

Seznam sekcí a složení komisí

- Sekce: **Anorganická chemie**
posluchárna A211, 9.00 hod.
- Komise:
Předseda: Prof. Dr. Ing. David Sedmidubský
Členové: Ing. Stanislava Stará
Ing. David Petrýdes, Ph.D. (Preciosa)
Ing. Aleš Strejc, Ph.D. (Moser)
Ing. Irena Hoskovcová, CSc. (organizační tajemník)
- Sekce: **Anorganická technologie I**
posluchárna A25, 9.00 hod.
- Komise:
Předseda: Prof. Dr. Ing. Josef Krýsa
Členové: Dr. Ing. Vlastimil Fíla
Ing. Petra Novotná, Ph.D.
Ing. Roman Kodým
Ing. David Gabriš (organizační tajemník)
- Sekce: **Anorganická technologie II**
posluchárna 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)
- 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.
- Sekce: **Kovové materiály II (plakátová)**
hlavní chodba ústavu 106, 9.00 hod.
- Komise:
Předseda: Prof. Ing. Pavel Lejček, DrSc.
Členové: Ing. Petr Dvořák, Ph.D.
Doc. Ing. Jaroslav Bystrianský, CSc.
- Sekce: **Anorganické nekovové materiály I (plakátová)**
posluchárna A02, 9.00 hod.
- Komise:
Předseda: Prof. Ing. Josef Matoušek, DrSc.
Členové: Doc. RNDr. Ondřej Gedeon, Ph.D.
Doc. Ing. František Škvára, CSc.
Ing. František Novotný, CSc.

Ing. Eva Gregorová, CSc. (organizační tajemník)

Sekce: **Anorganické nekovové materiály II (plakátová)**
posluchárna C12, 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)

Sekce: **Organická chemie M1 (magisterská)**
posluchárna A11, 9.00 hod.

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Členové: Prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

Ing. Tomáš Martinů, Ph.D.

Ing. Hana Kotoučová (PedF UK Praha)

Ing. Václav Šťastný, Ph.D. (Re&D VÚFB)

Ing. Hanuš Slavík (Hexion)

Ing. Jiří Nohejl (Sigma-Aldrich)

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

Sekce: **Organická chemie M2 (magisterská)**
posluchárna A278C, 9.00 hod

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Igor Linhart, CSc.

Členové: Prof. Ing. Ivan Stibor, CSc. (ÚOCHB AV ČR)

Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.

RNDr. Jan Kotek, Ph.D. (PřF UK)

Ing. Ivan Hlaváček, CSc. (Interpharma Praha)

Ing. Martin Káš (Synthon)

Ing. Petra Miketova, Ph.D., MBA (Cayman Pharma)

Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D. (organizační tajemník)

Sekce: **Organická chemie M3 (magisterská)**
posluchárna A250, 9.00 hod

Komise:

Předseda: Doc. Ing. František Hampl, CSc.

Členové: Prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.

Dr. Ing. Jana Hodačová

Ing. Petr Holý, CSc. (ÚOCHB AV ČR)

Ing. Jan Kroupa (Proxim)

Ing. Rudolf Smrž, CSc. (Synthon)

Ing. Pavel Šebek, CSc. (Zentiva)

Ing. Michal Himl, Ph.D. (organizační tajemník)

Sekce: **Organická chemie B (bakalářská)**
místnost N08 (Laboratoř A), 9:00 hod.

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Radek Cibulka, Ph.D.
Členové: Prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.
Ing. Václav Kozmík, CSc.
Ing. Květuše Mašková (Vitrum)
Ing. Jiří Vokál Ph.D. (Lach-Ner)
Mgr. Martin Švec (P-Lab)
Ing. Martin Skalický (organizační tajemník)

Sekce: **Organická technologie**
posluchárna AS31a, 9.00 hod.

Komise:
Předseda: Doc. Ing. Bohumír Dvořák, CSc.
Členové: Ing. Tomáš Herink, Ph.D.
Ing. Ladislav Kurc, CSc.
Ing. Martin Zapletal (organizační tajemník)

Sekce: **Syntéza a výroba léčiv I**
posluchárna A081a, 9.00 hod

Komise:
Předseda: Doc. Ing. Vratislav Tukač, CSc.
Členové: Doc. Ing. Pavel Čapek, CSc.
Ing. Jaroslav Šilhánek, CSc.
Ing. Iva Paterová, Ph.D. (organizační tajemník)

Sekce: **Syntéza a výroba léčiv II**
posluchárna A01, 9.00 hod

Komise:
Předseda: Prof. Ing. Jiří Hanika, DrSc.
Členové: Ing. Kamila Syslová
Ing. Jiří Švrček
Ing. Jan Patera, Ph.D. (organizační tajemník)

Sekce: **Analýza a vlastnosti léčiv (přednášková)**
posluchárna A31, 8:00 hod.

Komise:
Předseda: prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl DSc. (108)
Členové: RNDr. Alexandr Jegorov, CSc. (Teva-Galena, Opava)
Dr. Ing. Michal Hušák (108)
Doc. Ing. František Kovanda, CSc. (108)
Doc. Ing. Petr Kačer, PhD. (111)
Ing. Bohumila Jakubíková (108) (organizační tajemník)

Sekce: **Chemie a technologie polymerů (přednášková)**
posluchárna B32, 9.00 hod.

Komise:
Předseda: Doc. Ing. Petr Sysel, CSc.
Členové: Doc. Ing. Antonín Kuťa, CSc.
Ing. Radka Kalousková, CSc.
Ing. Zdeněk Hrdlička, Ph.D.
Ing. Jan Merna, Ph.D.

Ing. Jana Kredatusová (tajemník)

Sekce: **Materiálové inženýrství
posluchárna B360, 9.00 hod.**

Komise:

Předseda: prof. Ing. Jindřich Leitner, DrSc.

Členové: doc. Ing. Petr Macháč, CSc.

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

doc. RNDr. Josef Stejskal, CSc., Ústav anorganické chemie

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

Sekce: **Konzervování a restaurování organických materiálů (plakátová)
chodba A přízemí, 10.15 hod.**

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Petr Kotlík, CSc.

Členové: Ing. Irena Kučerová, Ph.D.

Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.

Dr. Ing. Michal Ďurovič

Bc. Jana Víchová, DiS., licencovaný restaurátor

Sekce: **Konzervování a restaurování kovových materiálů (plakátová)
chodba A přízemí, 9.00 hod.**

Komise:

Předseda: Prof. Ing. Pavel Novák, CSc.

Členové: Ing. Milan Kouřil, Ph.D.

Ing. Jan Stouřil, Ph.D.

Ing. Jiří Děd, CSc.

Ivan Houska, licencovaný restaurátor

Jaroslav Prášil, licencovaný restaurátor

Norbert Riegel, PhDr., licencovaný restaurátor

Sekce: **Konzervování a restaurování anorganických nekovových materiálů
(plakátová)
chodba A přízemí, 9.00 hod.**

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Jaroslav Kloužek, CSc.

Členové: Ing. Zuzana Cílová, Ph.D.

Ing. Kateřina Doubravová, Ph.D.

Ing. Alexandra Kloužková, CSc.

MgA. Milan Krajíček

Dr. Ing. Dana Rohanová

Petr Coufal, licencovaný restaurátor

Ljuba Svobodová, licencovaný restaurátor

Sekce: **Informatika a chemie
posluchárna BS2, 9.00 hod.**

Komise:

Předseda: Ing. Miloslav Nič, Ph.D.

Členové: Ing. Bedřich Košata, Ph.D.
Mgr. Miloslav Šimek
Mgr. Daniel Svozil, Ph.D.
Ing. Jiří Jirát, Ph.D. (organizační tajemník)

Sekce : Anorganická chemie

Vliv jednomocného modifikátoru silikátového skla na „ponoření“ planární optické vlnovodné vrstvy

Autor: Bc. Jakub Altšmíd
Ročník: M1
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: Ing. Pavla Nekvindová, Ph.D.

Ovládání optického svazku pomocí planárních optických členů v současnosti velmi rychle nahrazuje převod optického signálu na signál elektrický. K tomu, aby byl přenos optického signálu co nejefektivnější, je nutné minimalizovat ztráty signálu do okolí. Jednou z možností, jak toho dosáhnout, je takzvané ponoření vlnovodné struktury do substrátu pomocí zpětné iontové výměny v elektrickém poli. Takto ponořené struktury vykazují menší ztráty signálu do okolí a jeví se i jako vhodné řešení pro nízkoztrátové spojení s optickým vláknem.

Ve své práci jsem se zabýval vlivem složení skelného substrátu na proces ponoření optické vrstvy. Ponoření bylo realizováno zpětnou iontovou výměnou $\text{Ag}^+ \leftrightarrow \text{Na}^+$ v elektrickém poli, hloubku ponoření jsem zjišťoval pomocí optického polarizačního mikroskopu.

Z výsledků plyne, že vhodnou kombinací technologických podmínek a typu skla je možné ponořit vlnovodnou vrstvu až 100 μm pod povrch.

Sekce : Anorganická chemie

Metody přípravy opticky aktivních vrstev v monokrystalu LiNbO_3 lokalizovanou dotací erbia

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

Díky svým vlastnostem v oblasti optických zesilovačů (třetí telekomunikační okno - 1500 nm) a vlnovodných laserů je niobičnan lithný (LiNbO_3) dotovaný erbiem v popředí vědeckého zájmu. Existuje více technologií dotace LiNbO_3 erbiem, ale dosud není zcela zjištěno, jaká technologie přípravy optického zesilovače na bázi tohoto materiálu je nejvhodnější.

Ve své práci se zabývám porovnáním technologií termické difuze a iontové implantace erbia do monokrystalu LiNbO_3 . U obou porovnávaných technologií bylo zvoleno několik podmínek přípravy optických vrstev. V připravených vrstvách byly měřeny hloubkové koncentrační profily erbia pomocí metody RBS a luminiscenční spektra (excitace 980 nm) v oblasti kolem 1550 nm. U iontové implantace jsem také sledoval vliv žíhání (při 350 °C a 600 °C) vzorků na intenzitu luminiscence. Důležité se rovněž ukázalo srovnání výsledků pro obě technologie v různých krystalografických řezech LiNbO_3 . Z výsledků plyne, že luminiscence ve sledované oblasti je obecně vyšší u implantovaných vyžíhaných (600 °C) vrstev. Porovnáme-li jednotlivé krystalografické řezy pro obě zvolené technologie, platí že nejvyšší hodnotu luminiscence má řez <10-14> kolmý na štěpnou rovinu.

Sekce : Anorganická chemie

Systém $\text{Ca}_3\text{Co}_{4-x}\text{O}_{9+\delta}$

Autor: Bc. Ondřej Jankovský
Ročník: M1
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: Prof. Dr. Ing. David Sedmidubský

Byla charakterizována fáze $\text{Ca}_3\text{Co}_{4-x}\text{O}_{9+\delta}$, která je zástupcem oxidových materiálů vhodných pro termoelektrickou konverzi. Systém $\text{Ca}_3\text{Co}_{4-x}\text{O}_{9+\delta}$ patří do skupiny směsných oxidů kobaltu (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. U tohoto systému byla stanovena jednofázová oblast daná mezí mísitelnosti Ca-Co v blocích $[\text{Ca}_2\text{CoO}_3]$, která odpovídá celkovému složení v rozmezí $\text{Ca}_3\text{Co}_{3,8}\text{O}_{9+\delta}$ a $\text{Ca}_3\text{Co}_{4,0}\text{O}_{9+\delta}$. V další části práce byl zjištěn vliv mletí a lisování na výslednou hustotu vzorků, výsledkem bylo dosažení hustoty 4 g/cm^3 , což odpovídá 85% teoretické hustoty. Stabilita studovaného materiálu a dalších směsí o různém stechiometrickém poměru Ca:Co při jejich zahřívání byla studována pomocí diferenční termické analýzy. Na základě této analýzy byl zkonstruován fázový diagram CaO- Co_2O_3 .

Sekce : Anorganická chemie (*mimo soutěž*)

Reaktivní impregnace plazmově deponované keramiky

Autor: Jaroslav Kocík
Ročník: 3.ročník, obor 2802R011 Chemie a technická chemie, Univerzita Pardubice
Ústav: Katedra fyzikální chemie
Školitel: Doc. Ing. Vlastimil Brožek, DrSc.

Žárovými nástřiky, jejichž významnou složkou jsou depozice pomocí nízkoteplotního plazmatu, lze m.j. připravit tenkostěnné keramické polotovary složitých tvarů s vysokou geometrickou přesností. S rostoucím bodem tání použitých sloučenin se však zvyšuje pórovitost kompaktních produktů a s tím souvisí i pokles hodnot fyzikálních, především mechanických vlastností. Do porézní keramiky na bázi korundu, spinelu, mullitu a cordieritu, připravené pomocí generátoru nízkoteplotního plazmatu WSP®, byly impregnovány roztoky dichromanu a vanadičnanu amonného, které po vysušení a vyžhání na 1400°C jako oxidy chromu a vanadu zreagovaly s oxidem hlinitým jednak na tuhé roztoky, jednak ovlivnily přeměnu v soustavě $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$ především ve prospěch mullitu/cordieritu. Tyto změny se příznivě projeví na zlepšení mechanických vlastností, především ohybové pevnosti a Youngova modulu. Jejich hodnoty se zlepšily v rozmezí od 140 % do 210 % v závislosti na výši primární pórovitosti a množství otevřených pórů. Výsledky byly zpracovány na základě analytických údajů rtuťové porozimetrie, rtg. fázové analýzy, stanovení obsahu impregnujících prvků, metalografie a měření povrchového napětí impregnujících roztoků.

Sekce : Anorganická chemie

Příprava roztoků chelátů niobu, jejich analytické stanovení; příprava LiNbO_3 Pechiniho polyesterifikací

Autor: Martina Chvalová
Ročník: B3
Ústav: Anorganická chemie
Školitel: Ing. Kateřina Rubešová, Ph. D.

Niobičnan lithný je možno připravovat i sol-gel metodami bez použití alkoxidů, např. chelatační metodou, metodou rozpustného polymeru nebo polyesterifikací Pechiniho typu. Limitující pro tyto metody je omezená možnost, jak připravit roztok niobu(V) vhodný pro použití v jednotlivých postupech.

Prvním cílem práce bylo vyzkoušet rozpustnost sráženého $\text{Nb}(\text{OH})_5$ v následujících činidlech: ethylendiamintetraoctová kyselina, kyselina citrónová, kyselina jablečná a kyselina šťavelová. Dalším úkolem bylo porovnat dostupné analytické metody stanovení koncentrace niobu v těchto komplexotvorných prostředích (AAS/ICP, vážková analýza, kolorimetrie).

Na závěr práce byla testována vybraná sol-gel metoda – Pechiniho polyesterifikace – pro přípravu LiNbO_3 . K roztoku citrátů lithia a niobu byl přidán ethylenglykol, zvýšením teploty na 130°C po zahuštění roztoku byla iniciována polyesterifikace a vznik gelu. Po tepelném rozkladu gelu byly zkoušeny různé teploty závěrečného žíhání pevných vzorků. Získané vzorky byly charakterizovány RTG fázovou analýzou.

Sekce : Anorganická chemie

Vliv reakčních podmínek na tvorbu komplexů Fe(II) a Fe(III) s ligandy typu Schiffových bází a jejich redukovaných analogů

Autor: Bc. Radka Metelková
Ročník: M1
Ústav: Anorganická chemie
Školitel: Ing. Irena Hoskocová, CSc

Železo, ať už dvojmocné nebo trojmocné, má s chelatujícími ligandy jako jsou Schiffovy báze a jejich redukované analogy tendenci tvořit obtížně popsateľné struktury. Výsledné komplexy bývají amorfní látky s nestechiometrickým poměrem ligandu ke kovovému centru. Práce se tedy zabývala hledáním vhodných podmínek pro tvorbu látek, které by měly dobře definované složení a strukturu.

Ukázalo se, že hlavními parametry ovlivňujícími vznik a strukturu připravovaných komplexů jsou pH, s nímž se mění denticita ligandu, použité rozpouštědlo, míra zředění roztoků reakčních směsí a poměr kovů vůči ligandu v reakční směsi. Průkazná je i závislost na mocenství kovu a struktuře ligandu.

Důležitým úkolem bylo nalézt vhodné analytické metody, kterými by byla co nejlépe popsána struktura vznikajících komplexů. Výběr metod byl omezen rozpustností komplexů a jejich amorfností.

Sekce : Anorganická chemie

Iontová výměna v optickém skle – způsoby výpočtu difúzního koeficientu

Autor: Bc. Stanislav Staněk
Ročník: M1
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: Ing. Pavla Nekvindová, Ph.D.

V současné době se ve stále větší míře v oblasti telekomunikační techniky prosazují fotonické prvky. Postupem času dochází k jejich zdokonalování použitím nových materiálů a zlepšováním stávajících technologií. Jednou z metod výroby optických komponent ve sklech je iontová výměna, která vyniká zejména jednoduchostí experimentálního uspořádání a finanční nenáročností.

Náš výzkum směřuje konkrétně k vytvoření planární optické odbočnice předem požadovaných vlastností. Vývoj takovéto součástky zahrnuje řadu dílčích kroků, z nichž hlavními jsou teoretický návrh tvaru odbočnice a vhodný technologický postup pro dané složení substrátového skla. K tomu je však nutné dobře teoreticky popsat proces iontové výměny, což znamená charakterizovat především rychlost procesu pomocí difúzního koeficientu. V tomto příspěvku jsem se zabýval iontovou výměnou Ag^+/Na^+ v novém typu silikátového skla. Několika možnými způsoby jsem počítal hodnotu difúzního koeficientu, jehož hodnota poslouží jako základ pro návrh konkrétního tvaru planární odbočnice.

Sekce : Anorganická chemie

EDTA a TEA jako chelatační činidla při přípravě supravodiče Bi-2223 metodou sol-gel

Autor: Tomáš Hlásek
Ročník: B3
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: Ing. Kateřina Rubešová, Ph. D.

Cílem práce bylo porovnat stabilitu roztoků a gelů vzniklých při sol-gel metodě po použití chelatačních činidel – ethylendiamintetraoctové kyseliny (EDTA), triethanolaminu (TEA) a jejich ekvimolární směsi. Stabilita byla posuzována jako odolnost systému proti precipitaci přítomných kovů (Bi, Pb, Sr, Ca, Cu) v průběhu zahušťování roztoků a při vlastním vzniku gelu. Roztoky byly připravovány z octanů příslušných kovů, pH roztoků bylo upravováno kyselinou octovou a roztokem amoniaku.

Ukázalo se, že použití směsi obou chelatačních činidel v ekvimolárním poměru vede k rozšíření intervalu pH, při kterém je systém stabilní. Dalším bodem práce bylo zjistit důvod této vyšší stability. Byl připraven roztok s ekvimolárním poměrem chelatačních činidel bez solí kovů a odebrány vzorky při teplotách 80°C, 100°C a 130°C tak, jak se v průběhu sol-gel přípravy teplota zvyšuje. U všech vzorků byla změřena IČ spektra a také ^1H -NMR a ^{13}C -NMR spektra. Byly pozorovány esterové interakce mezi EDTA a TEA, které zřejmě vedou ke zvýšení stability gelů.

Sekce : Anorganická technologie I

Studie stability železanu ve 14 M roztocích hydroxidů

Autor: Václav Bumbálek
Ročník: B3
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Prof. Dr. Ing. Karel Bouzek

Železan představuje silné oxidační činidlo s velkým potenciálem využití například v oblasti organické syntézy nebo v tzv. zelené chemii. Ve druhé uvedené oblasti je předpokládáno využití železanu jako šetrné a velice účinné alternativy činidel používaných v současnosti pro čištění a desinfekci pitné i odpadní vody. Limitujícím faktorem rozšíření je nejen ekonomicky náročná výroba, ale rovněž nestálost této látky ve vodném prostředí vyplývající z jejích silných oxidačních vlastností. Cílem této práce je zmapovat stabilitu železanu ve 14 M roztocích NaOH a KOH, popř. v jejich směsích v závislosti na teplotě a určit vliv nerozpuštěného železanu přítomného v roztoku na kinetiku rozkladu. Tyto výsledky přispějí k optimalizaci složení elektrolytu a provozních podmínek při průmyslové výrobě železanu elektrochemickým způsobem, zejména s ohledem na skladovatelnost a separovatelnost produktu.

Sekce : Anorganická technologie I

Stabilita anexových membrán v alkalickém prostředí

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

Díky velkému rozvoji membránových technologií, jsou dnes elektromembránové separační procesy využívány i v potravinářském průmyslu např.: demineralizace mléčné syrovátky, stabilizace vína, odsolování ovocných šťáv a podobně. Bohužel při těchto procesech dochází k zanášení membrán (biofouling). Zanesené membrány se pak čistí pomocí silných kyselin a zásad. Proces čištění však může mít negativní dopady na vlastnosti membrán. Anexové membrány jsou obecně náchylnější na silně alkalické prostředí než katexové, protože u nich dochází k tzv. Hoffmanově degradaci. Použití hydroxidů při čištění tak může výrazně snižovat užité vlastnosti anexových membrán např. iontově výměnnou kapacitu. Zkrácení životnosti membrán může ve svém důsledku celou technologii značně prodražit. Cílem mé práce bylo stanovit stabilitu komerčních anexových membrán v alkalickém prostředí. Proto jsem zkoumal závislost rychlosti degradace na koncentraci použitého hydroxidu.

Sekce : Anorganická technologie I

Vysokoteplotní degradace Nafionu za zvýšeného tlaku

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

Membrány typu Nafion nacházejí uplatnění v nejrůznějších 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.

Uvažuje se o využití Nafionu jako potenciálního polymerního elektrolytu v PEM elektrolýzách, při provozních teplotách nad 100°C. Jako problematická se v tomto případě jeví případná degradace membrán. Tato degradace se projevuje zhoršenou iontovou kapacitou a zhoršením vodivosti membrány.

Nafion byl testován v teplotním rozmezí 110 - 150°C, při tlacích do 600 kPa v prostředí 100% relativní vlhkosti. Vyšších provozních tlaků se využívá pro zajištění dostatečného homogenního zvlhčení membrány, které výrazně ovlivňuje iontovou vodivost. Měření byla prováděna v demineralizované vodě, protože přechodem do jiné iontové formy než H^+ dochází rovněž k poklesu vodivosti.

Detailní prozkoumání chování Nafionu za daných podmínek umožňuje posoudit vhodnost použití Nafionu pro dané aplikace.

