekorace se skleněnými ozdobami tzv. buliony a osm textilních váčků, obsahujících relikvie devíti svatých (jeden z nich obsahuje dvě relikvie). Uprostřed je umístěna vosková plastika Panny Marie s dalšími skleněnými a textilními ozdobami. Pomocí elektronového rastrovacího mikroskopu Hitachi S – 450 s EDS analyzátozem Kevex Delta5 bylo určeno, že ozdobné květiny jsou vyrobeny z mosazných a měděných lamel (částečně postříbřených) pokrytých korozními produkty, které jsou navinuty na železné konstrukci. Podloží relikviáře je tvořeno z měděných lamel se zbytky stříbrnění a je protkané hedvábnou nití. Krajka lemující okraj relikviáře je z leónského přediva a je k okraji relikviáře přichycena železnými zkorodovanými špendlíky. Korozní produkty byly z ozdobných kovových květín odstraněny 5% roztokem kyseliny sírové s přídavkem thiomocoviny. Korozní produkty železných nosných a závěsných prvků byly stabilizovány roztokem taninu s přídavkem kyseliny fosforečné. Byl navržen ochranný režim památky s ohledem na její další využití.

Sekce : Restaurování a konzervování kovů

Restaurování dvou barokních cínových svíců

Autor: Lucie Králová
Ročník: B4
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Šárka Msallamová



Hlavním cílem práce bylo uvést svícny do funkčního stavu. S využitím výsledků elektronového skenovacího mikroskopu s EDS analyzátozem bylo určeno složení cínové slitiny. Předměty byly čištěny pomocí plavené křídý s lněným olejem. Svícny se nakláněly v dřívku a místy se vyskytovaly perforace materiálu. Ve střední části dřívku svícnu číslo 1., a pod talířkem na svícnu číslo 2. se nacházely rozsáhlé trhliny po obvodu, proto bylo provedeno zpevnění pomocí měděné vložky. Na svícnu č. 2. byla odstraněna nekvalitní druhotná oprava talířku, nahrazením poškozené části novým materiálem se stejným chemickým složením jako původní cínová slitina. Svícen měl také velice zdeformované podpůrné koule podstavy. Byly vyrobeny nové půlkoule, které se byly připájeny na původní. Perforace a opravy trhlin na svícnech byly pájeny cínovou pájkou s eutektickým složením za pomoci chloridu zinečnatého jako tavidla. Opravené části na svícnech nebyly barevně retušovány. Předměty

byly konzervovány 10% lakem Paraloid B72 rozpuštěným v toluenu. Byl navržen ochranný režim památky s ohledem na její další využití.

Sekce : Restaurování a konzervování kovů

Restaurování lampy na věčné světlo

Autor: Radek Němec
Ročník: B4
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jiří Děd, CSc.

Práce dokumentuje restaurování lampy na věčné světlo se skleněnou ručně malovanou výplní. V rámci průzkumu byla provedena prvková analýza základního materiálu, povrchové úpravy a pájky pomocí elektronové mikrosondy. Kovová část lampy byla odlita ze zinku s povrchovou úpravou provedenou niklováním. Pro spojení jednotlivých dílů byla použita cíno - olověná pájka. Metalografickou analýzou výbrusu vzorku, odebraného z nepohledového místa konstrukce lampy, byla určena struktura povrchové úpravy galvanického pokovení, sestávající z mosazné mezivrstvy a povrchové niklové vrstvy. Restaurování zahrnovalo celkovou demontáž lampy, její čištění, mechanické odstranění korozních produktů z litých dílů a ze železných závitových tyčí, spojujících lité konstrukce. Sjednání povrchové úpravy bylo provedeno mechanicky pomocí mosazných rotačních kartáčů. Deformace a trhliny krycích dutých tyčí se čtvercovým profilem byly odstraněny a pro jejich zpevnění bylo užito epoxidové lepidlo. Čištění skleněné výplně bylo provedeno pomocí vody s přídavkem detergentu. V horní části lité konstrukce byly vyměněny železné šrouby za nové z mosazi. Na závěr byla lampa smontována do původního stavu a byl opraven a zprovozněn řetězový polohovací mechanismus. Lampa byla konzervována lakem Paraloid B 72 s ohledem na její umístění v expozici.