Sekce : Anorganická technologie I

Příprava katalyzátorů pro palivové články typu PEM

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

Na katalyzátor v palivovém článku typu PEM jsou kladeny značné nároky. Současný trend snižování množství platiny si žádá dokonalou distribuci platiny ve formě nanočástic. Jedině tak je využito maximální množství atomů pro elektrodovou reakci. Optimální velikost nanočástic jsou dva až tři nanometry.

Ve své práci jsem platinu ve formě nanočástic nanášel na uhlíkový nosič pomocí tří různých technik: 1. Chemické depozice z vodného roztoku kyseliny hexachloroplatičité redukcí formaldehydem; 2. redukcí ethylenglykolem, který slouží zároveň jako rozpouštědlo, a 3. redukcí ethylenglykolem v přítomnosti poly(vinylpyrrolidonu) – PVP – jako stabilizátoru nanočástic.

Připravené katalyzátory jsem porovnal s komerčním katalyzátorem E-Tek. K charakterizaci katalyzátorů jsem využil cyklickou voltametrii, lineární voltametrii pro oxidaci vodíku a redukcí kyslíku, SEM a AAS. Vybrané katalyzátory byly otestovány v laboratorním palivovém článku.

Nejmenší částice vznikají při přípravě s PVP, největší koncentrace platiny je naopak při přípravě bez PVP v ethylenglykolu. Chemická depozice poskytuje průměrné výsledky.

Sekce : Anorganická technologie I

Příprava a charakterizace elektrod pro palivové články typu PEM

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

Palivové články představují jednu z možností, jak efektivněji využívat energetické zdroje. Stejně jako u klasických baterií, spočívá jejich funkce v přeměně chemické energie uložené v palivu na energii elektrickou.

Dvěma různými postupy byly připraveny a následně charakterizovány elektrody pro kyslíko-vodíkový PEM článek. Na plynově difusní vrstvě (GDL) byla vytvořena katalytická vrstva metodou thin film a elektrodepozicí z roztoku Pt soli.

Elektrochemicky vyloučené Pt-částice měly průměr 300 nm na neupravené GDL. Pt-částice vyloučené na GDL, která byla předem zvlhčena metanolem, měly průměr 50 nm. Celkový obsah Pt a elektrochemicky aktivní povrch u zvlhčených GDL byly dvojnásobné v porovnání s nezvlhčenými GDL, nicméně poskytovaný výkon třetinový. Nižší výkon v případě zvlhčených GDL může být způsoben nedostatečným kontaktem katalyzátoru s membránou, zlepšení by mohla přinést modifikace nafionem.

Thin film metodou připravené elektrody obsahovaly komerční katalyzátor s Pt-částicemi velikosti 3 nm, dosaženým výkonem v palivovém článku předčily elektrochemicky připravené elektrody, ale současně měly největší obsah Pt.

Sekce : Anorganická technologie I

Selektivní odstraňování mědi z vodných roztoků

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

Z důvodu stále se zvyšujícího tlaku na ochranu životního prostředí je potřeba věnovat větší pozornost zpracování odpadů. Jedním takovým případem jsou bezesporu vody s komplexním složením, které mimo jiné obsahují měď, která je silně toxická pro některé vodní mikroorganismy ale také pro ryby a proto je potřeba ji odstranit.

Při použití běžných metod, jako je např. srážení nebo cementace, je největším problémem právě komplexnost složení vody a to především velké množství železa (až 1000 mg/l). Z tohoto důvodu pak dochází k vyloučení i těchto relativně neškodných látek a následné tvorbě velkého množství odpadů, které je třeba nadále přepracovat.

Jako možné řešení se nabízí použití chelatačních ionexů. Jednotlivé ionexy se od sebe liší funkční skupinou, celkovou kapacitou ale také především použitým regeneračním činidlem. Aby byl celý proces ekologicky i ekonomicky výhodný, je důležité, aby bylo možno regenerační činidlo použít opakovaně. Nabízí se upravit regenerační roztoky elektrochemickou redukcí mědi a je důležité, aby se ze zvoleného regeneračního činidla měď snadno vylučovala bez vzniku vedlejších elektrodových reakcí, které by daný proces komplikovaly. V rámci této práce bylo porovnáno několik komerčních či experimentálních ionexů se zvýšenou selektivitou na měď.

Sekce : Anorganická technologie I

Vliv surfaktantů při elektrodepozici katalyzátoru na vlastnosti GDE

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

Palivový článek se dnes jeví v mnoha aplikacích jako vhodná technologie budoucnosti k získávání energie. I přes své výhody vyšší teoretické účinnosti oproti konvenčním zdrojům má i nevýhody, hlavně svoji pořizovací cenu a komplikovaný způsob přípravy.

Hlavní částí palivového článku typu PEM tvoří soubor dvou plynově difúzních elektrod (GDE) s vloženou protonově vodivou membránou.

V současnosti se elektrody připravují nanášením inkoustu s dispergovaným Pt katalyzátorem na uhlíkovém nosiči, což sice vede k vysokému měrnému povrchu Pt na aktivní vrstvě, ale dosahovaný stupeň využití povrchu Pt je poměrně malý. Alternativní metodou je zde elektrochemická depozice. Její předností je jednoduchost, ale měrný povrch je zde nižší kvůli větší velikosti částic. To lze ovlivnit přítomností vhodného surfaktantu během elektrodepozice.

V této práci byl studován vliv dvou surfaktantů na velikost částic a měrný povrch aktivní vrstvy na elektrodě. Do vylučovací cely byl přidán Ethylen glykol nebo Isopropanol v různých koncentracích. U takto připravených elektrod byla studována morfologie vyloučené platiny a její množství. Naměřená data ukazují jako vhodnější surfaktant Isopropanol, ale výsledek je třeba ověřit přímo v palivovém článku.

Sekce : Anorganická technologie II

Příprava a vlastnosti samočisticích epoxidových nátěrů

Autor: Bc. Michal Baudys
Ročník: M2
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Prof. Dr. Ing. Josef Krýsa, Ing. Martin Zlámal

Samočisticí schopnost nátěrů je dána synergickým účinkem fotokatalytických vlastností a superhydrofilního efektu. Cílem této práce je příprava epoxidových nátěrů obsahujících TiO_2 fotokatalyzátor a sledování jejich vlastností v závislosti na době ozařování v QUV panelu. Sledovanými parametry jsou změna kontaktního úhlu, změna lesku, změna barevnosti a fotokatalytická aktivita v kapalně fázi. Byly připraveny vodou ředitelné epoxidové nátěry lišící se typem a množstvím TiO_2 fotokatalyzátorů. Jako fotokatalyzátorů bylo použito komerčních materiálů P25, VLP7001 a UVLP7500. Fotokatalytická aktivita byla stanovena pomocí modelového azobarviva Oranž II. Bylo zjištěno, že s rostoucí dobou expozice v QUV panelu dochází k nárůstu fotokatalytické aktivity, nejvyšší nárůst byl zaznamenán u nátěrů obsahujících fotokatalyzátor P25. U nátěru obsahujícího 7% hm. materiálu UVLP7500 se fotokatalytická aktivita s dobou ozařování v QUV panelu příliš nemění. U vzorků ozařovaných v QUV panelu dochází k poklesu hodnoty kontaktního úhlu, největší pokles byl zaznamenán u vzorků s nejvyšším obsahem fotokatalyzátoru (7% hm). Nejvyšší hodnoty fotokatalytické aktivity byly zaznamenány u nátěru s obsahem 7% hm. P25. U tohoto nátěru však dochází při dlouhodobém ozařování k nejvýraznějšímu barevnému posunu.

Sekce : Anorganická technologie II

Studium reakce apatitu Kovdor s kyselinou dusičnou

Autor: Bc. Monika Drakselová
Ročník: M2
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Doc. Ing. Jan Vídenský, CSc.

Fosfátové suroviny, představované apatity nebo fosfority, jsou jediným průmyslovým zdrojem fosforu. Apatity jsou z technologického hlediska žádanější surovinou. Jejich významným představitelem je apatit Kola, ze stejnojmenného poloostrova. Jedná se o velmi kvalitní surovinu, které je na trhu nedostatek. Jako jedna z možných alternativ, zejména při výrobě NPK hnojiv, se nabízí nově exploatované ložisko produkující apatit Kovdor. Pro posouzení jeho použití při rozkladu kyselinou dusičnou byla provedena kinetická studie této heterogenní nekatalyzované reakce.

Experimenty byly provedeny ve vsádkovém izotermním míchaném reaktoru pro počáteční fázi rozkladu s úzkou frakcí apatitu v rozsahu 0,315 – 0,400 mm. Kyselina dusičná byla použita v dostatečném přebytku a to takovém, že se její koncentrace během reakce nemění. Průběh reakce byl sledován vážením nezreagovaného zbytku apatitu po přerušení reakce v daném čase. Výsledkem provedených měření jsou závislosti stupně konverze na čase pro různé reakční podmínky. Byl studován vliv koncentrace kyseliny dusičné a teploty reakce. Naměřená data byla zpracována pomocí modelové představy nezreagovaného jádra s použitím kinetické rovnice mocninného typu. Byly stanoveny zdánlivé řady reakce a zdánlivé aktivační energie.

Sekce : Anorganická technologie II

Modifikace zeolitu typu ETS-4

Autor: Bc. Matej Konvičný
Ročník: M2
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Dr. Ing. Vlastimil Fíla

V současnosti se v chemickém průmyslu stále častěji používají katalyzátory na bázi zeolitů. Počet průmyslových procesů používajících zeolity roste a další jsou ve stádiu vývoje. Zeolity našly uplatnění nejen jako heterogenní katalyzátory, ale také jako sorpční materiály a iontoměniče.

Titanosilikáty, mající jak tetraedrické, tak i oktaedrické struktury, lze zařadit také mezi látky zeolitického typu. Titanosilikáty mají ve své mřížce umístěny atomy kovů. Tyto kovy mohou být měněny za jiné a tím je dosaženo rozdílných vlastností výsledného titanosilikátu.

Cílem této práce bylo syntetizovat titanosilikát ETS – 4 a poté zabudovat do jeho struktury ionty mědi a cínu. Iontová výměna byla provedena dvěma způsoby: „insitu“ a „exsitu“. Tyto dva způsoby se od sebe liší tím, že iontovou výměnu provedeme buď přidáním roztoku daného iontu do syntézní směsi nebo v druhém případě práškový ETS-4 smícháme s roztokem daného iontu. Výměna iontu má za následek změnu fyzikálních i chemických vlastností. Připravené vzorky byly charakterizovány pomocí metod SEM, XRD, XRF a TGA.

Sekce : Anorganická technologie II

Příprava membrán typu ETS-4 metodou „secondary growth“

Autor: Bc. Lucie Ondryášová
Ročník: M2
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Dr. Ing. Vlastimil Fíla

V dnešní době se výrazně zvyšuje zájem o využitelnost membrán na bázi zeolitů, tzv. molekulových sít. Molekulová síta jsou krystalické mikroporézní materiály, které lze vzhledem k jejich struktuře a velikosti pórů použít při katalýze nebo separaci různých směsí. Možnosti uplatnění se rychle rozšiřují a vzrůstá zájem o vývoj nových materiálů určených pro konkrétní aplikace, např. separace průmyslově důležitých plynů.

Zástupcem výše uvedených materiálů je titanosilikát ETS-4 s velikostí pórů 0,3 - 0,4 nm. V dostupné literatuře je možné nalézt informace o syntéze membrán typu ETS-4 na keramických nosičích. Cílem této práce je příprava vrstvy ETS-4 na kovovém a keramickém typu nosiče s využitím metody „secondary growth step“ (využití krystalizačních zárodků). Pro přípravu membrán byly použity nosiče s odlišným typem krystalizačních zárodků. Byl sledován vliv reakčních podmínek (teplota, doba reakce) a složení syntézní směsi na velikost připravovaných zárodků a vlastnosti připravených membrán.

Připravené membrány byly charakterizovány pomocí SEM, XRD a permeačních metod. Na základě získaných výsledů byl zjištěn pozitivní vliv krystalizačních zárodků na kvalitu připravené vrstvy.

Sekce : Anorganická technologie II

Povrchová úprava kovů fosfátováním

Autor: Bc. Petr Pokorný
Ročník: M2
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Doc. Ing. Vladimír Mejta, CSc.
Školitelé specialisti: Ing. Petr Szelaž a Ing. Jiří Kos., Pragochema spol. s r. o. Praha

Fosfátování ocelových a především pozinkovaných materiálů je nejčastější konverzní úprava prováděná moderním průmyslem povrchových úprav. Primárním úkolem naneseného fosfátového povlaku je nejčastěji dobré zakotvení následného organického nátěru a tedy značné vylepšení protikorozních vlastností. Zinečnaté fosfátování jako základ tříkationtové technologie je nejvyšším standardem v průmyslu povrchových úprav a lakování. Tato technologie představuje nejvyšší kvalitu v oblasti korozní odolnosti a přilnavosti barvy v automobilovém průmyslu, jehož nároky na nejvyšší jakost výroby jsou příznačné.

Můj výzkum je zaměřen na zinečnato-vápenaté fosfátování, které nachází, díky svojí mimořádné krystalové struktuře, uplatnění především ve spojích na rozhraní guma/vulkanizovaný kaučuk. Moje práce se týká porovnání konvenční lázně urychlované dusitanem sodným (označené jako Pragofos 1600) a její nejbližší možné alternativy urychlované vývojově mladším urychlovačem hydroxylaminsulfátem (tato technologie nese název Pragofos 1610). Porovnání zahrnuje morfologii krystalů, jakost konverzní vrstvy, korozní zkoušky po nanesení organického nátěru a samozřejmě technologickou stránku věci v případném průmyslovém nasazení.

Sekce : Anorganická technologie II

Chemická degradace polybromovaných difenyletherů

Autor: Bc. Zuzana Vajglová
Ročník: M2
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Ing. Vladimír Jiříčný, CSc.

Polybromované difenylethery (PBDE) jsou používány jako retardanty hoření, jejichž koncentrace v životním prostředí prudce vzrůstá. Přirozenými degradačními procesy jejich nosičů se PBDE uvolňují do životního prostředí, kde se vyskytují v odpadních vodách a v čistírenských kalech.

Nebezpečí těchto jedovatých sloučenin spočívá v možnosti jejich šíření potravinovým řetězcem až k člověku. PBDE jsou látky toxické, chemicky vysoce stálé a bioakumulativní. Závažná je jejich prokázaná karcinogenita u zvířat a ohrožování zdravého vývoje plodu. K dispozici zatím není žádná vhodná metoda jejich zneškodňování.

Biologické odbourávání PBDE je vzhledem k extrémně pomalému průběhu reakce nepoužitelné. A možný způsob destrukce molekul PBDE oxidací a za použití UV záření, může vést ke tvorbě vysoce toxických polybromovaných dibenzodioxinů a furanů. Proto je třeba hledat jiné možné způsoby jejich odbourávání.

Vhodnou metodou snížení zdravotní rizikovosti těchto látek může být jejich reduktivní debromace. Proto cílem této práce je vypracovat vhodné metody reduktivní debromace PBDE ve vodném prostředí s využitím vsádkových a kontinuálních laboratorních reaktorů.

Sekce : Anorganická technologie II

Studium konverzních reakcí mezi pevnou a kapalnou fází

Autor: Bc. Helena Váňová
Ročník: M2
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Doc. Ing. Jan Vídenský, CSc.

Při konverzních reakcích dochází k podvojně výměně iontů mezi reaktanty. Tyto reakční systémy, zejména homogenní, mají značný průmyslový význam. Rovněž heterogenní systémy jsou průmyslově zajímavé, neboť umožňují provádět reakční přeměny zejména v oblasti zpracování odpadních produktů, například při výrobě průmyslových hnojiv z méně tradičních surovin nebo při zpracování odpadních látek z výroby titanové běloby. U těchto heterogenních systémů dochází k určitým specifickým dějům, které je třeba respektovat. Průběh reakce je v jejich důsledku výrazně ovlivňován. Výhodou těchto procesů je většinou nízká energetická náročnost, která je dána teplotou reakčního prostředí a v případě potřeby převodem rozpustných solí na pevný produkt.

Práce je zaměřena na studium přepracování síranu vápenatého. Tímto způsobem lze takřka bezodpovědně získat rozpustné sírany, které lze dále využít. Při tomto procesu lze navíc zpracovávat sádrovec odpadající z různých technologií jako je například odsiřování spalin, výroba kyseliny trihydrogenfosforečné nebo neutralizace odpadní kyseliny sírové vápennými surovinami při výrobě titanové běloby. Práce se zabývá studiem vybraných vlivů na tento typ reakce.

Sekce : Kovové materiály I

Příprava ochranných vrstev na titanu a jeho slitinách metodou sol-gel

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

Titan a jeho slitiny patří mezi materiály s nízkou hustotou, dobrými pevnostními vlastnostmi a výbornou korozní odolností. Díky těmto vlastnostem nacházejí tyto materiály stále širší uplatnění jako konstrukční materiály v chemickém, leteckém a automobilovém průmyslu. Problém nastává při aplikaci za vysokých teplot (nad 600°C), kdy vzniká vrstva korozních produktů, které nemají ochranné vlastnosti, a dochází tak k výrazné degradaci materiálu. Odolnost proti vysokoteplotní oxidaci těchto materiálů lze zvýšit například přípravou povrchové vrstvy obsahující silicidy titanu. Jednou z metod přípravy takovýchto povrchových vrstev je metoda sol-gel a následné tepelné zpracování. Tento postup a jeho vliv na vysokoteplotní oxidaci titanu a jeho slitin byl studován v této práci. Jako vzorky byly použity titan komerční čistoty, slitina TiAl a slitina TiAl15Si15. Vzorky, na které byl sol nanesen metodou dip-coating, byly tepelně zpracovány v zásypu dřevěného uhlí při teplotě 1000°C po dobu 1 h. Oxidační zkoušky byly prováděny při teplotě 800°C. Cílem této práce bylo zjistit vliv připravovaných vrstev na vysokoteplotní oxidaci titanu a jeho slitin.

Sekce : Kovové materiály I

Dělení Zn a Mn pomocí kapalinové extrakce

Autor: Bc. Zdeněk Fencel
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Petr Dvořák, Ph.D.

Práce byla zaměřena na separaci Zn a Mn z modelového roztoku kapalinovou extrakcí. Základem byl upravený roztok modelující výluh po loužení elektrodové hmoty Zn/MnO₂ baterií v H₂SO₄. Elektrodová hmota primárních Zn/MnO₂ baterií je nebezpečným odpadem a zároveň perspektivním zdrojem Zn a Mn. Tyto dva prvky přecházejí při loužení v H₂SO₄ do výluhu, cílem rafinačních operací je získat čistý roztok ZnSO₄ vhodný pro elektrolytické získávání Zn. Kapalinová extrakce je jednou ze zkoušených možností na oddělení Mn z roztoku. V práci byla pro extrakci použita kyselina di-2-ethylhexyl fosforečná (D2EHPA) rozpuštěná v organickém rozpouštědle. K reextrakci kovů z organické fáze byla použita H₂SO₄.

Sekce : Kovové materiály I

Korozní chování slitiny Ti39,3Nb pro dentální implantologii, připravené práškovou metalurgií

Autor: Zuzana Hodoňová
Ročník: B2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jaroslav Fojt

Práce se zabývá studiem korozního chování slitiny Ti39,3Nb připravené práškovou metalurgií, u které se předpokládá využití v dentální implantologii. Léčebné přípravky používané ve stomatologii obsahují fluoridové ionty, které výrazně zhoršují korozní odolnost titanu a jeho slitin. Materiály připravené práškovou metalurgií se vyznačují určitou úrovní porozity. Póry však mohou být místem lokalizace korozního napadení. Vzorke se 2 úrovněmi porozity byly exponovány v elektrolytech modelujících léčebné přípravky s fluoridovými ionty. Pro popis korozního chování byla použita metoda snímání potenciálového šumu, která je schopná zaznamenat i případné lokální poruchy pasivní vrstvy. V práci byl sledován vliv koncentrace fluoridových iontů, pH prostředí a porozity materiálů na šumovou odezvu systému. Bylo zjištěno, že s rostoucí koncentrací fluoridových iontů dochází k intenzifikaci šumového signálu. Zároveň byl též zjištěn vliv porozity na lokalizaci korozního napadení.

Sekce : Kovové materiály I

Absorpce a difuze vodíku v Mg slitinách

Autor: Bc. Václav Hošek
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Vítězslav Knotek

Vodík je v současné době považován za potenciální palivo budoucnosti. Pro praktické využití je třeba nalézt vhodný způsob jeho uchovávání. Vodík je možné uchovávat ve zkapalněném stavu, stlačený v tlakových nádobách nebo v pevné fázi, kdy je principem adsorpce v pórovitých materiálech nebo vazba v kovových hydridech. Mezi hlavní výhody uchovávání vodíku v kovových sloučeninách patří bezpečnost (stabilita za normálních teplot) a efektivita (schopnost pojmout velké množství vodíku). Hořčíkové slitiny patří mezi perspektivní materiály pro uchovávání vodíku díky své nízké hmotnosti, ceně a vysoké vodíkové kapacitě. V této práci byla u vybraných hořčíkových slitin popsána mikrostruktura a ověřeny schopnosti absorpce vodíku na základě měření difuzních koeficientů vodíku jednotlivých slitin.

Sekce : Kovové materiály I

Vliv vybraných parametrů na mikrostrukturu prášku slitiny AlSi9Cu3

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

V této práci byla studována metoda přípravy rychle ztuhlých práškových slitin atomizací na rychle rotujícím kotouči. V rámci této práce byl ukázán vliv velikosti otvoru trysky a rychlosti otáčení atomizačního kotouče na mikrostrukturu vzniklých prášků slitiny AlSi9Cu3.

Sekce : Kovové materiály I

Vliv dentálního preparátu na korozní chování titanových slitin pro stomatologii

Autor: Hynek Moravec
Ročník: B3
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jaroslav Fojt

Titan a jeho slitiny jsou využívány v řadě medicínských aplikací. Speciálním odvětvím je stomatologie, kde se materiál dostává do kontaktu s preparáty s obsahem fluoridových iontů, které způsobují zhoršení korozní odolnosti materiálů na bázi titanu. Cílem této práce bylo popsat vliv komerčního stomatologického preparátu s vysokým obsahem fluoridových iontů na korozní chování titanových slitin. Vzorby byly vystaveny působení léčebného preparátu, v průběhu expozice byl sledován samovolný korozní potenciál. Před ukončením expozice byla změřena potenciodynamická křivka. V druhé části práce byly sledovány změny stavu povrchu po expozici ve výše uvedeném přípravku. Na vzorky byl nanesen dentální gel a po expozici délky 5 minut byl materiál přesunut do roztoku modelových slin. Na základě měření samovolného korozního potenciálu a polarizačního odporu byla sledována regenerace narušené pasivní vrstvy. Pro studium povrchu po vystavení působení dentálního gelu byla použita metoda XPS. Přítomnost fluoridových iontů vedla k úplné degradaci pasivní vrstvy na titanu, i na titanových slitinách. Slitiny se oproti titanu obtížněji aktivovaly a snáze repasivovaly.