Sekce : Restaurování a konzervování kovů

Mešní tabulka

Autor: Zuzana Pecenová
Ročník: B3
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Šárka Msallamová



Mešní tabulka pocházející z počátku 19. století s textem z Janova evangelia. Na dřevěnou konstrukci je nasazen mosazný rámeček s lisovaným klasicistním dekorem a tepanými listky v rozích. Předmět byl mechanicky poškozen a chyběly dva listky. U dřevěného rámu byla zachována pevnost a dřevo nebylo napadeno plísněmi ani dřevokazným hmyzem. List papíru byl znečištěn prachem. Byla provedena prvková analýza za účelem zjištění složení materiálu a nátěrových hmot na zadní straně rámečku. Mosaz se skládala ze 67 % Cu a 33 % Zn a laky byly organické na bázi alkydové pryskyřice. Našly se i stopy po stříbření. Po demontáži byl mosazný rámeček chemicky a mechanicky zbaven korozních produktů a byly vyrovnány drobné deformace. Chybějící listky byly doplněny novými, které byly z estetického důvodu kontaktně postříbřeny. Dřevěný rám

byl natřen prostředkem proti dřevokaznému hmyzu. List papíru byl mechanicky očištěn, odkyselen, následně naklížen a vylisován (prováděno v Národním archivu za pomoci Ing. Michala Ďuroviče). Ochranné sklo bylo pouze omyto vodou. Mosazné části byly konzervovány Paraloidem B72 a celek byl smontován pomocí původních hřebů. Byl navržen ochranný režim památky s ohledem na její další uložení.

Sekce : Restaurování a konzervování kovů

Dveřní zámek

Autor: Martin Poništ
Ročník: B3
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jan Stoužil, Ph.D.



V rámci práce byl restaurován dveřní zámek ze začátku 20. století z kostela sv. Michala Archanděla. Byl proveden průzkum a určení materiálů (ocel - metalografie, organický nátěr - FTIR). Zámek byl rozmontován a odmaštěn. Původní nátěr byl odstraněn pomocí nitroředidla, zbytky korozních produktů pak 5% roztokem Chelatonu. Stabilizace byla provedena roztokem dekananu a finální úprava voskem rozpuštěným v benzínu.

Sekce : Restaurování a konzervování kovů

Restaurování divadelního okuláru z počátku 20. století

Autor: Ludmila Vaňková-Svozilová
Ročník: B4
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Alena Michalcová



Obsahem práce je analýza stavu a provedení restaurátorského zásahu na divadelním okuláru z počátku 20. století. Cílem práce bylo obnovit funkčnost předmětu. Okulár z bílé mosazi tzv. pakfong (určeno analýzou na elektronově disperzním mikroskopu, složení: Cu (60%) Zn 20% a Ni 20%.) je vyrobený technikou lití a tlačením do formy, jednotlivé díly jsou k sobě připevněny lisováním a hodinářskými šroubky. Okulár je zdobený artdecoovým vzorem, který byl zhotoven na gravírovacím stroji.

Okulár byl zdeformovaný, povrch byl pokryt korozními produkty železa a mědi. Mezi železnými šrouby a slitinou mědi vznikl galvanický článek, který zapříčinil další korozi. Okulár bylo nutné demontovat a vyjmout optická skla. Korozní produkty byly odstraněny chemickou cestou, nečistoty byly odstraněny pomocí roztoku 5% kyseliny sírové. Původní šroubky byly nahrazeny replikami z bílé mosazi, pružinky byly vyrobeny z ocelového drátu dle původních rozměrů. Výměna byla nutná v důsledku pokročilé koroze součástí a jejich nefunkčnosti. Opětovnému galvanickému rozpuštění bylo zabráněno teflonovou páskou. Na očištěný a odmaštěný povrch předmětu byla následně nanášena vrstva 10% Paraloidu B72. Předmět by měl být uložen při stabilní teplotě 18°C +/- 5°C. Relativní vlhkost vzduchu nesmí přesáhnout 65% s min. kolísáním.

Sekce : Restaurování a konzervování kovů

Rokoková terina s víkem

Autor: Petra Witoszková
Ročník: B4
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Šárka Msallamová, Světlana Spiwoková, restaurátor s licencií, PhDr.

Terina je oválného tvaru (patka 18x12,5 cm, vysoká 23,7 cm), jemně žebrovaná, usazena na nízké patce. Víko i tělo teriny je vyrobeno litím do formy ze dvou kusů. Víko bylo deformováno po obvodu a celá nádoba byla pokryta krustou korozních produktů a nánosy nečistot. Povrch teriny je poškrábán. Chemické složení použité slitiny k výrobě teriny bylo určeno pomocí elektronového mikroskopu HITACHI S-450 s EDS analyzátozem KEVEX Delta5. K analýze korozních produktů byla použita RTG difrakční analýza s využitím difraktometru PAN analytical X'Pert PRO se softwarem High Score plus. Byl zhotoven metalografický výbrus ze základního kovu teriny. Na základě zjištěných vlastností slitiny bylo dále přistupováno k předmětu. Slitina cínu a olova použitá k odlití nádoby a víka teriny je podeutektická. Na metalografickém výbrusu byly pozorovány jemné lamely eutektické směsi cínu a olova v bílé matici β modifikace cínu, který se vyskytuje v tetragonální krystalické soustavě. Tato struktura dodává slitině větší pevnost. Terina byla tryskána Balotinou 159, a povrch byl přeštěněn ocelovou vatou. Předmět by měl být uložen při teplotě s minimálními teplotními a vlhkostními výkyvy. Doporučuji opatrnou manipulaci v bavlněných rukavičkách, aby nedošlo k mechanickému poškození pádem a znečištění povrchu teriny. Konzervace byla provedena mikrokrytalickým voskem.

Sekce : Restaurování a konzervování skla a keramiky

Restaurování tuhovaného talíře a misky z období slezskoplatěnické kultury

Autor: Daniela Alblová
Ročník: B4
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Alexandra Kloužková, CSc., Jana Malá, licencovaný restaurátor

Předmětem práce bylo restaurování nádob pocházejících z archeologického naleziště v Kostelci nad Orlicí, z hrobu z období slezskoplatěnické kultury (1000 – 500 l.př.n.l.). Miska i talíř byly ve formě střepů, které byly pokryty místy velmi silnou vrstvou zeminy. S ohledem na nízkou teplotu výpalu a povrch opatřený tuhováním byly střepy velmi šetrně očištěny a po jejich vyhledání byly oba předměty slepeny pojivem Dispercoll D2. Vzorky střepů byly podrobeny analýzám RTG fluorescence a RTG difrakce, ze zjištění přítomnosti jílových minerálů vyplývá nízká vypalovací teplota nádob. Pro snížení procesu stárnutí keramického střepu těchto předmětů je důležité dodržet podmínky uložení v depozitu muzea.

Sekce : Restaurování a konzervování skla a keramiky

Restaurování secesní vitráže s motivem koupající se ženy

Autor: Pavla Doležalová
Ročník: B4
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Zuzana Cílová, Ph.D., Petr Coufal, licencovaný restaurátor

Předmětem práce bylo restaurování vitráže z roku 1920. Práce byla prováděna v ateliéru Umělecké sklenářství Jiříčka – Coufal (Praha). Vitráž byla výrazně poškozená. Místy byl olověný profil natolik narušen, že došlo k posunutí, až k rozpojení sítě a k následnému vypadnutí některých skel. Mnoho skel bylo též na několika místech popraskaných. Sklo bylo zanesené nečistotami. Výjev vitráže tvoří figurální motiv koupající se ženy v přírodě. Dominantou kompozice je lidská postava a vzrostlý strom s bohatou korunou, která pokrývá celou horní část vitráže. Vitráž byla složena z 57 kusů barevných ornamentálních skel, které byly zasazeny do olověného H profilu o rozměru 7 mm a 5 mm. Na základě analýz (XRF, SEM/EDS) byla skla charakterizována jako sodno-vápenatá s vyhovující chemickou odolností.

Sekce : Restaurování a konzervování skla a keramiky

Restaurování džbánků z archeologického výzkumu Salmovského paláce

Autor: Bc. Šárka Jonášová DiS.
Ročník: B2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Zuzana Cílová, Ph.D.