Sekce : Kovové materiály I

Vliv křemíku na mechanismus a kinetiku vzniku intermediálních fází v systémech TM-Al

Autor: Marek Novák
Ročník: B2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Pavel Novák, Ph.D.

Aluminidy – intermetalické fáze přechodných kovů s hliníkem – jsou moderní vysokoteplotní materiály. Jednou z možných technologií jejich výroby je prášková metalurgie s využitím reaktivní sintrace. Při tomto procesu dochází k interakci slisovaných prášků přechodného kovu a hliníku obvykle při teplotách vyšších než je teplota tání hliníku. Tato práce byla zaměřena na sledování vlivu křemíku na reakci mezi hliníkem a přechodným kovem (Cr, Ni, Mo). K tomuto účelu byl použit experimentální model sestávající z pevného vzorku přechodného kovu ponořeného do taveniny Al nebo Al-Si při teplotě 900°C. Byla měřena tloušťka vrstvy vzniklého intermetalika na povrchu kovu v závislosti na čase. Rovněž byla popsána struktura vrstvy a stanoveno její chemické a fázové složení.

Sekce : Kovové materiály I

Monitorování koroze v betonu

Autor: Bc. Jiří Sís
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Milan Kouřil, Ph.D.

Dlouhodobá životnost železobetonových konstrukcí je podmíněna korozní odolností ocelové výztuže. Z mnoha hledisek je výhodné průběžně sledovat agresivitu betonu na výztuž, která se zvyšuje průnikem chloridů a karbonatů do betonu. Korozní monitoring je jednou z možností, jak předcházet korozním ztrátám způsobených korozí výztuže betonu. Práce se zaměřovala na zkoušení referenčních elektrod vhodných pro trvalé uložení v betonu a měření potenciálu ocelových vzorků a chloridostříbrných elektrod. Ze sledovaných typů vykazovaly dobré výsledky tři typy elektrod: tvořené grafitem napuštěným MnO_2 a uloženým v cementovém tmelu, grafitem uloženým ve směsi MnO_2 ze Zn/MnO_2 článků a korozivzdornou ocelí ve směsi MnO_2 a nasyceného roztoku Ca(OH)_2 . Druhým cílem práce bylo sledování postupu chloridové fronty v betonu při různých vlhkostech okolního prostředí a jeho vlivu na korozní chování ocelové výztuže. Výsledkem bylo nalezení dobré shody mezi korozní rychlostí výztuže a koncentrací chloridů měřením elektrochemického potenciálu.

Sekce : Kovové materiály I

Optimalizace podmínek přípravy slitin Fe-Al-Si reaktivní sintrací

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

Cílem této práce bylo optimalizovat podmínky přípravy slitiny FeAl₂₀Si₂₀, vyvinuté předchozím výzkumem na Ústavu kovových materiálů a korozního inženýrství. Jako výrobní postup byla zvolena technologie práškové metalurgie s využitím reaktivní sintrace. Byla studována závislost mikrostruktury, fázového složení a pórovitosti na podmínkách lisování a reaktivní sintrace. Byl popsán vliv velikosti částic, lisovacího tlaku, teploty, doby reaktivní sintrace a rychlosti ohřevu. Výsledky ukázaly, že tuto slitinu je vhodné připravovat za použití prášků železa o velikosti menší než 10 μm a slitiny Al-Si lisováním tlakem minimálně 320 MPa a následnou reaktivní sintrací při teplotě minimálně 750°C po dobu 10 min. Při reaktivní sintraci je vhodné používat maximální možné rychlosti ohřevu (optimálně nad 300 K/min).

Sekce : Kovové materiály I

Vliv Fe a Ce na rychle ztuhlé slitiny Al-TM

Autor: Kateřina Wienerová
Ročník: B3
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Alena Michalcová

Rychle ztuhlé slitiny hliníku s transitivními kovy jsou slibnými materiály z hlediska jejich skvělých mechanických vlastností a výborné tepelné stability. Vlastnosti takových materiálů ve velké míře ovlivňují další prvky přítomné ve slitině. V této práci byl popsán vliv Fe a Ce na strukturu a vlastnosti takto připravených slitin.

Vliv železa byl zkoumán přidavkem 3 hm. % do slitiny AlCr₄Ti_{0,4}. Bylo dokázáno, že železo má výrazný vliv na fázové složení slitiny, protože vede k tvorbě krystalických a kvazikrystalických fází. Tvorba quasikrystalických fází výrazně závisí na ochlazovací rychlosti. Dále bylo pozorováno, že již tak malé množství vede k dvojnásobnému zvýšení tvrdosti. Vliv železa na tepelnou stabilitu nebyl prokázán.

Vliv ceru byl zkoumán na slitině Al_{5,5}Cr₃Fe_{1,5}Ti. Oproti železu nemá cer výrazný vliv na tvrdost materiálu, má však výrazný vliv na zlepšení tepelné stability materiálu.

Sekce : Kovové materiály II

Vliv chemicko-tepelného zpracování na deformace oceli

Autor: Pavel Bílek
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jana Sobotová, Ph.D, doc. Dr. Ing. Dalibor Vojtěch

Chemicko-tepelné zpracování slouží k získání vysoké tvrdosti povrchové vrstvy materiálu při současném zachování houževnatosti jádra materiálu. Principem tohoto zpracování je sycení materiálu vhodnými prvky za vysokých teplot. Pokud je materiál sycen uhlíkem, proces se nazývá cementace. Po cementaci obvykle následuje kalení a nízkoteplotní popouštění materiálu. Proces chemicko-tepelného zpracování může být spojen se vznikem vnitřních pnutí v materiálu, která mohou vést ke vzniku jeho nežádoucích deformací.

Cílem práce bylo určit vliv chemicko-tepelného zpracování na deformaci součásti, konkrétně na její kruhovitost.

Sekce : Kovové materiály II

Porovnání poškozených mosazných teplosměnných trubek různých výrobců

Autor: Jaroslav Gubiš
Ročník: B2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Bystrianský, CSc. ; Ing. Jan Stoulil, Ph.D.

V rámci práce byly hodnoceny trubky z mosazi CuZn20AlAs. Po rekonstrukci hlavních kondenzátorů několika energetických bloků došlo zhruba po ročním provozu (asi 7000 h) k četnému koroznímu poškození teplosměnných trubek ze strany chladicí vody. K rekonstrukci byly použity trubky dodané čtyřmi výrobci. Na vybraných výřezech poškozených trubek bylo dokumentováno poškození a vlastnosti povrchové vrstvy mosazi.

Byly zjištěno, že napadení je lokalizované, vzniklé důlky byly pokryty korozními produkty, na dně důlku byla detekována měď.

Intenzita napadení a korozní vlastnosti vnitřního povrchu byly závislé na výrobci trubky.

Sekce : Kovové materiály II

Hodnocení vybraných faktorů ovlivňujících chemické zpracování korozivzdorných ocelí

Autor: Bc. Jiří Kubásek
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Bystrianský, CSc.

V průběhu výroby, zpracování i za provozních podmínek dochází k chemickým a fyzikálním změnám stavu povrchu korozivzdorných ocelí projevujících se sníženou korozní odolností v daném prostředí. Pro dosažení žádoucí odolnosti je nutné povrch mechanickými a chemickými postupy obnovit. Cílem této práce bylo ověření podmínek a kinetiky moření vysokolegovaných ocelí v závislosti na typu a koncentraci lázně a na složení oceli, zejména obsahu chromu.

U korozivzdorných ocelí dochází po tepelném ovlivnění ke změnám struktury, které nastávají jak v austenitické, tak feritické fázi. Zaznamenány byly možné dopady chemického zpracování (moření, dekontaminace, čištění) na oceli s pozměněnou, degradovanou strukturou vznikající svařováním či provozem při vyšších teplotách.

Experimenty potvrdily závislost korozní rychlosti na obsahu Cr ve směsi kyselin HNO_3 s HF a tudíž vhodnost použití těchto směsí pro závěrečné fáze moření vysokolegovaných ocelí.

K interakci s prostředím po tepelném zpracování docházelo s různou intenzitou ovlivněnou jak jakostí oceli, tak i prostředím, především jeho oxidačně-redukčními vlastnostmi.

Sekce : Kovové materiály II

Struktura a vlastnosti slitin TM-Al a TM-Al-Si vyrobených reaktivní sintrací

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

Předchozím výzkumem na Ústavu kovových materiálů a korozního inženýrství bylo zjištěno, že vhodný přídavek křemíku výrazně snižuje pórovitost slitin Ti-Al a Fe-Al vyrobených reaktivní sintrací. Cílem této práce bylo popsat vliv křemíku na strukturu a vlastnosti dalších slitin přechodných kovů s hliníkem. Byly zkoumány slitiny chromu, niklu a molybdenu. Studované materiály byly připraveny reaktivní sintrací při teplotě 900°C po dobu 30 min. Byla popsána mikrostruktura materiálů, pórovitost a fázové složení v závislosti na chemickém složení slitiny.

Sekce : Kovové materiály II

Příprava a charakterizace nanografitu rozpouštěcí metodou

Autor: Bc. Jiří Rapouch
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jan Šerák, Ph.D.

Práškový grafit byl připraven z bílé litiny, nástrojové uhlíkové oceli, legované oceli a karbidu hliníku. K přípravě jemného práškového grafitu byla použita rozpouštěcí metoda. Studován byl průběh rozpouštění uvedených materiálů v různých chemických činidlech. Dokumentováno bylo chemické složení získaného prášku a jeho morfologie.

Sekce : Kovové materiály II

Metody identifikace intermetalických fází ve slitinách hliníku

Autor: Ladislav Sita
Ročník: B3
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Alena Michalcová

V této práci byly zkoumány vhodné podmínky extrakce intermetalických fází z rychle ztuhlé slitiny Al_{5,5}Cr₃Fe_{1,5}Ti₃Ce připravené metodou melt spinning. Extrakce byla prováděna selektivním rozpuštěním hliníkové matrice ve vodných roztocích obsahujících kyselinu vinnou (40 g/l) a chlorid železitý (4,8; 9,6 a 14,4 g/l). Dále byl pozorován vliv ultrazvuku a zvýšené teploty na extrakci intermetalických fází.

U extrahovaných intermetalických fází bylo zjištěno chemické složení pomocí EDS analýzy a fázové složení pomocí XRD analýzy. Na základě těchto výsledků bylo navrženo optimální složení extrakčního činidla.

Sekce : Kovové materiály II

Měření korozní rychlosti v půdě

Autor: Ondřej Sochor
Ročník: B2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Milan Kouřil, Ph.D.

Kritérii pro hodnocení účinnosti katodické ochrany ocelových úložných zařízení je ochranný potenciál a korozní rychlost. Ochranný potenciál se liší podle podmínek v půdě, ale korozní rychlost je limitována obecně hodnotou 0,01 mm/rok. Jednoduše prakticky využitelnou technikou měření korozní rychlosti v půdě je resistometrická metoda. V práci byly připraveny ocelové odporové sondy se dvěma různými úrovněmi citlivosti. Méně citlivá sonda byla tvořena ocelovým páskem o tloušťce 100 μm a citlivější verze byla připravena z ocelové fólie tloušťku 25 μm . Sondy byly testovány v modelovém půdním prostředí. Jílovitá půda byla reprezentována bentonitem a prostředí prostupné pro kyslík pískem. V prostředí s nízkým přístupem kyslíku je korozní rychlost nižší než hraniční 10 $\mu\text{m}/\text{rok}$ i bez aplikace katodické ochrany. Resistometrická čidla jsou vhodným nástrojem pro korozní monitoring v půdě.

Sekce : Kovové materiály II

Výroba kompozitních materiálů pro vysokoteplotní aplikace

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

Intermetalické sloučeniny s hliníkem jsou obzvláště atraktivním materiálem pro vysokoteplotní aplikace v automobilovém a leteckém průmyslu. Mezi důležité vlastnosti těchto aluminidů patří především nízká hustota, vysoká mez pevnosti, dobrá korozní a oxidační odolnost. Dalšího zlepšení vlastností těchto materiálů můžeme dosáhnout vytvořením kompozitního materiálu. V této práci bylo do základního materiálu Ni-Al přidáváno různé množství částicové i vláknové výztuže. Jako technologie výroby byla zvolena prášková metalurgie s využitím reaktivní sintrace. Byl testován rovněž vliv tvaru výztuže a její předúpravy bezproudovým poniklováním na výslednou strukturu a vlastnosti kompozitu. U připravených materiálů byla sledována mikrostruktura, fázové složení, tvrdost a odolnost proti abrazivnímu opotřebení.

Sekce : Kovové materiály II

Struktura a vlastnosti slitin Fe -Al -Si

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

Slitiny Fe-Al-Si lze považovat za perspektivní materiály pro náročné aplikace za vysokých teplot. Jednou z dostupných technologií pro jejich výrobu je reaktivní sintrace. Cílem této práce bylo porovnat strukturu a vlastnosti slitin v závislosti na obsahu křemíku. V rámci experimentu byly připraveny vzorky obsahující 0-40 hm. % hliníku a 0-35 hm. % křemíku. Reaktivní sintrace byla prováděna při teplotě 1100°C po dobu 30 min.

S využitím světelného a rastrovacího elektronového mikroskopu s EDS analyzátozem byla popsána závislost struktury a fázového složení na obsahu křemíku. Dále byla změřena tvrdost připravených vzorků a mikrotvrdost přítomných fází. Rovněž byl popsán vliv křemíku na odolnost slitin proti abrazivnímu opotřebení.

Sekce : Kovové materiály II

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

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

Aluminidy železa jsou moderní materiály pro vysokoteplotní aplikace. Jejich výroba běžnými tavnými procesy přináší značné problémy. Alternativní technologií výroby je reaktivní sintrace. Binární slitiny Fe-Al vyrobené tímto postupem jsou však obvykle velmi porézní. Průběh reaktivní sintrace lze ovlivnit legováním, což bylo prokázáno v minulých pracích přidávkou křemíku. Cílem této práce bylo popsat vliv dalších legujících prvků na strukturu slitin Fe-Al a Fe-Al-Si. Studované slitiny byly připraveny reaktivní sintrací slisovaných směsí prášků čistých prvků při teplotě 1100°C po dobu 30 min. Jako legující prvky byly testovány titan, mangan, molybden a měď. Byl popsán vliv těchto prvků na mikrostrukturu, fázové složení a tvrdost připravených materiálů.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Příprava dentálního leucitového kompozitu s různým podílem krystalické fáze

Autor: Bc. Petra Babková
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Alexandra Kloužková, CSc., Konzultant: Ing. Martina Mrázová

Dentální keramika obsahující dispergované krystaly tetragonálního leucitu (KAlSi_2O_6) se vyznačuje nejen přírodním vzhledem, chemickou odolností a bioinertností, ale také vyšší pevností a vyšším koeficientem teplotní roztažnosti dovolujícím spájení keramiky s kovem, což je důležité při výrobě kovokeramických zubních náhrad. Tato práce se zabývá přípravou leucitového kompozitu s definovaným podílem krystalické fáze (10, 20, 30 a 40 hm.%). Vzorky ve formě tablet byly připraveny smísením dvou samostatně syntetizovaných složek tj. krystalické - leucitového prášku (připraveného hydrotermální syntézou) a matrice - skleněné frity (zhotovené tavením). Teplota slinování materiálu byla zvolena s ohledem na Littletonův bod měknutí matriční složky, který byl vypočítán pomocí programu SciGlass. Bylo zjištěno, že se zvyšujícím se podílem krystalické fáze teplota slinování roste. Stupeň slinutí a homogenita krystalické fáze byly pozorovány pomocí optického mikroskopu. Slinuté vzorky budou dále použity ke stanovení některých mechanických (termomechanických) vlastností a to zejména koeficientu teplotní roztažnosti a mikrotvrdosti podle Vickerse.

Práce byla podpořena projektem č. 2A-1TP1/063, "Nové skelné a keramické materiály a pokročilé postupy jejich příprav a výroby".

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Chemická odolnost funkčních vrstev připravených metodou sol-gel

Autor: Simona Bártová
Ročník: M1
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Helena Hradecká, prof. Ing. Aleš Helebrant, CSc.

Zvýšení chemické odolnosti skla proti korozi vodou a vodnými roztoky lze obecně dosáhnout různými způsoby, např. změnou složení skla, dezalkalizací povrchu skla či nanášením vhodných ochranných vrstev na povrch skla. Předložená práce se zabývá přípravou ochranných křemičitých vrstev z tetraethoxysilanu a směsi organických rozpouštědel za přítomnosti kyselého katalyzátoru metodou sol-gel. Připravený sol byl nanášen na mikroskopická podložní skla metodou dip-coating a dále sušen a vypalován v peci (1h, 550°C). Po výpalu byla měřena tloušťka vrstev a dále byla sledována jejich adheze ke sklu pomocí tzv. „tape testu“ podle ASTM D 3359. Výsledné vrstvy byly následně podrobeny statickým loužícím testům v destilované vodě, roztoku HCl (pH=2) a KOH (pH=11) při teplotě 80°C po dobu 1h-7dní. Byla sledována časová závislost přechodu složek ze skla (Na, Si) do roztoku v závislosti na době odležení solu a pH korozního roztoku. Výsledky ukázaly dobrou adhezi připravených vrstev. Při loužících testech vykazovaly křemičité vrstvy významný ochranný charakter vůči destilované vodě oproti samotnému nepotaženému sklu. K nejnižší korozi docházelo u potažených i samotných nepotažených skel do kyselého roztoku, naopak v alkalickém roztoku docházelo k rozpouštění samotného skla i křemičitých vrstev.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Vznik silikátů při reakci křemene s uhličitanem sodným

Autor: Bc. Zbyněk Burian
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. František Novotný, CSc.

Základní reakcí při tavení sklářského kmene je reakce mezi sklářským pískem a sodou. Zdánlivě jednoduchá reakce v binárním systému $\text{Na}_2\text{O-SiO}_2$ může vést ke vzniku řady meziproduktů ve formě $x\text{Na}_2\text{O.ySiO}_2$.

Práce se zabývá tématem reakcí křemene a uhličitanu sodného, kdy prvotně vzniká po zahřátí těchto látek křemičitan sodný (metasilikát), který taje až při 1089°C s relativně nízkoviskozní taveninou. Metasilikát však na rozhraní s křemenem dále reaguje za tvorby dikřemičitanu sodného (disilikátu), který taje při 874°C s vysoceviskózní taveninou.

Reakce na rozhraní metasilikát – křemen je popisována jak kvalitativně, tak kvantitativně a to pomocí grafu závislosti doby této reakce na teplotě.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Interakce nanovláken se simulovanou plicní tekutinou

Autor: Bc. Lukáš Effenberger
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: prof. Ing. Aleš Helebrant, CSc.

Byla testována nanovlákna na bázi SiO_2 připravená technologií Nanospider™ na TU Liberec. Testy byly prováděny v demineralizované vodě pufrované Trisem ($(\text{HOCH}_2)_3\text{CNH}_2$, pH 7,4) resp. octanem sodným (pH 4,5) a v simulované plicní tekutině (SLF, pH 7,5 a 4,5), obsahující další složky napodobující složení anorganické části skutečné plicní tekutiny. Nanovlákna byla vystavena působení korozních roztoků v sérii statických a dynamických testů. Vzniklé výluhy byly analyzovány spektrofotometricky a metodou atomové absorpční spektrofotometrie.

Testovaná nanovlákna se obecně rozpouštějí rychleji v prostředí s vyšším pH, přičemž na finální rychlost rozpouštění má vliv i režim dynamiky testu.

Experimentálně stanovená rychlost rozpouštění (R_p) se pohybuje při pH 7,4 až 7,5 na spodní hranici nutné pro jejich bezproblémové odbourávání v organismu. SLF, oproti pufrovaným roztokům demineralizované vody, mírně snižuje rychlost rozpouštění a hodnoty R_p (SLF, pH 7,5) = $6,72 \text{ ng.cm}^{-2}.\text{hod}^{-1}$ a R_p (pufr, pH 7,4) = $9,65 \text{ ng.cm}^{-2}.\text{hod}^{-1}$. Přepočtem na geometrický povrch vlákna získáváme hodnotu R_n (SLF, pH 7,5) = $58,15 \text{ ng.cm}^{-2}.\text{hod}^{-1}$ a R_n (pufr, pH 7,4) = $83,55 \text{ ng.cm}^{-2}.\text{hod}^{-1}$.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Tepelná vodivost keramických kompozitů a nanokrystalických materiálů

Autor: Jan Hostaša
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Doc. Dr. Willi Pabst

Tepelná vodivost keramiky hraje velkou roli v nejrůznějších aplikacích, od stěn pecních agregátů až k tepelným bariérám v plynových turbinách. Tato práce se zabývá teoretickým výpočtem efektivní tepelné vodivosti na základě mikromechanických vztahů, tzn. jedno-, dvou- a třibodových mezí a určitých vážených průměrů. Jako příklad kompozitní keramiky byla zvolena soustava $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$, zejména nejběžnější složení ATZ (80 hm.% ZrO_2 , 20 hm.% Al_2O_3) a ZTA (15 hm.% ZrO_2 , 85 hm.% Al_2O_3). Práce názorně ukazuje, že určitý druh váženého průměru (tzv. sigmoidální průměr Hashin-Shtrikmanových mezí) leží uvnitř třibodových mezí pro dvoufázové „zrnité“ mikrostruktury (tzv. symmetric-cell materials) a tím poskytuje poměrně realistickou předpověď pro běžné keramické kompozity. V další části práce vycházíme z efektivní tepelné vodivosti kompozitů ATZ a ZTA vypočtené podle zmíněného vztahu, a na tomto základě je proveden odhad závislosti efektivní tepelné vodivosti na velikosti zrn pro monodisperzní systém krychlových zrn s fázovým rozhraním, jehož tloušťka je konstantní a jehož struktura a vlastnosti jsou podobné skelné fázi. Z výpočtu vyplývá, že zejména pro nanokrystalické materiály, kde oblast fázového rozhraní zaujímá významnější objemovou frakci, lze očekávat výrazný pokles tepelné vodivosti s klesající velikostí zrn.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Tvarová charakterizace českých kaolinů

Autor: Renata Kořánová
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Doc. Dr. Willi Pabst

Vedle chemického složení, mineralogického (fázového) složení a granulometrie hraje tvar částic významnou roli z hlediska technologických vlastností kaolinu (např. viskozita suspenzí, pevnost za sucha a v papírenském průmyslu také optické vlastnosti). Předmětem této práce je aplikace poměrně nového přístupu k problematice tvarové charakterizace plavených kaolinů. Použitá metoda spočívá ve výpočtu průměrných tvarových faktorů na základě srovnání rozdělení velikosti částic dvěma rozdílnými metodami měření (sedimentační analýza a laserová difrakce). Jako příklad bylo zvoleno 6 druhů komerčně dostupných plavených kaolinů od třech výrobců. V úvodu je v rámci obecného přehledu ložisek kaolinu v ČR vysvětleno, jaký konkrétní typ ložisek byl zdrojem uvedených kaolinů a prodiskutováno jejich typické fázové složení. Po shrnutí principů měření rozdělení velikosti částic a výpočtu tvarového faktoru (aspect ratio) budou uvedeny průměrné hodnoty aspect ratio, včetně jejich závislosti na velikosti. V závěru pak budou získané poznatky dány do souvislosti s fázovým složením jednotlivých kaolinů. Ukáže-li se, že rostoucí obsah isometrických částic snižuje průměrný aspect ratio a naopak, pak by mohla tato metoda sloužit k rutinní tvarové charakterizaci plavených kaolinů, popř. i jiných surovin s anizometrickými částicemi.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Nevratná vlhkostní roztažnost pórovinového a cihlářského střepe

Autor: Jiří Královec
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Alexandra Kloužková, CSc.