Při archeologickém výzkumu Salmovského paláce čp. 186/IV na Hradčanském náměstí v Praze, byly nalezeny v odpadní jímce fragmenty nádob ze světle a tmavě modrého zakaleného skla. Vzhled střepů, resp. jejich zabarvení je velmi netypické pro historická skla nalézaná v českém prostředí. Cílem práce bylo vyhledat střepový materiál mezi ostatními skleněnými nálezy, navrhnout restaurátorský záměr a blíže charakterizovat střepový materiál - určit chemické složení skla, popř. použítá barviva a kaliva. Uvedená měření byla provedena metodou SEM/EDS. Při rekonstrukci tvaru první nádoby bylo zjištěno, že se jedná o džbán bez nálevky světle modré barvy, doplněný uchem a spinou tmavě modré barvy. Druhá nádoba je také džbán bez nálevky, ovšem základní sklo, spina i ucho jsou zhotoveny z tmavě modré zakalené skloviny. Na základě získaných informací o předmětech a navrženého restaurátorského záměru bylo provedeno další čištění pomocí destilované vody a acetonu. Ke slepení předmětů do původních tvarů bylo použito dvousložkové epoxidové adhezivum- HXTAL NYL-1. V neposlední řadě byly navrženy vhodné podmínky uložení a doporučený způsob manipulace s předmětem.

Sekce : Restaurování a konzervování skla a keramiky

Restaurování nálezů ze záchranného archeologického výzkumu u Kolína

Autor: Michaela Knížová
Ročník: B4
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Zuzana Cílová, Ph.D., Mgr. Estelle Ottenwelter

Předmětem práce bylo restaurování skleněných předmětů nalezených při archeologickém výzkumu u Kolína. Mezi zpracovaným materiálem byly skleněné korálky, zlomky skleněných korálků, skleněný rozdělovač a zlomek skleněného náramku. Předměty pocházejí z pohřebišť a sídlišť z období laténu a raného středověku. Sklo bylo ve většině případů v dobrém stavu, pouze s lokálními projevy koroze na jeho povrchu. V rámci restaurátorského zásahu byly předměty očištěny destilovanou vodou a vyhledané k sobě patřící části byly slepeny. V případech, kde to stav předmětů vyžadoval, byla provedena konsolidace skla. Pro chemickou analýzu (SEM/EDS) bylo vybráno šest reprezentativních předmětů, charakterizující tento soubor. Analýzy prokázaly, že se jedná o skla sodno-vápenatá- v souboru se nacházejí jak skla natronová, tak i skla popelová. Dále bylo určeno, že použítá kaliva v zakalených sklech jsou na bázi antimonu.

Sekce : Restaurování a konzervování skla a keramiky

Restaurování archeologického obalového skla z objektu Šatlava v Hradci Králové

Autor: Vladimíra Šimková
Ročník: B4
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Dr. Ing. Dana Rohanová

Při záchranném archeologickém průzkumu objektu Šatlava v centru Hradce Králové byly kromě jiných předmětů nalezeny také fragmenty dvou skleněných, zeleně zbarvených láhví, datované cca do 18. - 19. století. Po očištění střepů a rekonstrukci tvaru se ukázalo, že nádoby byly tvarovány rozdílnou technikou a ve větším časovém odstupu, než byl prvotní odhad. K tomuto zjištění vedlo studium stop tvarovacího procesu a analýza chemického složení skel. Starší láhev (17. - 18. století) byla tvarována v kvalitní formě a dokončena ručně bez použití lahvářských a ústních kleští, které se začaly používat až 19. století. Chemické složení skla, zjištěné metodou SEM/EDS ukázalo, že se jedná o sklovinu draselná-vápenatá-křemičitou s vysokým obsahem K_2O . Skloviny podobného složení byly typické pro české prostředí v období renesance. Láhev mladšího data (cca 19. století) byla tvarována ručně, avšak do nekvalitní formy a k dotvarování již byly použity lahvářské kleště. Také chemické složení skla potvrdilo mladší dobu vzniku nádoby; obsah oxidů draselného a vápenatého je poloviční oproti starší láhvi a navíc sklovina byla pravděpodobně čerena pomocí NaCl. Obě láhve se zachovaly pouze ve fragmentech, avšak některé detaily na povrchu střepů, typické pro určitý způsob výroby a tvarování, významně pomohly k přesnějšímu určení doby vzniku nádob.

Sekce : Restaurování a konzervování skla a keramiky

Restaurování skleněných předmětů z polykulturního naleziště u Kolína

Autor: Kira Tokareva
Ročník: B4
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Zuzana Cílová, Ph.D., Mgr. Estelle Ottenwelter

Náplní práce bylo restaurování souboru zahrnujícího barevné korálky a zlomky náramků pocházejících ze záchranného archeologického výzkumu u Kolína (zóny I-X) z let 2008-2009. Restaurátorské práce byly provedeny ve spolupráci s Archeologickým ústavem AV ČR, Praha, v. v. i. - oddělení záchranných výzkumů. Drobné skleněné předměty byly datovány do doby laténské a období raného středověku; vyrobeny byly pravděpodobně technikou navíjení na kovovou trubičku. Předměty byly po převzetí od archeologů značně znečištěny (v sáčkách byly přítomny zbytky písku a hlíny), a proto vyžadovaly důkladné očištění. Vzhledem ke fragmentárnosti některých předmětů bylo nutné provést jejich celkové zpevnění pomocí akrylátové pryskyřice Paraloid B-72. V rámci restaurátorského průzkumu byly provedeny chemické analýzy metodou SEM/EDS a to jak složení skla, tak i korozních vrstev. Podle výsledků analýz lze skla charakterizovat jako sodno-vápenatá, typická pro daná období.

Sekce : Konzervování a restaurování textilií

Restaurování liturgických předmětů

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

Ve své práci se zabývám restaurováním liturgických textilií – bursy a pally – ze sbírek Pražského arcibiskupství.

Restaurování zahrnuje popis předmětů, jejich dokumentaci (technické výkresy, fotografie), průzkum předmětů včetně jejich historického a symbolického zařazení, určení původní funkce, výklad barev a motivů... Dále pak identifikaci textilních vláken a papíru z výztuží, analýzu kovů, a textilně technologický rozbor. Poté proces čištění (praní podšívek, brokátů a kovových částí; lokální odstraňování voskových skvrn), odkyselení papírových výztuží a šicí práce (zachytávání flotujících nití, vysprávka děr atp.)

Výstupem z celé práce je restaurátorská zpráva, v níž jsou mj. uvedeny i doporučené podmínky pro uložení v depozitáři a expozici, stejně jako literatura, s níž jsem při procesu restaurování pracovala.

Sekce : Restaurování a konzervování textilií

Reštaurovanie rukávcov

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

Rukávce boli darované VŠCHT. Pochádzajú zo ženského kroja zo zliechovského kraja, z okolia Čičmian, približne z 20. rokov 20. storočia. Sú typické svojou výšivkou aj farebnosťou. Pri prevzatí boli silne znečistené. Hoci sami o sebe neboli veľmi poškodené, na prednej a zadnej strane plátna sa nachádzali hrdzavé flaky a na prieramkoch bola zapustená bordová farba z výšivky. Najviac poškodená bola strojová čipka, ktorej väzba bola silno poškodená hlavne v miestach prichytenia ku golieru a na spodných cípoch. V minulosti bola na niektorých miestach opravovaná tieto zásahy však boli veľmi hrubé. Pred celkovým reštaurovaním bol prevedený historický a textilno-technologický prieskum (makroskopia, mikroskopia a skúška stálofarebnosti) a na základe výsledkov sa stanovil ďalší postup reštaurovania. Jeho hlavnou náplňou bolo čistenie, hlavne lokálne čistenie škvŕn kyselinou šťavelovou a reštaurovanie strojovej čipky. Tá bola demontovaná a podložená krepelínou a neskôr nitku po nitke preskeletovaná a začistená do okrajov čipky. Nakoniec bol predmet zmontovaný do pôvodného stavu. Pri práci bola vytvorená kompletná fotodokumentácia a reštaurátorská správa.

Sekce : Restaurování a konzervování textilií

Restaurování korálkové dámské taštičky

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

Restaurování dámské taštičky, ze sbírek Muzea hlavního města Prahy. Taštička typu Reticule je datována do 2. poloviny 19.století. Taštička má rozměr 12 x 19 cm a je tvořena korálkovou půdou s rostlinným motivem a háčkovaným nápletem.

Předmět byl silně znečištěn prahovými nečistotami, háčková síť byla silně poškozena, v ploše bylo několik perforací.

Restaurátorský zásah zahrnoval dokumentaci a chemicko-technologické rozbor (rozbor materiálu, identifikace vláken, analýza korálku). Podle výsledku rozbor byl stanoven postup restaurování: praní mokrou cestou, sušení, doplnění háčkové sítě, zajištění perforací v korálkové půdě, adjustace předmětu.