Keramické materiály jsou obecně považovány za materiály odolné proti procesu stárnutí. U pórovité keramiky zhotovené z přírodních surovin však vlivem působení vlhkosti dochází k rehydrataci nekystalické fáze střepe doprovázené nárůstem jeho objemu. Expanze střepevé hmoty je kvantifikována hodnotou tzv. nevratné vlhkostní roztažnosti. Práce je zaměřena na hodnocení stárnutí pórovinového střepe pro výrobu obkladových prvků a cihlářského střepe pro střešní krytinu. Byly zde sledovány vlivy použité vytvářecí technologie a výše teploty následného výpalu na hodnotu maximální nevratné vlhkostní roztažnost obou typů střepeových hmot. Bylo analyzováno chemické i mineralogické složení a měřeny základní charakteristiky střepeových hmot (objemová hmotnost, nasákavost, pórovitost) a jejich mechanická pevnost ihned po výpalu a rovněž po hydrotermální expozici.

Dílčím cílem je porovnání jednotlivých metod jak normovaných (francouzská norma NF P13 - 302, $t=5$ hodin, $p=1\text{M Pa}$ při 180°C a evropská norma ČSN EN 772-19, 24 hodinový var v páře), tak nenormovaných (dilatometrická metoda), používaných k urychlení procesu stárnutí pórovitého keramického střepe.

Práce byla podpořena projektem GA ČR 103/07/1082.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Tepelné tvarování skleněných destiček pro rtg. vesmírné teleskopy

Autor: Martina Landová
Ročník: M1
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Dr., Ing. Martin Míka

Současná astronomie zabývající se zkoumáním vesmíru v rentgenové oblasti spektra elektromagnetického záření klade stále vyšší požadavky na kvalitu obrazu získávaného pomocí vesmírných teleskopů. Z tohoto důvodu jsou vyvíjeny nové optické systémy, ve kterých se k odrazu paprsků, za účelem zaostření kosmického záření do detektoru, využívá tenkých skleněných desek vytvářených do požadovaného tvaru s vakuově naprášenou reflexní vrstvou. Pro tuto aplikaci se zdá být vhodné borosilikátové sklo Desag D 263, které bylo již zkoumáno několika vědeckými skupinami. Jeho výhody oproti dříve používaným kovovým fóliím jsou nižší hustota a relativně snadnější tepelné tvarování, při kterém je dosahováno dobrých výsledků z hlediska mikrodrsnosti povrchu a přesnosti získaného tvaru. Tyto parametry jsou rozhodující pro výsledné rozlišení vyvíjeného optického systému. Cílem práce byla optimalizace teplotního režimu tvarování destiček z hlediska teploty a doby tvarování. Při experimentech byl po tvarování sledován získaný tvar, mikrodrsnost a celková optická kvalita povrchu v závislosti na zvoleném teplotním režimu. Dále byly vyhodnoceny odchylky získaného tvaru skleněných destiček od formy použité ke tvarování. Výhodou tohoto zpracování je možnost relativního porovnání výsledků pro jednotlivé případy a zvýraznění odchylek od požadovaného tvaru.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Příprava a charakterizace bioaktivní antibakteriální křemičité vrstvy na Ti substrátu

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

Titan a jeho slitiny se široce využívají v biomedicínských aplikacích jako implantační materiál. Pomocí metody sol–gel (základem je suspenze SiO_2) je možné připravit tenké homogenní bioaktivní vrstvy na inertním kovovém podkladu. Kov zabezpečí mechanickou pevnost a bioaktivní povlak chemické propojení: implantát-kost. Antibakteriálnost vrstev se zajišťuje přidávkem stříbrných kationů.

Do základního SiO_2 solu se stříbrnými ionty byl po odežnění přidán monetitový prášek od firmy Merck a připravený prášek, který podle RTG analýzy obsahoval 95 % monetitu (CaHPO_4) a 5 % brushitu ($\text{CaHPO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$). Za stálého míchání byla první skupina mechanicky předupravených Ti vzorků potahována metodou dip-coating. Sol s práškem se nechal dalších 7 dní odežet a druhá skupina vzorků byla potažena za stejných podmínek. Potažené vzorky byly sušené a vypálené. Povlak byl celistvý a Ca-P částice byly rovnoměrně rozptýlené u všech vzorků. Adheze vrstev se měřila metodou *tape-test*. Vrstvy měly velmi dobrou adhezi. Bioaktivita připravených povlaků byla testována testem *in vitro* v roztoku SBF (Simulated Body Fluid) za statických podmínek. Povrchy po výpalu, po měření adheze i po *in vitro* testu byly sledovány optickým a elektronovým mikroskopem.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Stanovení velikosti vnitřního povrchu nápojových skel z Pb křišťálu

Autor: Štěpán Pech
Ročník: M1
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Helena Hradecká, prof. Ing. Aleš Helebrant, CSc.

Vyluhování olova z olovnatého křišťálu, používaného jako stolní nádobí, je v současné době přísně sledováno vzhledem k toxicitě olova. Limitní hodnoty pro výluhy Pb do 4% kyseliny octové za 24 h jsou dány mezinárodní normou ISO 7086 a jsou v závislosti na objemu výrobků rozděleny do 3 kategorií. Některé výrobky stejného objemu, ale různého tvaru, však mohou mít i různou velikost vnitřního povrchu. Proto při vzájemném porovnávání výluhů z výrobků různých tvarů a velikostí bývá někdy využíván přepočet výluhu Pb z povrchu na jednotkovou plochu. Stanovení velikosti vnitřního povrchu výrobku se běžně provádí měřením s následným výpočtem této plochy z nákresu. Tato metoda je však velmi pracná a výsledek může být zatížen značnou chybou. Proto bylo v předložené práci porovnáno stanovení velikosti vnitřního povrchu 4 typů nápojových skel pomocí výše uvedené metody v porovnání s moderní, pro sklo dosud nepoužitou metodou pomocí 3D laserového skeneru Konika-Minolta. Výsledky dosažené použitím nové metody jsou velmi přesné, avšak v případě skla, jehož povrch je lesklý a tudíž špatně skenovatelný, je třeba zhotovovat odlitky vnitřního povrchu, což omezuje běžnou použitelnost této metody. Výsledky obou metod se v závislosti na tvaru výrobků lišily od $1,7\text{cm}^2$ do $18,1\text{cm}^2$, což činí 0,6 až 9,8%.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Fotodegradace a hydrofilita hybridních sol-gel vrstev na bázi TiO₂

Autor: Michaela Brunclíková
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Prof. Ing. Matoušek Dr.Sc.

V současnosti je studováno mnoho typů anorganicko-organických (ormosilových) materiálů připravovaných metodou sol-gel. Anorganické materiály modifikované organickou složkou vykazují lepší mechanické, optické a chemické vlastnosti oproti čistě anorganickým materiálům. Cílem předložené práce bylo připravit metodou sol-gel anorganicko-organické vrstvy o různém obsahu anorganické (TiO₂) a organické (polydimethylsiloxan – PDMS) složky, při různých teplotách výpalu (350 °C a 500 °C). Takto připravené vrstvy pak dále charakterizovat stanovením vybraných vlastností., mezi které patřily smáčivost povrchu vrstev (měření kontaktního úhlu), makrostruktura vrstev (optický a elektronový mikroskop), fotokatalytická aktivita (Acid Oranž 7 (AO7), Methylenová modř (MM), 4-chlorfenol(4-CP)). Vrstvy anorganicko-organického materiálu připravené při teplotě výpalu 350°C vykazovaly hydrofobnější povrch a větší fotokatalytickou aktivitu, než-li vrstvy připravené při teplotě 500°C. Avšak i při výpalu při 350°C je fotokatalytická aktivita velmi nízká ve srovnání s čistou anorganickou vrstvou TiO₂.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Mikrostruktura porézní ZrO₂ keramiky připravené za použití rýžového škrobu

Autor: Michaela Chmelíčková
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Eva Gregorová, CSc., Konzultant: Ing. Zuzana Živcová

Práce je zaměřena na přípravu a charakterizaci mikrostruktur porézní zirkoničité keramiky. Jako pórotvorné činidlo byl použit biopolymer rýžový škrob se střední velikostí částic 4.8 μm, který v průběhu výpalu vyhoří zcela beze zbytku. Vzorky s proměnlivým obsahem rýžového škrobu v rozmezí 5 - 50 obj.% (vztaheno na pevnou fázi) byly připraveny tradičním a škrobovým litím. Při škrobovém lití škrob plní funkci nejen pórotvorného činidla, ale i činidla tělesotvorného. Na vzorcích byla měřena kritéria hutnosti (objemová hmotnost, zdánlivá pórovitost a skutečná pórovitost) Archimédovou metodou dvojího vážení a délkové smrštění. Při použití metody tradičního lití byla hodnota dosažené pórovitosti 4 - 31 % a při použití metody škrobového lití byla získána pórovitost v rozsahu 7 - 21 %. Z vypálených vzorků byly zhotoveny leštěné nábrusy. Pomocí optického mikroskopu byly pořízeny mikrostrukturní snímky. Pórovitost a rozdělení velikosti pórů byly dále stanoveny jednak metodou analýzy obrazu a jednak metodou rtuťové porozimetrie.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Smáčivost surovin v tavícím se kmeni

Autor: Barbora Chovancová
Ročník: B3
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. František Novotný, Csc.

Byl studován vliv přidavku hořečnatých karbonátů na smáčivost sklářského kmene. Cílem práce je objasnění vlivu karbonátových tavenin o složení soda-dolomit a soda-dolomit-vápenec v různých poměrech, na průběh tavení skla. Sodno-vápenaté sklo, které bylo dříve nejmasověji tavenou sklovinou je dnes nahrazeno sodno-vápenato-hořečnatým sklem, které se taví v největších objemech (Float). V současné době je dolomit pravidelnou součástí sklářských kmenů. Na technologii tavení sodno-vápenatého skla má velký vliv vznik taveniny podvojného uhličitanu $\text{CaNa}_2(\text{CO}_3)_2$. Cílem mé práce je zjistit, jak přítomnost dolomitu ovlivňuje vznik a chování karbonátové taveniny. Z výsledků vyplynulo, že vznik karbonátové taveniny je omezen termickým rozkladem dolomitu, takže může vznikat pouze karbonátová tavenina s malým obsahem MgO. Zbývající MgO tvoří s karbonátovou taveninou pevný kompozit. Tavení kmenů s obsahem vápence a dolomitu tedy probíhá jinou cestou než tavení čistě vápencového kmene.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Příprava fotosenzitivních germanicitokřemičitých skel pro fotoniku

Autor: Bc. Jan Krupička
Ročník: M1
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Doc. Ing. Martin Míka

Tato práce je zaměřena na přípravu fotosenzitivních skel na bázi oxidu křemičitého a oxidu germaničitého. Důležitou vlastností těchto skel je schopnost změny indexu lomu po ozáření světlem krátké vlnové délky. Této vlastnosti se využívá ve fotonice pro tvorbu vlnovodných struktur s rozdílným indexem lomu, sloužících pro zpracování optického signálu v moderních telekomunikačních zařízeních.

V této práci jsme utavili sérii fotocitlivých germanicitokřemičitých skel v daném poměru Ge:Si. V těchto sklech jsme pomocí iontové výměny vytvořili planární vlnovodnou vrstvu. Cílem této práce bylo zjistit změnu indexu lomu skel před a po ozáření UV světlem a vliv nárůstu defektů ve struktuře skla, které jsou předpokládánou příčinou fotosenzitivních vlastností materiálu.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Příprava TiO₂ vrstev s antibakteriálními účinky

Autor: Denisa Krychtálková
Ročník: M1
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Helena Hradecká, prof. Ing. Josef Matoušek, DrSc.

Mezi známé vlastnosti TiO₂ vrstev patří fotokatalytické účinky, v poslední době však jsou zkoumány i další zajímavé vlastnosti těchto vrstev. V předložené práci byly testovány adheze, hydrofilita a antibakteriální vlastnosti TiO₂ vrstev připravených metodou sol-gel z tetra-n-butylorthotitanátu a směsi organických rozpouštědel za použití kyselého katalyzátoru. Pro zvýšení antibakteriálních účinků byl dále testován nový způsob přípravy TiO₂ vrstev dopovaných stříbrem, kde ionty stříbra byly vnášeny do solu buď ve formě vodného anorganického nebo organického roztoku tak, aby nedošlo k vysrážení kovového stříbra. Připravené soly byly nanášeny na skleněný substrát technikou dip-coating a výsledné vrstvy byly vypalovány v peci při teplotě 400°C a 500°C po dobu 5 h. Uvedené vlastnosti vrstev byly testovány po ozáření UV lampou. Výsledky ukázaly dobrou adhezi připravených vrstev, nižší teplota výpalu zvyšovala hydrofilitu vrstev dopovaných stříbrem. Nižší baktericidní schopnosti vůči bakteriím E. coli vykazovaly i samotné TiO₂ vrstvy, přidavkem Ag se antibakteriální účinky vrstev výrazně zvýšily.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Modifikace složení skla typu Float

Autor: Jan Machálek
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Miroslav Rada, CSc.

Současné požadavky po lehčích výrobcích ze skla rostou v mnoha odvětví jako je architektura, automobilový a obalářský průmysl. Takovýchto výrobků lze dosáhnout zejména snížením tloušťky skla, tím ale nastává problém s jejich mechanickou pevností (odolností).

Podobný problém se řeší i u skel používaných proti balistickým střelám. Kvůli zvýšené síle balistických střel je třeba zlepšovat i účinnost tzv. průhledných pancířů, aby bylo dosaženo dostatečné bezpečnosti proti této útočné síle.

Tato práce je zaměřena na výzkum vlivu změny chemického složení skla typu Float při podrobení navržených vzorků balistické zkoušce. Zejména se jedná o zkoumání vlivu určitého obsahu Al₂O₃, TiO₂, Li₂O, ZrO₂, B₂O₃ a P₂O₅. Nově navržená skla jsou modifikací současně vyráběného skla typu Float. Současně tyto skla musí splňovat provozní parametry, které jsou požadovány při výrobě systémem Float. Mezi tyto parametry patří: hustota, viskozitní křivka, krystalizační a dilatometrické charakteristiky a hydrolytická odolnost.

Získané poznatky z této práce mohou být žádoucí také při navrhování nových skel se sníženou křehkostí a zvýšenou mechanickou pevností.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Kalorimetrické studium polymerace alumosilikátů

Autor: Bc. Zuzana Sehnoutková
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Doc. RNDr. František Škvára DrSc, Doc.Ing. Vít Šmilauer PhD (Katedra mechaniky, FSt ČVUT)

Proces vzniku alumosilikátových polymerů při reakci Si, Al látek jako je popílek, struska nebo metakaolin není dosud plně popsán. Hlavním problémem při sledování vzniku alumosilikátových polymerů (geopolymer) je nedostatek vhodných metod pro kontinuální sledování. Většina použitelných metod (MAS NMR Si, Al, Na, K), IR či RTG difrakce je obtížně použitelná pro kontinuální sledování polymerace alumosilikátových látek. Jako perspektivní se jeví použití kalorimetrické metody (sledování vývoje reakčního tepla).

V této práci byl použit izotermální kalorimetr TAM Air 3116/3239 pro sledování vývoje reakčního tepla v suspenzích (popílek + alkalický aktivátor) po dobu 14 dnů. V práci byly sledovány vlivy různého obsahu Na_2O v alkalickém aktivátoru (NaOH, vodní sklo) na průběh polymerace. S rostoucím obsahem Na_2O se zvyšuje vývoj reakčního tepla. Polymerační reakce probíhá ve 2 až 3 stádiích. Tato práce nadále pokračuje jako součást systematického studia procesu geopolymerace. Práce je součástí grantu GAČR č. 103/08/1639 „Mikrostruktura anorganických alumosilikátových polymerů“.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Studium fyzikálních a strukturních změn keramických materiálů po hydrotermální expozici

Autor: Hana Vacková
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Jana Andertová, CSc.
Školitel specialista: doc. RNDr. Ondřej Gedeon, Ph.D.
Konzultant: Ing. Andrea Pešová

Práce se zabývá studiem fyzikálních a strukturních změn keramických materiálů po hydrotermální expozici. Důsledkem dlouhodobého působení vlhkosti na keramický materiál jsou jeho délkové změny a degradace, která zapříčiňuje jeho stárnutí, poškození a nevratné změny struktury.

Byla připravena série vzorků keramického materiálu z vybraného kaolinitického jílu. Vzorky byly vypáleny podle předem zvolených režimů (různé teploty, různé výdrže na teplotě). Vypálené vzorky byly podrobeny několika hydrotermálním expozicím za různých experimentálních podmínek, byly využity různé doby a teploty expozice.

Byly vyhodnoceny fyzikální změny vzorků po hydrotermální expozici; tzn. byly stanoveny hodnoty relativního prodloužení (deformace). U vybraných vzorků byly vyhodnoceny strukturně chemické změny vzorků po hydrotermální expozici. K identifikaci strukturně chemických změn byla využita difúzně-reflektanční infračervená spektroskopie. Byla nalezena vzájemná korelace se strukturně chemickými změnami.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Materiály na bázi alumosilikátových polymerů

Autor: Bc. Lenka Vinšová
Ročník: M1
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Doc. RNDr. František Škvára DrSc

Byly připravovány materiály na bázi alumosilikátových 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 alumosilikátových 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 alumosilikátových 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 600 °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 „Mikrostruktura anorganických alumosilikátových polymerů“ a výzkumného záměru MSM 6046137302 „Příprava a výzkum funkčních materiálů a materiálových technologií s využitím mikro – a nanoskopických metod“.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Optimalizace výpalu vrstev TiO_2 dopovaných Ag, Au a Cu

Autor: Tereza Žaliová
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Prof. Ing. Josef Matoušek, DrSc.
Konzultant: Ludvík Šanda

Cílem práce bylo zjistit optimální teplotu vrstev připravených metodou sol-gel. Titaničitě vrstvy byly dopovány Ag, Au a Cu. Získané výsledky byly porovnávány s čistě titaničitou vrstvou připravenou za stejných podmínek. K hodnocení vrstev byly použity tři kontrolní metody: měření fotodegradace dvou organických barviv (methylenová modř, oranž II) a dále test hydrofility povrchu vrstvy.

Vrstvy vytvořené ze solů metodou dip-coating byly vysušeny na 60°C a následně vypáleny v horizontální elektrické peci na teplotu od 250°C do 500°C s nárůstem po 50°C. Těchto 6 vzorků od jednoho solu bylo podrobeno výše uvedeným testům. Optimální teplota výpalu vrstvy obsahující pouze TiO_2 byla experimentálně stanovena na 400°C. Při této teplotě bylo dosaženo maximálního fotodegradačního účinku a maximálního snížení úhlu smáčení povrchu vrstvy vodou. U dopovaných vrstev nelze již tak jednoznačně tuto teplotu stanovit, protože z výsledků každé ze tří použitých kontrolních metod vyplývá odlišná hodnota optimální teploty. Jako nejvhodnější se k hodnocení vrstev ukazuje metoda zjišťování superhydrofility.

V následující práci bude proto účelné sledovat jak krystalickou formu TiO_2 ve vrstvách, tak možnou interakci dopantů s činidly používanými na stanovení rychlosti fotodegradace.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Predikce vlastností farmaceutických substancí

Autor: Štefan Auer
Ročník: B3
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: Prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc.

Má bakalářská práce je zaměřena na specifický druh krystalizace, konkrétně na tvorbu kokrystalů API (active pharmaceutical ingredient's = aktivní farmaceutická substance). Mým cílem je rozhodnout, zda je možné na základě teoretických údajů (zejména pK_a) říci o jakýchkoli dvou čistých, za normálních podmínek kapalných látkách, zda-li vytvoří při vzájemné styku po následné krystalizaci kokrystal či nikoli.

Zároveň je mou snahou osvětlit pojem kokrystalů, protože i v dnešní době se jedná o oblast relativně málo probádanou a známou.

Nedílnou součástí mého projektu je práce se „softwarem“ predikující vlastnosti zkoumaných látek volně dostupným na internetu. Při této příležitosti jsem zkusil porovnat predikční schopnosti mnou používaným „freeware softwarem“ Sparc s komerčním programem Pallas 1.2 z roku 1998.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Molekulární strukturní vlivy při asymetrické hydrogenaci C=N vazby substituovaných dihydroisochinolinů

Autor: Zdeněk Křimský
Ročník: B3
Ústav: Organická technologie
Školitel: Doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Práce je orientována do oblasti asymetrické hydrogenace C=N dvojné vazby substituovaných 3,4-dihydroisochinolinů na homogenních Ru(II) katalytických komplexech „Noyoriho“ typu a to $[Ru(Ts-DPEN)(p-cymen)Cl]$, případně $[Ru(Ns-DPEN)(\eta^6\text{-benzene})Cl]$. Hlavní pozornost je věnována vlivu molekulárních strukturních vlivů a to jak na straně katalytického systému, tak na straně stereoselektivně redukováných dihydroisochinolinů lišících se přítomnými substituenty a jejich vzájemnou polohou. Hlavní pozornost je věnována posouzení vlivu přítomnosti/absence a lokace vybraných substituentů na dihydroisochinolinové skeletu, jejich vlivu na elektronické a sterické vlastnosti při tvorbě tranzitních stavů, stejně tak jejich mikrokinetické manifestaci v parametrech reakčních rychlostí a enantioselektivit. K studiu molekulárních strukturních vlivů byla volena kombinace experimentálních technik – kinetická *in situ* měření, fyzikálně-chemické charakterizace a teoretických výpočtů na bázi molekulárního modelování. Výsledky byly následně využity pro racionální design nových ligandů Ru-katalytických komplexů a jejich testování v asymetrické hydrogenaci dihydroisochinolinového skeletu léčiva – Mivacurium alkaloidu, neuromuskulárního blokátoru s myorelaxační aktivitou, které se využívá v moderní kombinované celkové anestézii v medicíně.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Matematické modelování mísení práškových směsí v bubnovém mísiči

Autor: Diana Majerová
Ročník: B3
Ústav: Organické technologie
Školitel: Doc. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.