Sekce : Restaurování a konzervování textilií

Textilie ze Salmovského paláce

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

Jedná se o textilní fragmenty, které byly nalezeny v rámci záchranného archeologického výzkumu probíhajícího při rekonstrukci objektu Salmovského paláce na Hradčanském náměstí v Praze. Fragmenty se nacházely ve dvou odpadních jímkách a jsou datovány do poloviny 17. století.

Nález byl ve vlhkém stavu rozdělen do PE sáčků a uložen do chladničky – zachování vlhkosti. Fragmenty byly obaleny silnou vrstvou zeminy. Před konzervací byl proveden mikrobiologický průzkum, současně s mikrobiologickým průzkumem byly vzorky zamrazeny – zamezení rozvoje plísní. Následovala sanace dezinfekčním prostředkem, mechanické čištění textilních fragmentů pomocí jemného štětce ve vodní lázni bez čínidla, sušení ve vodorovné poloze, kresebná dokumentace a označení fragmentů, textilně technologický rozbor – vazebný rozbor materiálu a identifikace vláken, adjustace. Během práce byla vytvořena fotodokumentace a kompletní restaurátorská zpráva.

Sekce : Restaurování a konzervování textilií

Restaurování manipulu

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

Restaurování manipulu - za účelem vyčištění a zpevnění. Manipul býval součástí liturgického oděvu, nosil se na levém předloktí, vyvinul se z potního šátku.

Postup restaurování:

1. průzkum předmětu, demontáž všech částí manipulu a odebrání vzorků.
2. Textilní technologické rozborů použitého materiálu – analýza vláken a rozborů vazeb.
3. Čištění jednotlivých částí manipulu (podšívka, modré plátno, kovová porta) – jen výšivka praná dohromady s výztužným plátnem, kvůli prošitým stehům výšivky nešlo demontovat a prát samostatně.
4. Barvení přidaného zpevňujícího materiálu – barvení hedvábné krepelíny pod kovové porty a bavlněného plátna pod vrchní modrou tkaninu.
5. Samotné restaurování – přichycení uvolněných stehů vlněné výšivky nití taženou z krepelíny; podložení kovových port krepelínou; zpevnění modré tkaniny obarveným bavlněným plátnem, poté skeletáž poškozených míst.
6. Montáž všech částí do původní podoby, fotodokumentace a vytvoření restaurátorské zprávy.

Sekce : Restaurování a konzervování textilií

Restaurování fragmentů manipulu

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

Práce se týká restaurování liturgického předmětu. Před restaurováním jsem provedla průzkum manipulu a popsala jeho stav před restaurováním. Na základě informací získaných z průzkumu jsem navrhla postup restaurování manipulu. Po dokončení restaurování jsem předmět opět fotograficky zdokumentovala a doporučila podmínky pro jeho uložení v depozitáři i pro expozici.

Sekce : Restaurování a konzervování textilií

Restaurování Traje della luces – oděvu matadora

Autor: Lucie Radoňová
Ročník: B4
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Markéta Škrdlantová, PhD.

Soubor oděvu z vlastnictví National Museum of Ethnography Malta, který obsahuje 5 částí, je ve velmi špatném stavu, textilie jsou degradované a oděv je celkově znečištěn neznámým bílým práškem. Předměty byly zdokumentovány, byly provedeny analýzy a pro čištění souboru bylo použito vakuové sání. Pro vhodnou adjustaci byly vyrobeny výztuže a krabice z inertních materiálů.

Sekce : Konzervování a restaurování textilií

Konzervování archeologického souboru z odpadní jímky

Autor: Květa Richtmrová
Ročník: B4
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Bc. Jana Víchová, DiS.

Poster pojednává o konzervování textilních fragmentů nalezených v rámci záchranného archeologického výzkumu ve dvou odpadních jímkách situovaných na nádvoří mezi Salmovským a Schwarzenberským palácem v Praze na Hradčanech.

Po vyjmutí archeologem a předání do Restaurátorských a konzervátorských dílen Správy Pražského hradu následoval mikrobiologický průzkum a následně sanace. Dále poster dokumentuje mokré čištění, jehož cílem bylo očistit fragmenty od nánosů zeminy tak, aby je bylo možné zachovat a následně podrobit textilně technologickému průzkumu. Ten byl zaměřen na průzkum všech důležitých informací o textilních fragmentech (materiál, textilní vazba, zákrut příze, atd.) Zjištěné údaje ukázaly velkou rozmanitost textilií poloviny 17. století ale také podmíněnost jejich zachování v prostředí jímky.