Mísení pevných sypkých směsí probíhá v závislosti na parametrech procesu (frekvence otáčení, stupeň zaplnění), parametrech konstrukce (velikost a tvar homogenizátoru, přítomnost zarážek) a na parametrech mísených látek (obecně tokové vlastnosti jako například úhel dynamické sklonitelnosti).

Procesy jako je homogenizace se popisují buď na úrovni chování jednotlivých částic (metoda diskretních prvků), nebo na úrovni větších izoparametrických prvků (metoda konečných prvků, buňkové modely). Pro tuto práci je použit právě druhý uvedený model popisující radiální mísení ve válcovém homogenizátoru. Jeho základní charakteristikou je rozdělení systému na buňky, v nichž jsou základní vlastnosti (obsah hmoty, teplot, tlak) stejné. Model popisuje toky částic mezi jednotlivými buňkami, přičemž rozlišuje dynamickou a statickou zónu. Zóny se od sebe liší charakterem toku. Ve statické zóně jsou částice navzájem v klidu, v dynamické zóně dochází k difuznímu toku a vzájemné polohy částic se tak mohou měnit. S použitím tohoto modelu bylo simulováno chování směsi s různými parametry (stupeň zaplnění, úhel sklonitelnosti, apod.).

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Vývoj metody pro *in-vivo* monitorování neurochemických změn v mozku potkanů

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

Předkládaná práce se zabývá vývojem analytické metody, která umožňuje kvantifikovat změny v hladinách dopaminu a jeho metabolitů ze vzorků odebraných *in vivo* z mozkového centra *nc.accumbens* (NA) u potkanů. Vzorky byly odebírány *in vivo* z NA perfuzní mikrodialyzační technikou. Pro bioanalytické stanovení dopaminu a jeho metabolitů: 4-hydroxyvanilové kyseliny (HVA), 2-(3,4-dihydroxyfenyl)octové kyseliny (DOPAC), 3-methoxytyraminu (3-MT) z mikrodialyzátů, byla použita vysoce citlivá a selektivní metoda HPLC-MS/MS a testováno její použití v kombinaci s řadou koncentračních a separačních metod. Odebrané mikrodialyzáty byly před analýzou stabilizovány HCl a předloženy k separační a koncentrační části metody: lyofilizace, extrakce na pevné fázi, stripování dusíkem. Při vývoji metody byla pozornost věnována i posouzení stability dopaminu a jeho metabolitů. Následně byla aplikovatelnost metody testována v experimentálních studiích. Na jejich základě bylo možné konstatovat, že kombinace těchto technik má své nezastupitelné místo v biomedicínském výzkumu mozku. Umožňuje velice citlivě zkoumat biochemickou podstatu neuropsychiatrických onemocnění a poruch na systémové úrovni. Poznatky těchto studií významně přispívají k efektivnější identifikaci cílů farmakoterapie mozkových poruch.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Validace čistících procesů metodou suchých stěrů

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

Validace čištění (cleaning validation) je prostředek sloužící k vyloučení kontaminace léčiva látkami z předchozí výroby nebo detergenty z čistícího procesu. Kontrola se provádí vizuálně, různými typy stěrů nebo analýzou poslední oplachové vody. Vizuální kontrola je rychlá a levná, stěry jsou spolehlivé a citlivé, vyžadují ale validovanou analytickou metodu. Suché stěry fungují na principu mechanického přenesení případné nečistoty na kontrastní materiál (utěrku) a následné hodnocení, které může být kvalitativní nebo semikvalitativní s využitím analýzy obrazu. Stanovovala jsem mez vizuální detekce znečištění několika modelových preparátů – ibuprofenu, kofeinu a agenu. Vizuální posouzení suchého stěru bylo složité, proto jsem stěr zhodnotila kvalitativně posouzením závislosti intenzity na naneseném množství. Metoda je použitelná, citlivost ale může záviset na preparátu, takže pro přesnější výsledky je třeba kalibrovat jednotlivé preparáty.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Krystalové formy Trosipium chloridu

Autor: Eliška Skořepová
Ročník: B3
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: Dr. Ing. Michal Hušák

Tato práce se zabývá rozšířením informací o polymorfech a solváttech látky trosipium chlorid. Trosipium chlorid je léčivo používané pro léčbu inkontinence. Doposud byly známy 4 krystalové formy – methanol solvát (P21/n), aceton solvát (P21/n) a dva různé anhydráty připravené z ethanolu (P21 a P21/c). V průmyslové výrobě se krystalizuje trosipium chlorid z ethanolu, proto jsem se zaměřila na určení podmínek pro vznik fáze P21 a P21/c, které vznikají při krystalizaci z ethanolu. Byla navržena teorie, že roli při vzniku jedné nebo druhé fáze hraje přítomnost vody v rozpouštědle (ethanolu), případně teplota. Provedla jsem sérii pokusů (celkem 52), při kterých jsem měnila poměr ethanol:voda, krystalizační teplotu a výchozí koncentraci. Identifikace fáze byla provedena RTG práškovou difrakcí, RTG difrakcí na monokrystalu a pomocí NMR pevné fáze. Výsledek potvrdil u všech krystalizačních pokusů vznik pouze fáze P21. Následně byla část pokusů zopakována s cílem připravit monokrystal. V jednom případě se podařilo připravit novou fázi trosipium chlorid ethanol solvát (P-1). Při kontrole starších krystalizačních pokusů se podařilo difrakcí na monokrystalu potvrdit existenci fáze P21/c, která vzniká za identických podmínek jako fáze P21. Pokusy dokazují, že si studium polymorfů a solvátů trosipium chloridu zaslouhuje další pozornost.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Metoda laserové difrakce a její použití ve farmaceutickém průmyslu

Autor: Michal Šimek
Ročník: B3
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: Prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc.

V prezentované práci bude představena metoda laserové difrakce. Tato metoda patří mezi rutinní stanovení velikosti distribuce částic farmaceuticky aktivních substancí. Využívá ji většina farmaceutických firem pro kontrolu velikosti částic (vstupní resp. výstupní).

Budou diskutovány principy metody, její výhody a nevýhody v porovnání s ostatními technikami stanovení distribuce velikosti částic a v závěru práce budou prezentovány již dosažené výsledky měření touto metodou. Velikost částic je důležitým parametrem v charakterizaci API, je to zejména proto, že částice o různé velikosti a tvaru mohou významně ovlivnit procesy průmyslového zpracování (homogenizace, granulace, tabletování) a následného chování léčivé formy (desintegrace tablet, pevnost tablet a disoluce).

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Studium hygroskopického chování vybrané API

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

Studium hygroskopicity, tedy schopnosti látek přijímat a udržovat vlhkost, umožňuje určit chování látky za daných podmínek relativní vlhkosti. Sorpce vody vzorkem může významně ovlivňovat fyzikálně-chemické vlastnosti vzorku. Výsledky sorpčních experimentů tedy mohou napomoci k určení limitních podmínek relativní vlhkosti při zpracování pevných látek, při kterých nebude docházet k významným změnám fyzikálně-chemických vlastností dané látky.

V prezentované práci bude ukázáno hygroskopické chování vybrané farmaceuticky aktivní substance. K měření hygroskopicity byl v této práci využíván přístroj DVS Advantage 1. Na přístroji byla vytvořena metoda pro zmapování hygroskopicity dané látky v závislosti na prostředí jakému je látka vystavena. Vyvinutou metodu bude možné využít i pro jiné vzorky. Na základě získaných výsledků bylo možno predikovat chování dané API vůči vzdušné vlhkosti. Tato informace je klíčová pro práci s látkou samotnou a při výběru vhodné technologie výroby léčivé formy a skladování takového přípravku.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Interkalace salicylátu do struktury hydrotalcitu

Autor: Zuzana Maryšková
Ročník: M1
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: Doc. Ing. František Kovanda, CSc.

V práci byla studována interkalace aniontů kyseliny salicylové a acetylsalicylové do Mg-Al a Zn-Al hydrotalcitu. Interkalace byla provedena aniontově-výměnnou reakcí s použitím srážených prekurzorů v dusičnanové formě a rehydratační reakcí směsného oxidu připraveného tepelným rozkladem Mg-Al hydrotalcitu. Byla ověřena rovněž přímá syntéza interkalátu srážecí reakcí roztoku chloridu hořečnatého a hlinitého v přítomnosti salicylátu sodného. Připravené produkty byly charakterizovány pomocí práškové rentgenové difrakční analýzy a infračervené spektroskopie. Interkalace organických aniontů do struktury Mg-Al hydrotalcitu s využitím aniontově-výměnné a rehydratační reakce nebyla úspěšná, produkt interkalovaný anionty kyseliny salicylové se podařilo připravit srážecí reakcí. Zn-Al hydrotalcit interkalovaný anionty kyseliny salicylové byl připraven aniontově-výměnnou reakcí. Při aniontově-výměnné reakci v roztoku kyseliny acetylsalicylové došlo k odtržení acetylové skupiny a do mezivrstvého prostoru hostitelské struktury se interkalovaly anionty kyseliny salicylové. Disoluční testy provedené v roztoku HCl (pH = 1) prokázaly významně rychlejší uvolňování salicylátu z tablet obsahujících interkalované produkty ve srovnání s referenčními tabletami obsahujícími salicylát sodný.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Limity stanovení struktury organických látek z práškových dat

Autor: Jana Vachová
Ročník: M1
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: Dr. Ing. Michal Hušák

Tato práce se zabývá stanovením limitu zatížení vstupních dat experimentálními chybami a nestandardními vlastnostmi vzorku pro prášková difrakční data. Cílem je stanovit limit kdy je ještě možné krystalovou strukturu z práškových dat vyřešit. Jako modelové látky pro testy byly použity simvastatin a alaptid. Pro simvastatin je struktura známá z monokrystalu, pro alaptid z práškové difrakce na synchrotronu. Základem pro simulace se stala data obou látek měřená na synchrotronu. Pomocí programu DASH bylo zkoumáno, za jakých podmínek je struktura vyřešitelná s ohledem na šum a ořez difrakčního záznamu u obou zmíněných látek. V další fázi testů se u simvastatinu zkoumalo, za jakých podmínek se povede strukturu vyřešit s ohledem na rozšíření píků a preferenční orientaci krystalů. V tomto případě byl použit simulovaný záznam spočítaný na základě řešení struktury z monokrystalu.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Ergotamin tartrát

Autor: Jana Balcárková
Ročník: M2
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: Prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc., RNDr. Alexandr Jegorov CSc., Ph.D. RNDr. Aleš Gavenda

Ergotamin patří mezi námelové alkaloidy, které jsou produkovány hlavně plísní rodu *Claviceps purpurea* parazitující na žitě i jiných obilninách a trávách. Jednou z podskupin námelových alkaloidů je skupina peptidových alkaloidů (ergopeptidy), kde patří i ergotamin. Jeho strukturu tvoří D-lysergová kyselina spojená pomocí peptidové vazby s tripeptidickým zbytkem. Ergotamin tartrát je sůl ergotaminu báze a kyseliny vinné. Tato sloučenina byla poprvé izolovaná z námelového extraktu v roce 1918 a použita v terapii migrény v roce 1925. Ergotamin tartrát má široké pole terapeutického působení. Používá se v léčbě migrénozních ataků a jiných typů bolesti hlavy vaskulárního původu, má vasokonstrikční účinky, inhibuje cirkulační baroreceptorové reflexy a má také uterotonický účinek. Jedním z významných producentů ergotaminu báze je i společnost Teva Pharmaceuticals CR, s.r.o., kde vývoj v oblasti této látky probíhal v 60. letech minulého století. Protože farmaceutická dokumentace v této době nemusela být zdaleka tak podrobná jako dnes, jde o zajímavou oblast k opětovnému prozkoumání hlavně co se týče struktury samotné.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Kryštalografické štúdie alaptidu

Autor: Bc. Katarína Buliaková
Ročník: M2
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: Prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc.

Alaptid je spirocyklický synteticky pripravený dipeptid, ktorý veľmi pozitívne ovplyvňuje fyziologické a regeneračné procesy, urýchľuje epitelizačný proces a priebeh hojenia kožných problémov. Zároveň má pozitívny vplyv na centrálny dopaminergný systém, ktorý bol zdokumentovaný na chovaní a pamäti zvierat. Alaptid však vykazuje nízku rozpustnosť a teda aj biodostupnosť. Domnievame sa, že práve príprava vhodného kokryštálu by mohla viesť k zlepšeniu jeho farmakokinetických vlastností.

Základným predpokladom pre stanovenie štruktúry farmaceutických substancií je vypestovať kvalitné kryštály, ktoré sú vhodné pre difrakčnú analýzu. Cieľom práce je pripraviť monokryštál a neskôr nájsť vhodnú látku na prípravu kokryštálu. K identifikácii nových fáz bola použitá RTG prášková difrakcia a RTG štruktúrna analýza monokryštálu. Monokryštál alaptidu, vhodný pre RTG štruktúrnú analýzu sa podarilo pripraviť, a aj vyriešiť jeho štruktúru. Výsledok a interpretácia RTG štruktúrnej analýzy monokryštálu bude súčasť prezentácie.

Sekce : Analýza a vlastnosti léčiv

Strukturní analýza taxanů

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

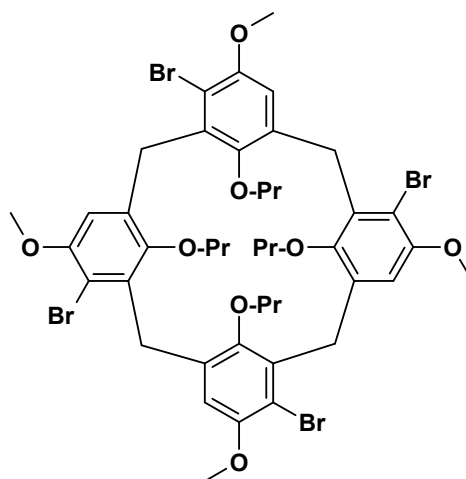
Taxany jsou cytostatika přírodního původu, extrahovaná z různých druhů tisů. Nejvýznamnějším zástupcem je paclitaxel, který je používán v terapii karcinomu prsu, ovariálních a také bronchiálních karcinomů. Je podáván buď v počátečním stádiu léčby v kombinaci s dalšími přípravky, nebo jako lék druhé linie. Jeho cytostatický účinek spočívá v působení na dělicí vřeténko buňky. Interakce s mikrotubuly buněk zabrání správnému přenosu genetické informace k pólům dělicí se buňky. Jednou z jeho minoritních složek vznikajících při syntéze je například taxcultin. Mapování možných forem taxcultinu, včetně vyřešení jejich struktur, je nutné pro charakterizaci nečistoty, a skýtá se zde možnost nalezení stabilní formy potencionální aktivní substance. V rámci experimentu byla připravena řada monokrystalů taxcultinu z různých organických rozpouštědel. U připravených monokrystalů taxcultinu z dioxanu a ethylmethyleketonu byla provedena rentgenová fázová analýza, z jejichž výsledků bylo zřejmé, že připravené krystaly tvoří pravděpodobně dvě odlišné řady, jedná se tedy o polymorfy nebo solvatomorfy. V současné době probíhají přípravy monokrystalů taxcultinu z dalších organických rozpouštědel a jejich směsí. V plánu je provést také rentgenovou strukturní analýzu vzniklých monokrystalů a charakterizace dalšími analytickými metodami. Zároveň probíhá příprava monokrystalů paclitaxelu z dioxanu a THF.

Sekce : Organická chemie M1

Meta-substituce calix[4]arenu

Autor: Jan Motyčka
Ročník: M2
Ústav: Organické chemie
Školitel: Doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.

Pro aromatickou část calixarenového skeletu je typická substituce *para*-polohy (tzv. horní okraj). Naproti tomu *meta*-substituované deriváty představují nejméně prozkoumanou oblast chemie calix[4]arenů. Tato práce se zabývá substitucí *para*-poloh takovými skupinami, které vedle toho, že blokují horní okraj calixarenu, rovněž díky svému kladnému mesomernímu efektu nebo vlivu podporujícímu *ortho*-lithiace aktivují pro další elektrofilní substituci právě *meta*-polohy calixarenového skeletu. U těchto derivátů je snaha o objasnění regioselektivity substitucí, přičemž jednou z možností navázání substituentů je i inherentní chiralitu vykazující připravený tetrabromcalix[4]aren.

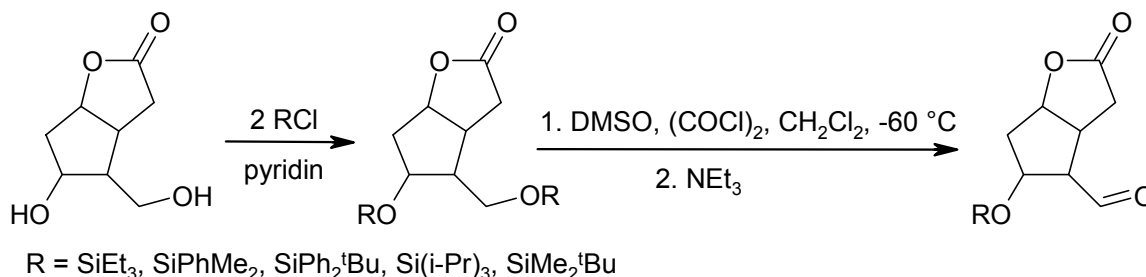


Sekce : Organická chemie M1

Studie oxidace silylovaných derivátů Coreyho diolu

Autor: Marie Dymičová
Ročník: M1
Ústav: Organické chemie
Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Coreyho diol je základní meziprodukt při výrobě některých typů prostaglandinů. Klíčovými kroky vícestupňové syntézy jsou ochránění primární hydroxylové skupiny, její následná oxidace a Wittigova reakce. Cílem mé práce bylo připravit si sérii disilylovaných derivátů Coreyho diolu a ty pak přímo oxidovat pomocí DMSO/(COCl)₂ na příslušné aldehydy. S rostoucím sterickým bráněním se značně prodlužovala reakční doba silylace. Jako nejlepší silylová skupina pro oxidaci se v souladu s dříve publikovanou prací ukázala být –SiEt₃. V případě –SiPhMe₂ došlo během reakce k deprotektci sekundární hydroxyskupiny, zbylé disilylované deriváty s DMSO nereagovaly.



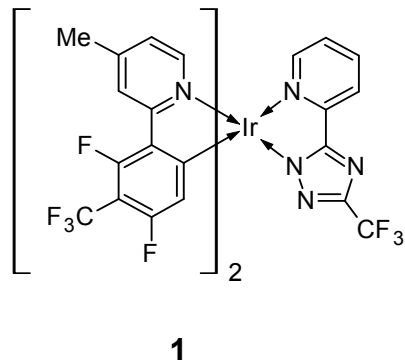
Sekce : Organická chemie M1

Syntéza foto- a elektroaktivních molekulárních materiálů

Autor: Petr Koutník
Ročník: M1
Ústav: Center for Photochemical Sciences, Department of Chemistry,
Bowling Green State University, Ohio, U.S.A.
Školitel: Prof. Pavel Anzenbacher, Jr.

Byly syntetizovány čtyři typy materiálů určené pro studium aplikace v elektronických a optoelektronických zařízeních typu OLED (organic light-emitting diodes) a OPV (organic photovoltaic devices).

Studována byla příprava materiálů s elektron-transportními vlastnostmi ze skupiny 4,4',4''-tris(*N,N*-difenylamino)-trifenylaminů (*m*-MTDATA), 1,2,3-tris(*N*-fenylbenzimidazol-2-yl)benzen (TPBI). Připraven byl též iridiový komplex typu Ir(ppy)₃ založený na 2-fenylpyridinovém derivátu (**1**) a derivát odvozený od squarínové kyseliny.

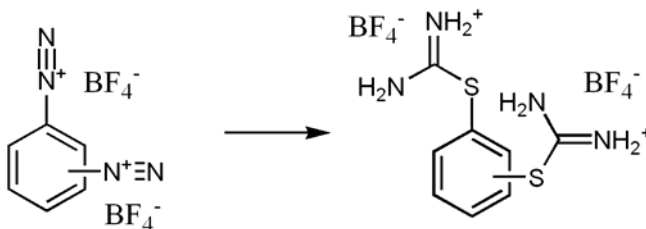


Sekce : Organická chemie M1

Rigidizované isothiuroniové soli jako stavební bloky supramolekulárních struktur

Autor: Václav Eigner
Ročník: M2
Ústav: Organické chemie
Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.

Isothiuroniové soli jsou ze syntetického hlediska poměrně prozkoumanou skupinou látek, která nachází využití hlavně v syntéze thiolů. Pro jejich značnou podobnost s amidiny jsou v poslední době zkoumány v medicíně. Velký význam isothiuroniové soli získaly na poli supramolekulární chemie pro svou schopnost komplexace rozličných aniontů organických i anorganických kyselin. Příprava alifatických isothiuroniových solí je prostou Sn2 substitucí, pro přípravu struktur s rozsáhlým systémem vodíkových vazeb však nejsou nejvhodnějšími kandidáty pro svou nízkou rigiditu. Proto jsme se rozhodli pro použití rigidizovaných sloučenin obsahujících aromatické jádro. Při jejich syntéze je obtížnější než u alifatických analogů. Nejrozumnější metodou je nahrazení diazoniové skupiny thiomocovinou. Pro studium asociátů s anionty kyselin byla vybrána rentgenostrukturní analýza, jako vhodný nástroj pro studium vodíkových vazeb v pevné fázi.