Na závěr byly nejzajímavější fragmenty adjustovány na desku pod sklo pro další možné vystavení, ostatní byly uloženy do uzavíratelných polyethylenových sáčků.

Sekce : Restaurování a konzervování textilií

Restaurování stuhy z mělnického kroje

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

Restaurovaný předmět byl jedním ze dvou dílů kompletu, který tvořila zástěra a stuha. Jedná se o restaurování stuhy z mělnického kroje.

Na předmětu jsem provedla materiálový rozbor textilních materiálů. Čištění probíhalo v destilované vodě bez přidavku detergentů. Celou stuhu jsem podložila předem obarvenou francouzskou krepelínou a vyskeletovala jsem potrhání místa pomocí kladené niti. Celý průběh práce jsem průběžně pořizovala fotografickou dokumentací. Jako závěr své práce jsem vypracovala restaurátorskou zprávu a předala její elektronickou kopii muzeu v Roztokách, kterou jsem demontovala.

Sekce: Informatika a chemie

Elektronický průvodce chemickým kreslením

Autor: Martin Mastný
Ročník: M1
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Ing. Bedřich Košata, Ph.D.

Jedná se o elektronickou pomůcku, která uživatele názorně provede běžnými operacemi prováděnými v chemickém kreslicím editoru. Práce má podobu přehledného webového portálu, který obsahuje materiály k jednotlivým operacím rozříděné pomocí systému klíčových slov a rejstříků.

Sekce: Informatika a chemie

Průzkum chemických formátů založených na XML

Autor: Jan Mokřý
Ročník: M2
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Ing. Miloslav Nič, Ph.D.

Vysoký počet a nejednotnost spolu s absencí výrazného standardu dovolujícího záznam, uchování a flexibilní zpracování chemických dat jsou charakteristikou současného stavu na poli chemických formátů. Cílem této práce je zmapování perspektivních chemických a biochemických formátů založených na XML (Extensible Markup Language). U vybraných formátů je dostupná dokumentace automatizovaně zpracována a dále manuálně opravena a doplněna pro zobrazení na portálu zvon.org. Informace o vybraných formátech jsou pomocí jazyka Python extrahovány z dostupných specifikací (XSD či RNG Schema nebo DTD a další zdroje) a ukládány k dalšímu zpracování do Google Spreadsheet dokumentů, kde je lze manuálně upravit a případně sdílet pro snazší spolupráci. Nakonec je z upravených dat vygenerována kompletní interaktivní reference pro daný formát, která je zpřístupněna na internetu. Hlavním vyústěním práce bude vyextrahování vhodných konceptů pro následnou tvorbu formátu založeného na XML a umožňujícího flexibilní zpracování většiny běžných chemických dat včetně jejich snadné publikace na internetu.

Sekce : Informatika a chemie

CDS Invenio, softwarové řešení pro NUŠL

Autor: Tomáš Müller
Ročník: M2
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Mgr. Daniel Svozil, Ph.D.

V Národní technické knihovně vznikl projekt Národní úložiště šedé literatury (NUŠL), který si klade za cíl usnadnit a přístup k šedé literatuře. Projekt je řešen formou centrálního repozitáře, který bude získávat metadata nebo i plné texty z jiných lokálních repozitářů a do kterého se budou i vkládat nové dokumenty. Pro získávání, uchovávání a správu digitálních dokumentů šedé literatury a jejich metadat je zapotřebí užití sofistikovaného softwarového systému. CDS Invenio je softwarové řešení pro potřeby NUŠLu jak pro centrální úložiště, které dokumenty získává a zpřístupňuje, tak pro spolupracující organizace, které šedou literaturu produkují. Jeho komplexita, flexibilita a otevřený kód zaručují splnění téměř všech požadavků, které NUŠL na tento systém klade.

Sekce: Informatika a chemie

Metody predikce toxikologických vlastností látek jako nástroj pro plnění požadavků nařízení REACH a CLP

Autor: Tomáš Novotný
Ročník: M2
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Mgr. Daniel Svozil, Ph.D.

Cílem této práce je srovnání metod pro predikci toxikologických vlastností látek jako alternativy k experimentálním studiím na živých organismech. Tyto metody jsou zkoumány z hlediska jejich praktické využitelnosti pro potřeby legislativy REACH a CLP.

Nařízení Evropské komise označovaná REACH a CLP, z nichž na přelomu let 2010 a 2011 vyplývají první povinnosti, ukládají subjektům chemického průmyslu registraci látek a směsí uváděných na trh v Evropské unii. Nedílnou a podstatnou součástí registrace jsou toxikologické vlastnosti těchto látek a směsí. Především z etických důvodů jsou testy toxicity na živých organismech považovány za poslední možnost a mohou být v řadě případů spolehlivě nahrazeny alternativními metodami in silico.

Tato práce se zaměřuje na metody (Q)SAR a read-across. Výzkum metod pro predikci toxicity látek byl významně povzbuzen nabytím platnosti nařízení REACH a CLP a je klíčový pro úspěšné plnění povinností z nich plynoucích, neboť experimentální testování všech látek uváděných na trh v Evropské unii in vivo je neetické, časově náročné a ekonomicky nákladné.

Sekce: Informatika a chemie

Strukturní vlastnosti protein-DNA rozhraní

Autor: Filip Sedlák
Ročník: M1
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Mgr. Daniel Svozil, Ph. D.

Cílem práce je vytvoření sady nástrojů, které usnadní strukturní analýzu rozhraní mezi biologickými makromolekulami na základě dat popisujících trojrozměrnou strukturu molekul. Přidaná hodnota nových nástrojů spočívá v hromadném zpracování souborů s experimentálními daty, vytvořením databáze kontaktů a analýze dat v této databázi. Generují se informace o rozhraních mezi molekulami, jakož i základní statistika kontaktů mezi jednotlivými rezidui. Součástí práce je i demonstrace použití vytvořených nástrojů provedením základní analýzy rozhraní mezi DNA a proteiny. Experimentální data o protein-DNA komplexech byla získána z volně dostupné databáze RCSB Protein Data Bank. Vytvářené programy pracují s daty ve formátu PDB a pro nalezení kontaktů mezi molekulami využívají program HBPLUS.

Sekce: Informatika a chemie

Automatická indexace dokumentů v Národním úložišti šedé literatury

Autor: Ctibor Škuta
Ročník: M2
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Ing. Miloslav Nič, Ph.D.

Rozvoj internetu ulehčil autorům proces distribuce šedé literatury. S distribucí dokumentů by však měla být spojena také odpovědnost v podobě jejich indexace. Přiřazení správných hesel může být v některých případech intelektuálně a časově velmi náročné. Cílem práce je integrace software pro automatickou indexaci, který by zastoupil roli člověka, indexátora, bez signifikantního vlivu na kvalitu výstupu. Tento nástroj se stane součástí projektu Národního úložiště šedé literatury (NUŠL), který je spravován Národní technickou knihovnou (NTK). NUŠL využívá digitální repozitář CDS Invenio, jehož modularita umožňuje přidávání uživatelsky definovaných funkcí. Jako indexační nástroj byl zvolen Maui Indexer ve spojení s Polytematickým strukturovaným heslářem (PSH). PSH je řízený slovník lexikálních jednotek vyvíjený a používáný NTK. Maui Indexer umí pracovat se slovníky vyjádřenými v sémantickém formátu Simple Knowledge Organisation System (SKOS), ve kterém je PSH dostupný. Kombinací těchto součástí vznikne softwarové řešení pro automatickou indexaci dokumentů v českém jazyce.

Sekce: Informatika a chemie

Knihovna datových typů pro validace chemickoinformatických dat

Autor: Bc. Milan Voršilák
Ročník: M2
Ústav: Laboratoř Informatiky a chemie
Školitel: Ing. Jiří Jiráť, Ph.D.

XML dokument je běžný soubor pro přenášení a úschovu dat, proto jsou důležité jeho struktura a obsah dat. Pro validace se využívají schémata. Mezi nejužívanější patří Relax NG a XML Schema. Proto pro ně byly vytvořeny knihovny datových typů, implementující identifikátory z oblasti látkového a knihovnického značení. Tyto knihovny byly popsány dokumentací a zkontrolovány testovacími schématy, či jinými prostředky. Výstupem této práce je pak balíček obsahující tyto knihovny, včetně příkladů jejich použití.