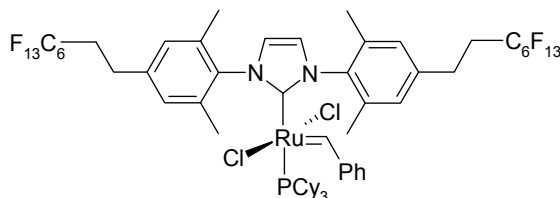
Sekce : Organická chemie M1

Fluorové NHC ligandy a Grubbsovy komplexy

Autor: Vendula Kelbichová
Ročník: M1
Ústav: Organické chemie
Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

N-heterocyklické karbenové (NHC) ligandy mají široké uplatnění v homogenní katalýze. Cílem mé práce byla komplexace fluorových variant těchto ligandů s přechodnými kovy.

Nejprve jsem připravila příslušné polyfluoralkylované imidazoliové soli, sloužící jako prekurzory NHC ligandů. Klíčovou reakcí pro zavedení perfluoralkylového řetězce na aromatický systém byla Heckova reakce. Dále jsem se zabývala převedením těchto imidazoliových solí na NHC ligandy a následnou syntézou jejich komplexů stříbra a ruthenia. Získala jsem tak fluorové varianty Grubbsova a Grubbsova-Hoveyдова komplexu 2. generace a polyfluoralkylovaný stříbrný komplex.



Sekce : Organická chemie M1

Modelové reakce benzenoxidu, reaktivního intermediátu v metabolismu benzenu

Autor: Kateřina Míčová
Ročník: M2
Ústav: Organické chemie
Školitel: Doc. Ing. Igor Linhart, CSc.

Benzenoxid je reaktivní intermediát v metabolismu benzenu, který se může vázat na biologicky důležité thioxy, jako glutathion a cysteinové jednotky v proteinech a dále na nukleofilní centra v DNA. Jeho reaktivita byla studována na modelových reakcích s N-acetylcysteinem, 2'-deoxyadenosinem a 2'-deoxyguanosinem. Reakce byly provedeny jak v pufovaných vodných roztocích, tak i v organických rozpouštědlech.

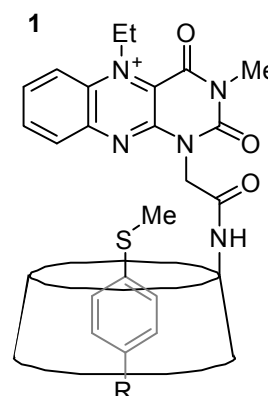
Pokud reagoval benzenoxid s N-acetylcysteinem vznikalo značné množství dvou merkapturových kyselin, N-acetyl-S-(6-hydroxy-2,4-cyklohexandien-1-yl)cysteinu a N-acetyl-S-fenylcysteinu. Na druhou stranu, při reakci benzenoxidu s 2'-deoxyadenosinem nebo 2'-deoxyguanosinem v DMSO, vznikla pouze stopa příslušného aryl nukleosidu, což poukazuje na velmi malou reaktivitu těchto arenoxidů s nukleofilními centry v DNA. Produkty byly identifikovány a kvantitativně stanoveny metodou LC/MS s použitím autentických standardů.

Sekce : Organická chemie M1

Konjugáty alloxazinu a cyklodextrinu jako katalyzátory oxidací

Autor: Viktor Mojr
Ročník: M2
Ústav: Organická chemie
Školitel: Doc. Ing. Radek Cibulka, Ph.D.

Deriváty flavinů (alloxazinů i isalloxazinů) se používají jako katalyzátory dvouelektronových oxidací sulfidů peroxidem vodíku. Při oxidaci prochirálních sulfidů v přítomnosti flavinových derivátů vznikají sulfoxidy ve formě racemické směsi. V dnešní době, zvláště ve farmaceutickém průmyslu, však vzrůstá poptávka po jednotlivých enantiomerech sulfoxidů (vzhledem k možné rozdílné účinnosti). Proto by bylo vhodné připravit chirální flavinový derivát, který by sulfoxidace katalyzoval enantioselektivně. Vhodným chirálním prvkem může být β -cyklodextrin, jehož chirální a relativně lipofilní kavita umožňuje inkluzi aromatických sulfidů a fixuje je v definované poloze vůči reaktivnímu místu (flavinu). V práci byl připraven konjugát **1** derivátu alloxazinu a β -cyklodextrinu s amidovým linkerem. Jako substrát pro homogenní katalytickou oxidaci byl použit substituovaný thioanisol.

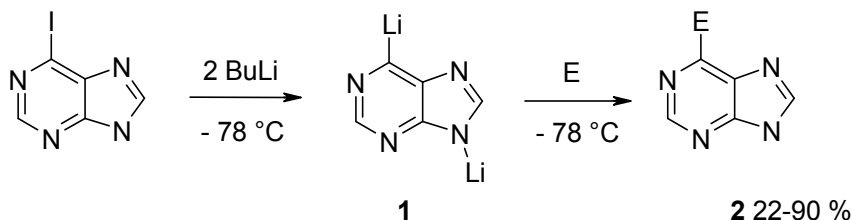


Sekce : Organická chemie M1

Lithiace 6-halogen-9H-purinů

Autor: Ivana Polcarová
Ročník: M1
Ústav: Organická chemie
Školitel: Prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.

Z literatury je známo, že 6-substituované puriny jsou stabilní pouze při $-130\text{ }^{\circ}\text{C}$, při vyšší teplotě dochází k migraci lithia do polohy 8 purinového skeletu. Proto jsme se pokusili o stabilizaci 6-lithiopurinu a to tvorbou dianiontu **1**. Následná reakce s aldehydy a ketony, provedená při $-78\text{ }^{\circ}\text{C}$, poskytuje 6-substituované puriny **2** v izolovaném výtěžku 22-90 %. Studium reaktivity s dalšími elektrofilny bude diskutováno v příspěvku.



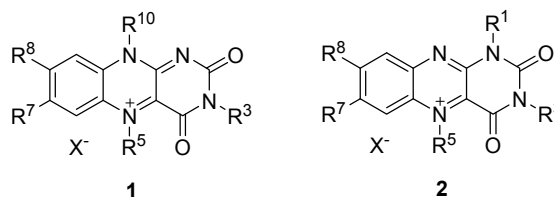
Sekce : Organická chemie M1

C-4a adukty flavinů a jejich participace při flaviny katalyzovaných oxidacích

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

Flaviniové soli představují účinné katalyzátory oxidace sulfidů a terciárních aminů s využitím peroxidu vodíku jako stechiometrického oxidačního činidla. Kromě flaviniových solí **1** odvozených od přírodního isoalloxazinu byly v poslední době testovány rovněž deriváty alloxazinu **2**.

Mechanismus S- a N-oxidací byl důkladně prostudován pouze v případě isoalloxaziniových solí. Mechanismem účinku alloxaziniových solí se dosud nikdo nezabýval. Předpokládá se, že je stejný jako v případě solí isoalloxaziniových. Naše experimentální výsledky však ukazují, že tomu tak není. Důvodem rozdílného mechanismu katalytického působení solí **1** a **2** při oxidacích peroxidem vodíku je pravděpodobně rozdílná ochota obou solí pro tvorbu aduktů s nukleofily. Cílem práce je detailní studium těchto aduktů vedoucí k objasnění katalytického cyklu pro oba typy solí. Výsledky budou využity při návrhu potenciálně účinnějších katalyzátorů.



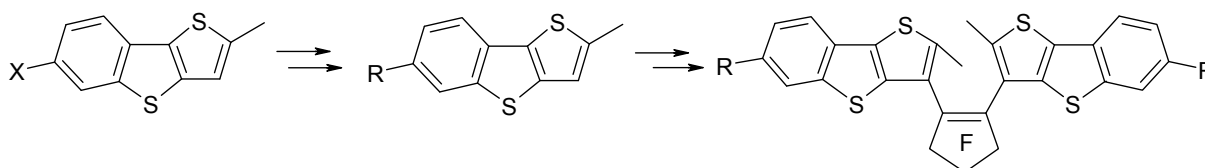
Sekce : Organická chemie M1

Deriváty thieno[3,2-b][1]benzotiofénu: potenciálně molekulové prepínače

Autor: Michal Májek
Ročník: M1
Ústav: Organické chemie
Školitel: Prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

V nadvěznosti na skúsenosti nášeho laboratória s syntézou derivátov thieno[3,2-*b*][1]benzotiofénu sme sa rozhodli syntetizovať molekulový prepínač na tejto báze. Modelová látka nesubstituovaná v polohe 6 (X=R=H) bola úspešne syntetizovaná a jej vlastnosti sú zhrnuté v tejto práci.

Za ďalší cieľ sme si stanovili syntézu prepínača na báze derivatizovaného thieno[3,2-*b*][1]benzotiofénu, ktorý by mal vykazovať kvapalne kryštalické vlastnosti. Prvým krokom bolo vypracovanie metodiky syntézy halogénovaného thieno[3,2-*b*][1]benzotiofénu, kľúčovým krokom syntézy je náhrada halogénu za alkyl a posledným krokom je syntéza samotného prepínača.



Sekce : Organická chemie M2

Amidiny v krystalovém designu

Autor: Petr Kovaříček
Ročník: M2
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.

Jednou z oblastí supramolekulární chemie v pevném stavu je tektonový přístup a molekulární síťování. Jako všechny je i tento obor založen na přístupech preorganizace molekuly a designu interakcí, mezi nimiž je klíčová vodíková vazba zejména díky své směrovosti. Výsledky této oblasti rozvíjí možnosti predikce krystalových struktur.

Svou práci jsem věnoval přípravě struktur, které by byly schopny tvořit vodíkové vazby zejména jako exo-receptory v tektonovém přístupu a tak dávaly možnost vzniku supramolekulárních krystalových sítí spojených vodíkovou vazbou. Pozornost jsem zaměřil především na amidinové skupiny, mezi něž řadím i cyklické deriváty jako dihydroimidazoly a tetrahydropyrimidiny.

Provedl jsem několik sérií krystalizačních experimentů připravených látek, čímž jsem získal desítky monokrystalů vhodných pro rentgenostrukturní analýzu, dále jsem práci rozšířil o zabudování koordinujících přechodných kovů do krystalu a o stanovení základních konstant připravených ligandů v roztoku.

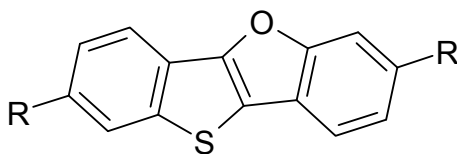
Výsledky potvrzují vysoký potenciál designu vodíkových vazeb v amidinových sériích pro predikci krystalové struktury.

Sekce : Organická chemie M2

Syntéza kondenzovaných heterocyklických sloučenin pro potenciální využití v elektronických zařízeních

Autor: Lucie Řehová
Ročník: M2
Ústav: Organická chemie
Školitel: Prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

V poslední době se zvyšuje zájem o tzv. OFETs (Organic Field-Effects Transistors) jako o levnou alternativu současných amorfních tenkofilmových polovodičů na bázi křemíku. Aby bylo možné je komerčně využít, je potřeba upravit jejich vlastnosti. Pozitivní změny v těchto vlastnostech vykazují Π -konjugované molekuly jako jsou oligomery thiofenu a jeho kondenzované analogy. Ve své práci jsem se zabývala syntézou a reaktivitou benzo[h]thienobenzofuranu a přípravou modelových derivátů pro studium elektronických vlastností.

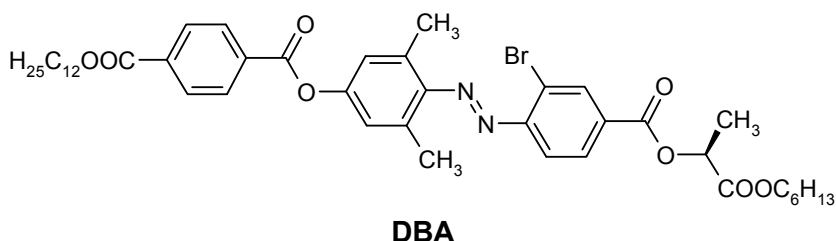


Sekce : Organická chemie M2

Syntéza a vlastnosti kapalně-krystalické azolátky DBA

Autor: Martin Cigl
Ročník: M2
Ústav: Organická chemie
Školitel: Doc. Ing. František Hampl, CSc.

(*E*)-izomery chirálních tyčinkovitých kapalných krystalů na bázi azolátek obvykle tvoří ferroelektrické mesofáze. Jejich fotochemická *E/Z* izomerizace nabízí možnost přepnutí ferroelektrické mesofáze na antiferroelektrickou. V důsledku rozsáhlé konjugace jsou však u většiny azolátek (*E*)-izomery poměrně stabilní. DBA má díky vhodné laterální substituci porušenou konjugaci systému a tím probíhá *E/Z* izomerizace velice snadno. Látky tohoto typu by mohly mít velký potenciál pro využití v optoelektronických zařízeních jako jsou molekulární paměti, switche apod.

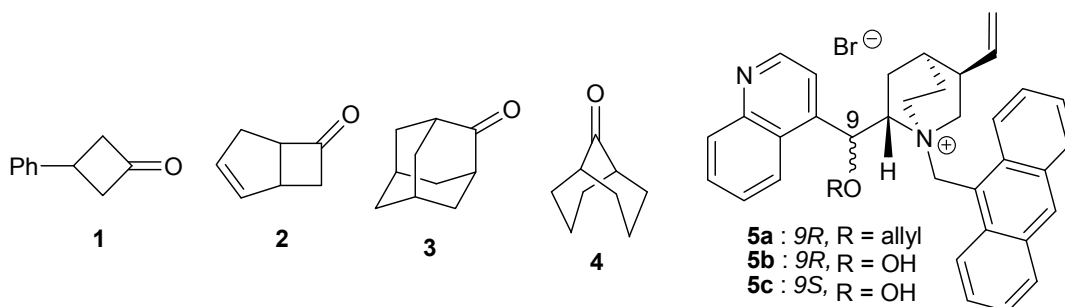


Sekce : Organická chemie M2

Oxidace Baeyerova-Villigerova typu katalyzované fázovým přenosem

Autor: Eva Hanzlová
Ročník: M1
Ústav: Organická chemie
Školitel: Ing. Tomáš Martinů, Ph.D.

Ketony **1-4** jsou ve vysokých výtěžcích oxidovány na příslušné laktony vodným roztokem chlornanu sodného ve dvoufázovém systému za přítomnosti methyltrioktylamonium-chloridu jako katalyzátoru fázového přenosu. Kvantově-chemické výpočty a oxidace pomocí $Na^{18}OCl$ ukázaly, že keton **1** reaguje mechanismem Baeyerova-Villigerova typu. Stereoselektivita oxidace ketonů **1** a **2** za chirální katalýzy deriváty chininových bází **5** byla nízká.



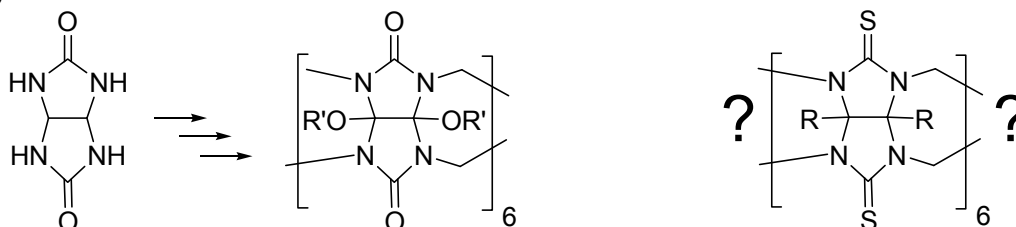
Sekce : Organická chemie M2

Derivatizace cucurbiturilu

Autor: Markéta Zajícová
Ročník: M1
Ústav: Organické chemie
Školitel: Doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.

Cucurbiturily jsou makrocyclické sloučeniny vznikající kondenzací glykolurilu nebo jeho derivátu s formaldehydem. Tyto látky jsou díky svému rigidnímu skeletu typické nízkou rozpustností v běžných rozpouštědlech.

Cílem této práce je připravit rozpustnější deriváty cucurbiturilu pomocí alkylace zavedených hydroxy skupin a pokusit se o syntézu sirných analogů cucurbiturilu, které doposud nebyly popsány.



Sekce : Organická chemie M2

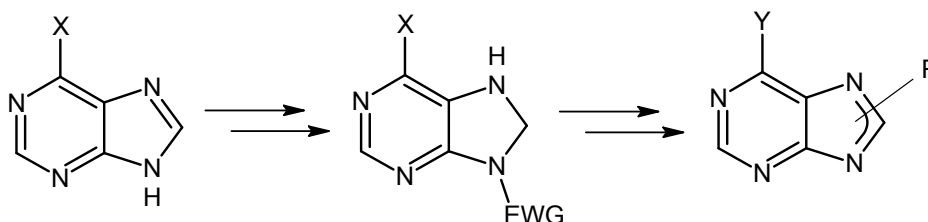
Dihydropuriny – pokrok v purinové chemii

Autor: Vladislav Kotek
Ročník: M2
Ústav: Organické chemie
Školitel: Prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.

Práce navazuje na předchozí snahu přípravy a využití dihydropurinových derivátů pro syntézu nových biologicky aktivních látek. Původně připravené dihydropuriny vykazovaly nízkou stabilitu, což bylo spojeno s omezenou využitelností těchto látek.

Systematickým studiem však byla objevena možnost jejich stabilizace. Takto byla vyvinuta efektivní metodika přípravy nových derivátů, které slouží jako univerzální prekurzory pro další syntetické transformace purinového skeletu. Zvýšena pozornost byla věnována Heckově reakci v poloze 6, kde se podařilo dosáhnout významného úspěchu.

Všechny doposud nabyté poznatky ukázaly, že deriváty dihydropurinů mají své využití a nejsou pouhou „slepou uličkou“ purinové chemie. Budoucí úsilí bude tedy orientováno nejen na studium reaktivity, ale především na další možnosti využití těchto látek.



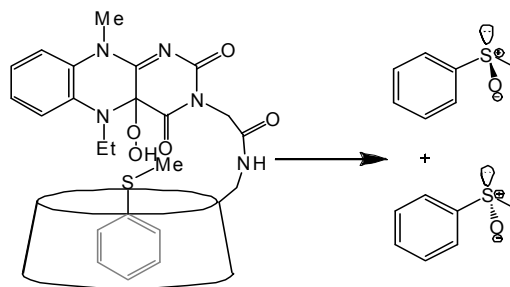
Sekce : Organická chemie M2

Použití konjugátu β -cyklodextrinu s isoalloxazinem ke katalýze

Autor: Vladimír Herzig
Ročník: M1
Ústav: Ústav organické chemie, ÚOCHB AV ČR
Školitel: Doc. Ing. Radek Cibulka, Ph.D., Mgr. Tomáš Kraus, Ph.D. (ÚOCHB AV ČR)

Flaviny jsou známé organokatalyzátory oxidace organických sulfidů na sulfoxidy. Připojením cyklodextrinového makrocyklu amidovou vazbou k flavinu bylo zavedeno do molekuly katalyzátoru chirální okolí, které ovlivňuje stereoselektivitu jím katalyzované reakce.

Nejprve bylo nutné převést flavinovou část konjugátu na aktivní formu kvarterní amoniové soli. To se provádí reduktivní alkylací acetaldehydem a redukcí vodíkem na palladiu. Tato reakce byla testována za různých podmínek (v prostředí různých kyselin a po různou dobu) kvůli relativní nestabilitě cyklodextrinu. Takto připravené katalyzátory byly testovány za stejných podmínek na katalýze oxidace thioanisolu na sulfoxid při laboratorní teplotě ve vodném prostředí. Byla stanovena konverze po různých dobách a také enantioselektivní přebytky jednotlivých enantiomerů. Dále jsou zkoumány další substráty podmínky reakce.



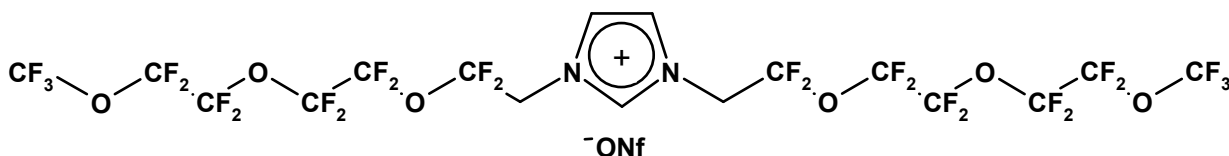
Sekce : Organická chemie M2

Syntéza polyfluorovaných imidazoliových solí a studium jejich fluorofilít

Autor: Jana Paterová
Ročník: M2
Ústav: Organická chemie
Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Polyfluorované iontové kapaliny na bázi imidazoliových solí s větvenými polyfluoretherovými řetězci vykazují vysokou fluorofilitu i účinnost a téměř nulovou tenzi par. Naproti tomu imidazoliové soli s polyfluoralkylovými řetězci jsou krystalické a vykazují nízké hodnoty fluorofilít. Mým cílem bylo syntetizovat imidazoliové soli s lineárními polyfluoretherovými řetězci pomocí triflátů a nonafátů příslušných alkoholů, změřit fluorofilitu těchto systémů a pokusit se s pomocí kvantově chemických výpočtů vysvětlit rozdíly ve fluorofilitě výše uvedených imidazoliových solí. Z výsledků vyplývá, že polyfluoretherové řetězce jsou schopny stočit se nad a pod jádro, a tím účinně chránit hydrofilní část molekuly před fluorofilním rozpouštědlem.

Dále jsem se pokusila využít připravené trifláty na cross-coupling reakce, čímž by se otevřel nový prostor pro zavádění polyfluorovaných řetězců do organických molekul.

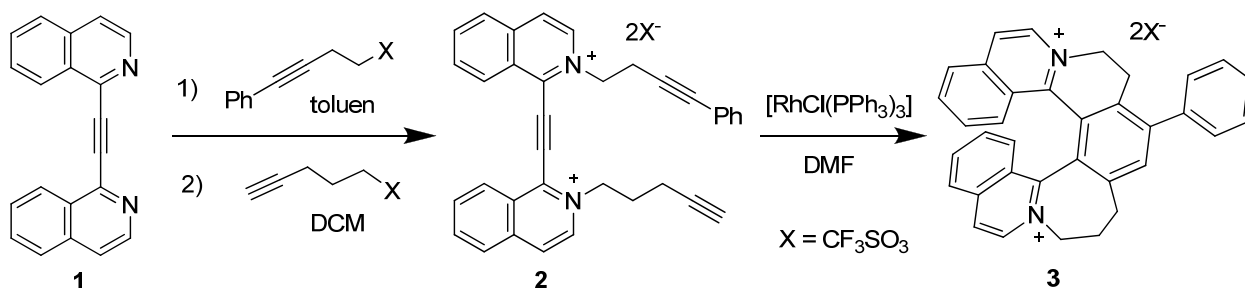


Sekce : Organická chemie M2

Syntéza nesymetrických [7]helquatů

Autor: Lukáš Severa
Ročník: M1
Ústav: Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Školitel: Mgr. Filip Teplý, Ph.D.

Nedávno jsme představili helquaty, novou skupinu vodorozpuštěných fluorescentních helikálních dikationtů. Novinkou je syntéza nesymetrických helquatů (viz schéma). Nejprve se provede monokvarternizace produktu Sonogashirova kaplinku **1** prvním triflátem v toluenu. Poté se monokation kvarternizuje druhým triflátem v dichlormethanu za vzniku nesymetrického triynu **2**. Následuje klíčová [2+2+2] cykloizomerace triynu, kdy vzniká nesymetrický [7]helquat **3**. Purifikaci všech kationických látek lze provést bez použití chromatografie. Struktura látky **3** byla potvrzena rentgenovou difrakcí.



Sekce : Organická chemie M2

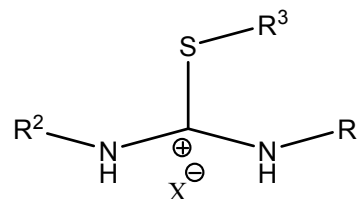
Příprava chirálních isothiuroniových solí

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

Isothiuroniové soli jsou velmi zajímavé sloučeniny, které jsou předmětem mnoha studií v různých oblastech chemie. Tradiční uplatnění nacházely jako meziproducty při přípravě thiolů. V poslední době začaly být využívány pro komplexace aniontů, kdy bylo zjištěno, že tyto sloučeniny dokáží selektivně vázat různé anionty. Afinita k aniontu je určena jednak strukturou isothiuroniové soli tj. ligandu, pak strukturou a tvarem aniontu a v neposlední řadě ovlivňuje afinitu k aniontu i prostředí.

Vzhledem k tomu, že ve fyziologickém prostředí je většina látek chirálních, je z hlediska biologických aplikací zajímavé použít chirální ligandy.

Cílem této práce bylo připravit chirální ligandy na bázi isothiuroniových solí



Sekce : Organická chemie M3

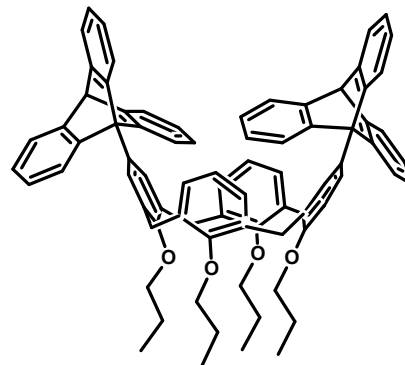
Triptycenové rotory na calixarenovém skeletu

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

Molekulární rotory hrají nezastupitelnou roli v mnoha fyziologických procesech. Jedna z modelových struktur pro studium molekulárních rotorů je molekula triptycenu.

Cílem práce je nalezení obecného syntetického postupu použitelného k zavedení jedné nebo dvou triptycenových jednotek na horní okraj calix[4]arenu. Zatím nebyla publikována práce zabývající se zaváděním objemnějších aromatických struktur na horní okraj calixarenu.

Syntetický postup spočíval v přípravě organoboranových derivátů a jejich Suzukiho couplingu s příslušnými bromovanými sloučeninami. Další syntetické cesty vedoucí k zavedení triptycenové jednotky na calixaren budou zkoumány v dalším studiu.



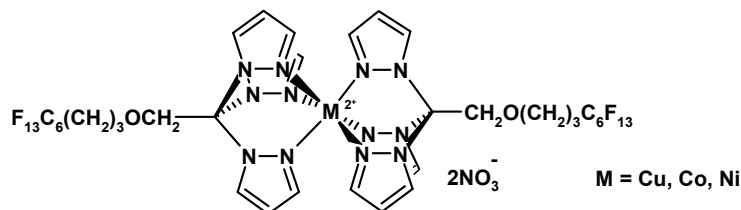
Sekce : Organická chemie M3

Fluorové tripyrazolymethany

Autor: Veronika Skalická
Ročník: M2
Ústav: Organické chemie
Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Tripyrazolymethany jsou novou skupinou ligandů komplexujících téměř všechny kationty kovů. S cílem získat nové komplexy s fluorovými vlastnostmi jsem studovala připojení polyfluoralkylovaného řetězce k centrálnímu methinovému uhlíku a do polohy 4 pyrazolových jader tripyrazolymethanu.

Při syntéze jsem vycházela z 2,2,2-tripyrázolyethan-1-olu, který jsem reakcí s allylbromidem převedla na požadovaný allylether. Dalším krokem byla radikálová adice perfluoralkyljodidů a následná redukce Bu_3SnH . Připravila jsem tak sérii [3-(perfluoralkyl)propyl](2,2,2-tripyrázol-1-ylethyl)etherů s perfluorbutylovou až perfluordodecyllovou skupinou. Na závěr jsem úspěšně syntetizovala jejich sendvičové komplexy s Cu, Co a Ni.

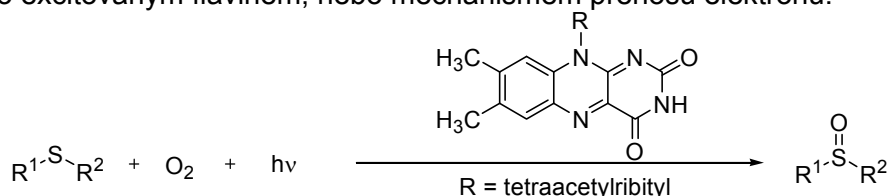


Sekce : Organická chemie M3

Fotooxidace sulfidů senzibilizovaná tetra-O-acetylriboflavinem

Autor: Jitka Daďová
Ročník: M1
Ústav: Organické chemie
Školitel: Doc. Ing. Radek Cibulka, Ph.D.

Flaviny představují fotoaktivní látky, které se účinkem viditelného světla snadno excitují. Jsou proto potenciálně využitelné jako senzibilizátory oxidačních reakcí. V naší laboratoři byla objevena selektivní fotooxidace sulfidů na sulfoxidy kyslíkem senzibilizovaná deriváty flavinů. V této práci byly zoptimalizovány podmínky fotooxidace sulfidů senzibilizované tetra-O-acetylriboflavinem s využitím zdroje monochromatického světla ($\lambda = 455 \text{ nm}$). Pozornost byla věnována zejména hledání vhodného rozpouštědla, zjištění fotostability použitého senzibilizátoru a změření kvantových výtěžků. Při studiu mechanismu fotooxidace bylo zjištěno, že v závislosti na rozpouštědle probíhá oxidace buď účinkem singletového kyslíku generovaného excitovaným flavinem, nebo mechanismem přenosu elektronu.

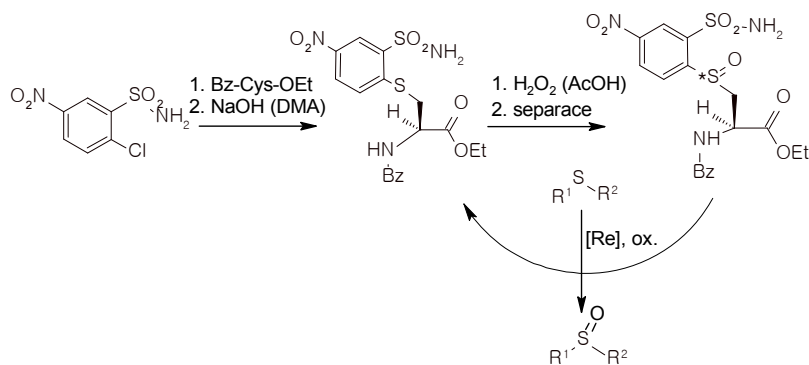


Sekce : Organická chemie M3

Syntéza a reaktivita opticky aktivních látek odvozených od cysteinu

Autor: Iva Štibingerová
Ročník: M2
Ústav: Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Školitel: Dr. Jiří Šrogl

Opticky aktivní sulfoxidy mohou být využity jako prekursory přenosu chirality. Diastereoizomer (**I**) se jeví jako vhodné činidlo pro zkoumání těchto vlastností. Kromě vlastní syntézy látky **I** byla věnována pozornost schopnosti interakce jednotlivých diastereoizomerů s katalyzátorem $[\text{Re}(\text{O})\text{Cl}(\text{hoz})_2]$; hoz = 2-(2-hydroxyfenyl)oxazol¹ a její využití při oxidačních reakcích.



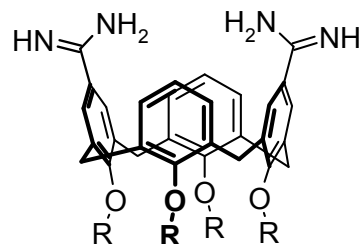
Sekce : Organická chemie M3

Příprava calix[4]arenů nesoucích amidinové skupiny

Autor: Tereza Loužilová
Ročník: M1
Ústav: Organická chemie
Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.

Calix[4]areny nesoucí amidinové skupiny jsou velmi zajímavé molekuly z pohledu supramolekulární chemie. V závislosti na konformaci použitého calix[4]arenu je možné připravit různé supramolekulární struktury v podobě kapslí či dlouhých řetězců různé struktury.

Výchozími látkami pro přípravu calix[4]arenů nesoucích amidinové skupiny byly odpovídající nitrily. Ty byly získány několikakrokovou syntézou. Dále byly zkoumány různé postupy, jak tyto nitrily převést na amidinové skupiny. Studovány byly metody přípravy amidinů z nitrilů pomocí trimethylhlíníku, přes iminoester, reakcí nitrilu s lithiem bis(trimethylsilyl)amidem a přes thioamid. Nejlepších výsledků bylo dosaženo pomocí poslední zmiňované metody



Sekce : Organická chemie M3

Syntéza nových TTF-calixarenových konjugátů

Autor: Karolína Flídrová
Ročník: M2
Ústav: Organické chemie
Školitel: Prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Tetrathiafulvalen (TTF) je významný elektrondonor, který pro své zajímavé elektrochemické chování našel široké uplatnění nejen v supramolekulární chemii. Jeho konjugáty s calixarenovým skeletem nabízejí zajímavé a dosud málo využívané možnosti uplatnění.

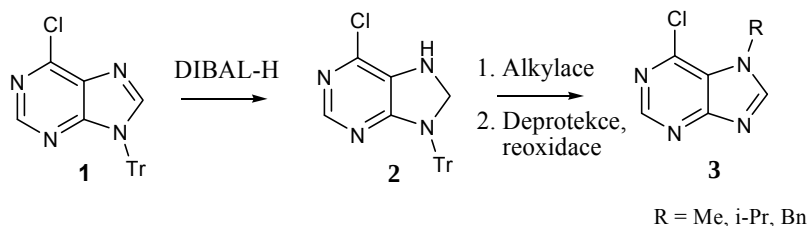
Prvním typem mnoha připravovaných derivátů jsou amidy a močovinné deriváty pro komplexaci anionů, kde tetrathiafulvalenová část molekuly plní funkci markeru pro UV/Vis spektroskopii a zejména cyklickou voltametrii. Syntéza těchto látek je analogická přípravě jiných močovinných a amidických derivátů, které byly v naší laboratoři připraveny dříve a umožňuje sledování a porovnání jejich komplexačního chování a dimerizaci méně běžnými analytickými metodami.

Druhou částí práce je příprava TTF-calixarenových konjugátů, kde TTF jednotka funguje jako aktivní místo. Elektrondonorní vlastnosti TTF předurčují pro komplexaci elektronově deficitních systémů, jako je například fullerén C₆₀. Kromě běžných derivátů TTF se pro tyto účely používají i TTF s rozšířeným π -systémem, jejichž základem může být například anthrachinonový skelet. Takové deriváty pak svým tvarem připomínají tzv. molekulární pinzety

Sekce : Organická chemie M3

Využití 7,8-dihydropurinů pro přípravu 7-substituovaných purinových derivátů

Autor: Ivana Kubíčková
Ročník: M1
Ústav: Organická chemie
Školitel: Prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.



I přes fakt, že některé 7-substituované puriny vykazují biologickou aktivitu nebyla doposud vyvinuta jejich obecná příprava.

Proto jsme se pokusili vypracovat obecnou metodu pro přípravu 7-alkylpurinů využívající selektivní redukci 6-chlorpurinu (1) pomocí DIBAL-H. Vzniklý dihydropurin (2) byl deprotonován účinkem báze NaH nebo 2,2,6,6-tetramethylpiperidinyllithia a následně alkylován reakcí s alkylhalogenidy.

Po odstranění chránicí skupiny a aromatizaci peroxidem vodíku poskytla reakce 7-alkylpuriny (3) v celkových výtěžcích 72-99 %.

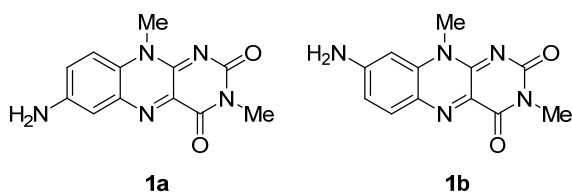
Sekce : Organická chemie M3

Příprava a studium reaktivity aminoisoalloxazinů

Autor: Jiří Šturala
Ročník: M1
Ústav: Organické chemie
Školitel: Doc. Ing. Radek Cibulka, Ph.D.

Flaviny (sloučeniny obsahující isoalloxazinové seskupení) se vyznačují schopností účastnit se redoxních a fotochemických procesů. Z tohoto důvodu flaviny představují vhodnou aktivní podjednotku pro přípravu redoxních činidel či fotoreceptorů. Při návrhu umělých katalyzátorů či receptorů na bázi flavinů by bylo účelné začlenit flavinovou jednotku do supramolekulární struktury, která by zajišťovala vazbu substrátu. Jednou z možností je začlenění flavinu do struktury Trögerových bazí (TB).

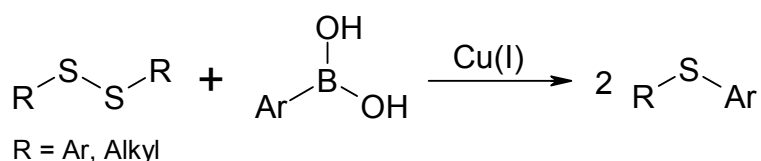
V práci byla vypracována syntéza 7- a 8-amino-3,10-dimethylisoalloxazinu (**1a,b**) jako potenciálních prekurzorů TB s flavinovou podjednotkou. Druhá část práce byla věnována studiu jejich reaktivity.



Sekce : Organická chemie M3

S-arylace disulfidů arylboronovými kyselinami za přítomnosti Cu(I)

Autor: Alena Moulisová
Ročník: M2
Ústav: Organická chemie
Školitel: Doc. Ing. Igor Linhart, CSc.



Organické sulfidy mají široké použití jako reagenty či intermediáty v organických syntézách. Cílem práce bylo studium průběhu reakcí různých typů disulfidů s arylboronovými kyselinami v přítomnosti Cu(I) solí. Byly použity aromatické i alifatické disulfidy se snahou optimalizovat reakční podmínky pro každý typ substrátu (přístup kyslíku, typ a množství Cu(I), ligand, rozpouštědlo). Zatímco arylace diaryldisulfidů probíhala úspěšně za přítomnosti vzdušného kyslíku s katalytickým množstvím Cu(I), dialkyldisulfidy vyžadovaly anaerobní podmínky a více než stechiometrické množství Cu(I).

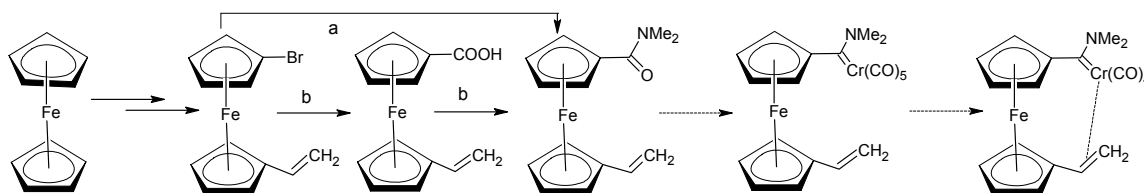
Sekce : Organická chemie B

Karbenové komplexy ferocenu

Autor: Ivana Jurásková
Ročník: B3
Ústav: Organická chemie
Školitel: Prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.

Karbenové komplexy se mohou stabilizovat chelatací s alkeny. Způsob této chelatace výrazně ovlivňuje jejich vlastnosti a reaktivitu, některé reakce jsou pak jednoznačně preferovány a jiné naopak potlačeny.

Cílem práce je příprava aminokarbenových komplexů ferocenu $[(\text{OC})_5\text{Cr} = \text{C}(\text{Fc})\text{N}(\text{CH}_3)_2]$ a $[(\text{OC})_4\text{Fe} = \text{C}(\text{Fc})\text{N}(\text{CH}_3)_2]$, kde Fc je 1-vinylferocen a jejich následná chelatace.



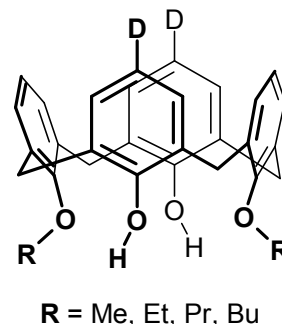
Klíčovým meziproduktem pro přípravu aminokarbenových komplexů ferocenu je 1-N,N-dimethyl-1'-vinylferocenkarboxamid. Naše syntéza tohoto meziprodktu vychází z ferocenu, který je sledem postupných reakcí převeden přes 1-brom-1'-vinylferocen na 1-N,N-dimethyl-1'-vinylferocenkarboxamid.

Sekce : Organická chemie B

Selektivní značení distálně dialkylovaných calix[4]arenů

Autor: Michaela Mačková
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Michal Himl, Ph.D.

Během NMR studií dolního okraje 25,27-dipropoxycalix[4]arenu bylo zjištěno, že tento derivát ochotně podléhá deuterální reakci s deuterium chloridem do *para* poloh aromatických jednotek s volnou -OH skupinou. Cílem práce bylo vypracování metody pro přípravu této látky v laboratorním měřítku. Dále bylo důležité zjistit na kolik je tato metoda obecná a zda jsou tyto deuterální reakce doménou pouze distálně dialkylovaných calix[4]arenů. Takto značené calix[4]areny by se daly využít pro syntézu složitějších receptorů, které by napomohly např. ke studiu mechanismů komplexačních vlastností, konformačních dějů, apod.



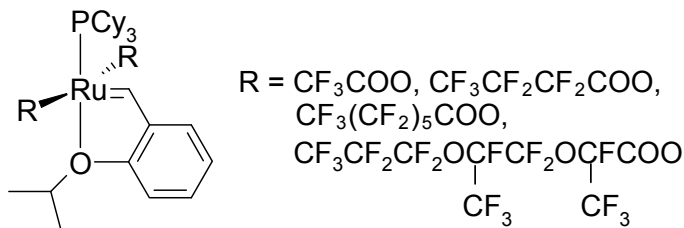
Sekce : Organická chemie B

Modifikace centrálního atomu Hoveyдова- Grubbsova katalyzátoru 1. generace perfluoralkanoáty

Autor: Jan Hošek
Ročník: B2
Ústav: Organické chemie
Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

V metatezi alkenů jsou s výhodou používány katalyzátory na bázi ruthenia (Grubbsův katalyzátor). Zavedení perfluorovaných řetězců do molekuly katalyzátoru může usnadnit recyklaci pomocí fluorových separačních technik.

Mým úkolem byla příprava Hoveyдова–Grubbsova katalyzátoru 1. generace a následná substituce chloridových aniontů vázaných na centrálním atomu ruthenia perfluoralkanoáty. Katalyzátor jsem připravil reakcí Grubbsova katalyzátoru 1. generace s 2-isopropoxystyrenem připraveným ze salicylaldehydu. Následně jsem studoval reakci tohoto katalyzátoru se stříbrnými solemi trifluoroctové, heptafluorbutanové a perfluorheptanové kyseliny.

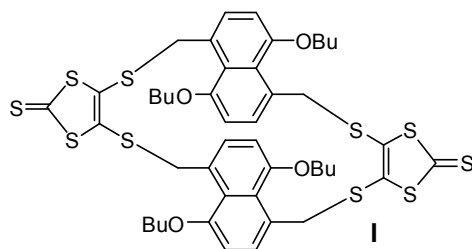


Sekce : Organická chemie B

Příprava sirných [2+2] makrocyklů

Autor: Jan Holec
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Dr. Ing. Jana Hodačová, Ing. Petr Holý, CSc. (ÚOCHB)

V rámci studia přípravy sirných makrocyklů byl připraven 1,5-bis(brommethyl)-2,6-di-butoxynaftalen jako aromatický stavební prvek a 4,5-bis(2-kyanoethylthio)-1,3-dithiol-2-thion sloužící jako spojková komponenta. Z těchto bloků byl ve dvou stupních připraven [2+2] makrocyklus. Produkt reakce (vzorec I) je směsí dvou komponent. U nich se prokázalo, že se jedná o isomery. Oba izolované isomery lze jejich zahříváním v roztoku převést na jejich směs. Proto předpokládáme, že se jedná o konformační isomery, jejichž separovatelnost je způsobena energetickou bariérou volné rotace naftalenových článků. Práce nyní pokračuje pro získání většího množství obou isomerů v čistém stavu pro potvrzení tohoto předpokladu.

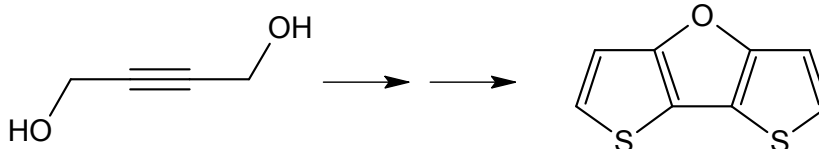


Sekce : Organická chemie B

Syntéza a vlastnosti dithienofuránu

Autor: Michal Pozník
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

Dithienothiofén a polythiofény sú známe pre svoje výborné vlastnosti v polovodičovej technike. Mojou úlohou bolo nájsť syntéznú cestu pre prípravu doposiaľ nepopísaného tricyklu, dithieno[3,2-b:2',3'-d']furánu, ktorý predpokladáme ako tiež π -elektrónovo bohatý systém by mohol mať vhodné vlastnosti pre toto použitie. Navrhli sme originálny postup, vychádzajúci z alifatického alkíndiolu. Väčšina reakčných krokov bola úspešne optimalizovaná aj napriek malej stabilite furánového cyklu. Pripravený produkt bude podrobený elektrochemickej analýze, derivatizovaný a skúmané jeho vlastnosti aj ako analógu iných konjugovaných heterocyklov.

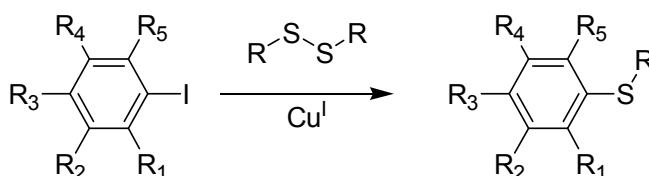


Sekce : Organická chemie B

Pár měď / askorbová kyselina jako katalytický systém pro reduktivní cross-coupling aryljodidů s disulfidy

Autor: Marek Martínek
Ročník: B3
Ústav: Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Školitel: Dr. Jiří Šrogl

Organické disulfidy jsou jedním ze základních kamenů organické chemie. Cílem práce je podrobná studie jejich reaktivity v reduktivní cross-couplingové reakci s organickými halogenidy katalyzované měďnými solemi. 3-Methylsalicylát měďný, který se ukázal jako nejvhodnější katalyzátor, je udržován v aktivním stavu pomocí L-askorbátu sodného. Nejlepší konverze bylo dosaženo za použití vody jako rozpouštědla a přítomnosti katalyzátorů fázového přenosu. V této práci byla studována obecnost reakce vzhledem k použitým výchozím látkám.



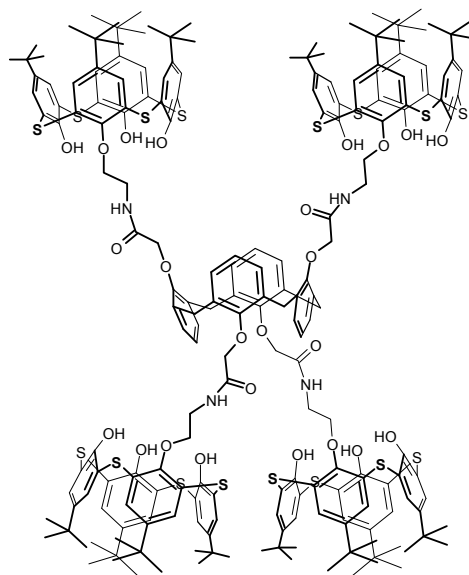
Sekce : Organická chemie B

Design a syntéza dendritických struktur na bázi calixarenových derivátů

Autor: Jan Holub
Ročník: B3
Ústav: Organická chemie
Školitel: Prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Dendrimery a jiné vysoce větvené sloučeniny vzbuzují v poslední době stále větší pozornost pro své jedinečné vlastnosti. Calixareny, které nabízejí pestrou paletu možností pro derivatizaci jak spodního tak horního okraje jejich skeletu, jsou velmi perspektivní skupinou látek vhodných pro syntézu těchto větvených sloučenin.

Práce je zaměřena na přípravu "tail to tail" spojených oligocalix[4]arenů. Jako výchozích sloučenin bylo použito jak klasických calix[4]arenů tak thiacalix[4]arenů v jejich kónické a 1,3-alternátní konformaci. Tyto látky byly připraveny s ohledem na jejich další využití v oblasti extrakcí kovů vzácných zemin.



Sekce : Organická chemie B

Syntéza porfyrinového triangliminu

Autor: Petr Juřík
Ročník: B3
Ústav: Organická chemie
Školitel: Dr. Ing. Jana Hodačová

Velké makrocyclické Schiffovy báze trojúhelníkového tvaru (tzv. triangliminy) vznikají s vysokými výtěžky při kondenzaci opticky aktivního trans-cyklohexan-1,2-diaminu s aromatickými dialdehydy tyčinkového tvaru. Cílem naší práce je příprava triangliminu, který obsahuje v molekule tři porfyrinové jednotky. U cílového porfyrinového triangliminu očekáváme zajímavé fotochemické a elektrochemické vlastnosti.

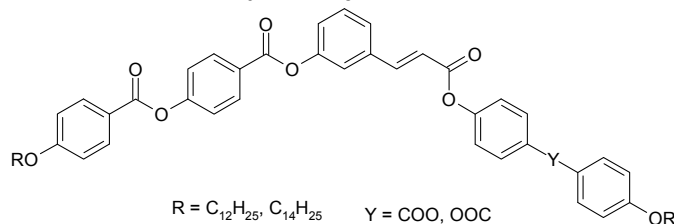
Jako vhodný reaktant jsme zvolili porfyrin s plně obsazenými meso-pozicemi, 5,15-difenyl-10,20-di(4-formylfenyl)porfyrin. Pro jeho syntézu vycházíme z 5,15-difenylporfyrinu, jehož vznik probíhá s poměrně nízkými výtěžky. Následné meziprodukty získáváme téměř kvantitativně, problémem je separace produktu od nezreagovaného porfyrinu. Jako alternativní metodu zkoušíme použití metaloporfyrinu.

Sekce : Organická chemie B

Syntéza a vlastnosti nových lomených kapalných krystalů

Autor: Jiří Tůma
Ročník: B2
Ústav: Organická chemie
Školitel: Ing. Michal Kohout, Ph.D.

Kapalné krystaly našly široké uplatnění v zobrazovací technice, např. v LCD monitorech. V posledních letech jsou předmětem intenzivního zájmu tzv. lomené kapalné krystaly. V návaznosti na naše předchozí výsledky jsme navrhli pro konstrukci nových materiálů nové centrální jádro na bázi 3-hydroxyskořicové kyseliny. Jako nové modelové sloučeniny byly připraveny lomené krystaly s tímto centrálním jádrem, které bylo substituováno dvěma prodlužujícími rameny se dvěma esterovými spojkami a terminálním alifatickým řetězcem.



Fyzikální vlastnosti látky byly studovány pomocí optické polarizační mikroskopie a diferenciální skenovací kalorimetrie. Bylo zjištěno, že změna struktury značně ovlivňuje mesomorfní chování

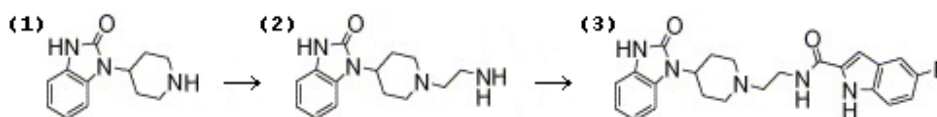
Sekce : Organická chemie B

Optimalizace syntézy deschlorhalopemidu

Autor: Anna Šuláková
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Doc. Ing. Igor Linhart, CSc.

V rámci spolupráce s Ústavem experimentální botaniky AV ČR je optimalizována syntéza N-[2-[4-(2,3-dihydro-2-oxo-1H-benzimidazol-1-yl)-1-piperidinyl]ethyl]-5-fluorindolkarboxamidu (deschlorhalopemidu). Tato látka inhibuje fosfolipázu D2, a proto bude testována jako potenciální inhibitor růstu pylové láčky rostlin.

Cílem práce bylo nalézt vhodné podmínky umožňující reprodukci třístupňové syntézy deschlorhalopemidu, která byla popsána v literatuře.



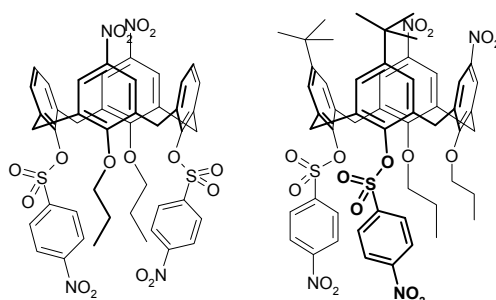
Syntéza vycházela z komerčně dostupného 4-(2-oxobenzimidazolin-1-yl)piperidinu (1). Jeho N-alkylací N-Boc-2-bromethylaminem a následným odstraněním chránicí skupiny byl připraven meziprodukt (2). Tento amin byl N-acylován kyselinou 5-fluorindol-2-karboxylovou. Takto vzniklý finální produkt, deschlorhalopemid (3), byl přečištěn sloupcovou chromatografií a krystalizací ze směsi rozpouštědel. Vzorek krystalického produktu byl identifikován pomocí $^1\text{H-NMR}$ a hmotnostní spektrometrie.

Sekce : Organická chemie B

Nová regioselektivní substituce horního okraje calix[4]arenu

Autor: Oldřich Hudeček
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Doc. Ing. Jan Budka, Ph.D.

Zavedením vhodné acylové skupiny na spodní okraj calixarenového skeletu lze cíleně deaktivovat tato jádra vůči další substituci na horním okraji. Této vlastnosti lze využít pro následnou (*ipso*)substituci diacyloxy-dialkoxy (distálního/ proximálního) derivátu, kdy dochází k regioselektivní derivatizaci horního okraje, a to ve vysokých výtěžcích. Odstraněním chránicí skupiny lze připravit zajímavé prekurzory k dalším, jinak velmi obtížně připravitelným derivátům v konické a částečně konické konformaci. Další derivatizace těchto látek by mohla být cestou k přípravě nových receptorů aniontů, případně iontových párů.



Sekce : Organická technologie

Vliv hydrodeoxygenačních meziproduktů na produkci olefinů

Autor: Jan Horáček
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. David Kubička, Ph. D. (VÚAnCh), Prof. Ing. Zdeněk Bělohav, CSc.

Práce je zaměřena na porovnání produkce uhlovodíků při hydrorafinačním zpracování vybraných rostlinných olejů jako možných obnovitelných surovinových zdrojů pro ethylenovou pyrolýzu. Hydrorafinační pokus byl proveden na komerčním NiW/Al₂O₃ sulfidickém katalyzátoru při teplotách 310 a 340 °C a tlaku vodíku 10 MPa. V případě průmyslové aplikace by pravděpodobně docházelo i k pyrolýze produktů, které obsahují kyslíkaté meziprodukty hydrorafinace. Druhým cílem je proto pyrolýza hydrorafinátů s neúplnou konverzí na uhlovodíky, při které je sledována produkce olefinů v závislosti na typu a množství obsažených kyslíkatých látek. Tepelným rozkladem všech hydrorafinátů byl získán vysoký výtěžek ethylenu přesahující 35 hm.%. Pro srovnání byla pyrolýzována i kyselina olejová. Při pokusech byly pozorovány odlišnosti ve výtěžku lehkých olefinů v závislosti na typu převažujících deoxygenačních meziproduktů (karboxylové kyseliny, mastné alkoholy, estery karboxylových kyselin a mastných alkoholů).

Sekce: Organická technologie

Syntéza Madranolu

Autor: Martin Káčerik
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Eliška Leitmannová, Ph.D.

Cieľom tejto práce bolo spracovanie výrobného postupu vonnej látky 1-(2,2,6-trimethylcyklohexyl)-3-pentanolu, komerčným názvom Madranol. Madranol vzniká hydrogenáciou troch dvojítých väzieb lraldeinu (zmesi izomérov metyljonónov).

Pri hydrogenácii môžu vznikať dva izoméry produktu, z ktorých je *trans*-izomér žiadanejší pre svoje výraznejšie senzorické vlastnosti.

Vývoju tejto technológie predchádzala literárna rešerše, získané poznatky boli experimentálne overené v laboratórnom merítku a ďalej boli testované ďalšie, v priemysle častejšie používané katalyzátory a modifikátory. Optimalizácia syntézy bola zameraná na zvýšenie obsahu práve *trans*-izoméru. Bol sledovaný vplyv katalyzátoru, modifikátoru, teploty a pracovného tlaku na zloženie produktu. Výsledky práce slúžia ako podklad pre zavedenie technológie do výroby v a. s. Aroma – Židovice.

Sekce : Organická technologie

Samodispergující částice

Autor: Pavel Krystyník
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Ladislav Kurc, CSc.

Cílem práce je prověřit v laboratorním měřítku možnost výroby samodispergujících pevných částic. Jsou tvořeny směsí cukru a pomocné látky a obsahují bublinky stlačeného CO₂. Pomocné látky tvořily trihydrát octanu sodného, močovina a bezvodý chlorid vápenatý v různých kombinacích a procentuelním složení, jejichž hlavní funkcí je snížení teploty tání cukru.

Ve skleněné aparatuře byly zjištěny klíčové vlastnosti směsí – vliv pomocné látky na teplotu tavení, relativní viskozita směsi a teplota karamelizace. Jako nejvhodnější směsi pro ověření přípravy ve vysokotlakém zařízení se jevily směsi cukru s močovinou v hmotnostním poměru 80:20 a octanem sodným v poměru 70:30. Experimenty v tlakovém zařízení probíhaly při teplotách 100-135 °C a tlaku 5,51 MPa. Směs byla sycena oxidem uhličitým, který se v tavenině dispergoval. U směsi s octanem sodným bylo problematické odvádění vody z reaktoru, u směsi s močovinou docházelo k tepelnému rozkladu močoviny při teplotách kolem 130 °C a vzniku amoniaku. Samodispergující materiál se připravit nepodařilo, je potřeba optimalizovat tlak CO₂, koncentraci močoviny ve směsi a další procesní parametry.

Sekce : Organická technologie

Testování Raney Ni katalyzátorů

Autor: Ondřej Kubásek
Ročník: B3
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Eliška Leitmannová, Ph.D., Ing. Iva Paterová, Ph.D.

Cílem této práce je studium redukčních schopností jednotlivých katalyzátorů na bázi Raney Ni ve spolupráci s německou firmou Süd-Chemie AG. Byly testovány katalyzátory firem Catalloy, Evonik Degussa, Davison, Jonson Mathey. Aktivita katalyzátorů byla vyjádřena jako rychlost hydrogenace dvojnásobné vazby C=C nebo C=O. Použitými substráty byly methystyren, acetofenon, cyklohexen a cinnamaldehyd. Volba těchto jednoduchých modelových reakcí umožňovala snadné porovnání vlastností jednotlivých katalyzátorů. Reakce byly prováděny v autoklávu obvykle za laboratorní teploty nebo při 80 °C a tlaku 5 MPa. Rozpouštědlem byl isopropylalkohol.

Pokračováním práce bude testování aktivity a selektivity těchto katalyzátorů při hydrogenaci dalšího substrátu 2,2-dimethyl-3-hydroxypropionaldehydu.

Sekce: Organická technologie

Využití mikrovlnného záření při syntéze chemických specialit

Autor: Roman Pikna
Ročník: B3
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Eliška Leitmannová, Ph.D., Ing. Iva Paterová, Ph.D.

Mikrovlnné záření (MW) se při syntéze chemických látek a specialit začalo používat zhruba od roku 1980 a od té doby se jeho význam stále zvyšuje. Hlavní výhodou využití MW bývá urychlení reakcí, v některých případech jejich realizace bez použití katalyzátoru. Byly pozorovány a v literatuře popsány výrazné rozdíly v průběhu různých typů reakcí za účasti mikrovlnného záření v porovnání s jinými technikami ohřevu.

Cílem práce je příprava methyl-(2-methyl-1,3-dioxolan-2-yl)-acetátu ketalizací methyl-acetoacetátu ethylenglykolem s využitím MW a následné porovnání průběhu reakce z hlediska reakční doby, přebytku ethylenglykolu a množství kyselého katalyzátoru. Další práce bude, na základě získaných poznatků, zaměřena na optimalizaci jiných typů reakcí.

Sekce : Organická technologie

Vývoj technologických procesů založených na redukci kyseliny jablečné

Autor: Jan Přech
Ročník: B3
Ústav: Organické technologie
Školitel: Doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Předkládaná práce pojednává o vývoji syntetických postupů 1,2,4-butantriolu a α -hydroxy- γ -butyrolaktonu jakožto významných prekursorů pro farmacii. V současné době existuje celá řada technologických postupů přípravy obou farmaceutických prekursorů, které vykazují nízké výtěžky, vysoké výrobní náklady a často nutnost vysoce specializovaných výrobních zařízení. Alternativní cestou mohou být postupy vycházející z kyseliny jablečné a jejích derivátů, zvláště s ohledem na ekonomiku procesu.

Byla testována hydrogenace kyseliny jablečné a dimethylmalátu na katalyzátorech na bázi mědi a ruthenia, a také redukce zmíněných látek pomocí komplexních hydridů. Byla provedena optimalizace reakčních podmínek, stejně jako vypracovány postupy analytické kontroly kvality. Výsledkem práce je technologický postup přípravy 1,2,4-butantriolu využívající redukce NaBH_4 , a postup přípravy α -hydroxy- γ -butyrolaktonu využívající katalytickou hydrogenaci. Postup pro přípravu 1,2,4-butantriolu je v současné době testován v provozním měřítku a postup pro přípravu α -hydroxy- γ -butyrolaktonu je připraven na poloprovozní zkoušku.

Sekce: Organická technologie

Heterogenní katalyzátor pro přípravu benzylidenacetonu

Autor: Petr Svačina
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Eliška Leitmannová, Ph.D., Ing. Iva Paterová, Ph.D.

Benzylidenaceton je vonná látka používaná v parfumářském a v malých koncentracích též v potravinářském průmyslu. Obvyklým způsobem výroby této látky je aldolová kondenzace benzaldehydu s acetonem. Cílem práce bylo nalézt vhodný heterogenní katalyzátor pro zmíněnou reakci, který by mohl nahradit dnes běžně používaný roztok hydroxidu.

V průběhu práce byla testována řada katalyzátorů na bázi iontoměničů, z nichž nejlepších výsledků bylo dosaženo se směsným ionexem Amberlite MB-150. Tento katalyzátor vykazoval vysokou selektivitu a provedená série pokusů, při níž byl katalyzátor recyklován potvrdila též možnost jeho opakovaného použití.

Vzhledem k nižší rychlosti reakce, které bylo s použitím zmíněného katalyzátoru dosaženo, v porovnání s roztokem NaOH, byly testovány další typy katalyzátorů. Pozornost byla ve druhé fázi práce zaměřena zejména na katalyzátory na bázi hydrotalcitů, jejichž potenciál pro katalýzu nejrozličnějších reakcí včetně aldolových kondenzací je v posledních letech intenzivně studován.

Sekce : Organická technologie

Odbourávání polybromovaných difenyl etherů

Autor: Martin Veselý
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Vladimír Jiříčný, CSc.

Polybromované difenyl ethery (PBDE) jsou látky, které jsou v nynější době hojně používány jako retardanty hoření, zejména u polymerních materiálů. Mají totiž pro toto použití ideální vlastnost, a to, že se začínají rozkládat při teplotě o cca 50 °C nižší, než je teplota vznícení dané matrice. PBDE jsou ale i významným kontaminantem životního prostředí. Jde o lipofilní, potenciálně karcinogenní a neurotoxické látky, které se kumulují v životním prostředí a potravinovým řetězcem se mohou dostat až do lidského organismu.

Tato práce byla zaměřena na použití publikovaných experimentálních dat získaných degradací PBDE ve fotochemickém reaktoru při katalýze pomocí TiO₂ pro nalezení možného mechanismu odbourávání PBDE.

Sekce: Syntéza a výroba léčiv I

Imobilizace alkylamonium nitrátů na pevné nosiče

Autor: Lucie Abelová
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Ivana Luštická, Ing. Eliška Leitmannová, Ph.D.

Alkylamonium nitráty jsou látky, které je možné použít jako katalyzátory při transformaci β -pinenoxidu na perillový alkohol. Lze je připravit reakcí alkylaminu s kyselinou dusičnou. Cílem této práce je imobilizace alkylamonium nitrátů na pevné nosiče a následné použití imobilizovaných katalyzátorů ke štěpení β -pinenoxidu.

Alkylamonium nitráty byly imobilizovány na hydrotalcitové nosiče (LDH) a na mesoporézní molekulová síta (SBA-15) při různých teplotách. Jako rozpouštědla byla použita voda a ethanol. Průběh imobilizace byl sledován v určitých časových intervalech pomocí UV/VIS spektrometrie. V následujících experimentech budou testovány další typy nosičů, např. MCM-41, silika, aj., a jejich modifikace. Následně bude sledován vliv různých alkylamonium nitrátů a nosičů na transformaci β -pinenoxidu na perillový alkohol.

Sekce: Syntéza a výroba léčiv I

Vliv bazicity na mechanismus stereoselektivní hydrogenace C=N vazby na katalyzátorech Noyoriho typu

Autor: Jan Bednář
Ročník: B3
Ústav: Organické technologie
Školitel: Doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Práce je orientována do oblasti asymetrické hydrogenace C=N dvojné vazby přítomné ve strukturním skeletu substituovaných 3,4-dihydroisochinolinů na homogenních Ru(II) katalytických komplexech „Noyoriho“ typu. Hlavní pozornost je v předkládané studii věnována vlivu bazicity substituovaných 3,4-dihydroisochinolinů na průběh asymetrické hydrogenace probíhající za podmínek přenosu vodíku, stejně tak jako popisu mechanismu asymetrické hydrogenace na výše uvedeném katalytickém systému s ohledem na vliv přítomné báze v donoru vodíku, kterým je komplex HCOOH : báze. K dosažení tohoto cíle bylo využíváno jak studium na úrovni kinetické, tak na úrovni teoretických výpočtů na bázi molekulárního modelování. Posouzení vlivu bazicity systému (1) bazicita modelových 3,4-dihydroisochinolinů, (2) vliv báze v donoru vodíku, na průběh vlastní hydrogenační reakce bylo vyhodnocováno na základě parametrů rychlosti reakce a její enantioselektivity. Tato data byla komparována s výsledky molekulárního modelování jako délka a polarita C=N vazby. Získané výsledky doplňují zcela originálním způsobem teorii týkající se mechanismu asymetrické hydrogenace na Ru(II) katalytických komplexech „Noyoriho“ typu.

Sekce: Syntéza a výroba léčiv I

Degradační stabilitní studie pikoplatiny, cytostatika 4. generace

Autor: Michaela Hrdá
Ročník: B3
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Jitka Housková, Doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Předkládaná práce je orientována do oblasti platinových komplexů s nestejnými aminoligandy, které vykazují cytostatické účinky na lidském organismu a jsou řazeny mezi novou tzv. čtvrtou generaci platinových cytostatik. Velice nadějnou sloučeninou z hlediska jejího terapeutického využití, je komplex $\text{cis-[Pt(NH}_3\text{)(2-methylpyridin)Cl}_2\text{]}$, označovaný jako pikoplatina. Cílem vlastní experimentální činnosti bylo vyvinutí analytické metody stanovení pikoplatiny a jejích degradačních produktů, stejně jako provedení degradační stabilitní studie. Vyvinutá analytická metoda je založena na vysokoúčinné kapalinové chromatografii s UV/Vis detekcí, přičemž vlastní separace je realizována na chromatografické koloně s iontoměničovou stacionární fází. Metoda byla validována a byly stanoveny základní validační parametry. Následně byla pozornost věnována standardním stresovým stabilitním zkouškám s cílem stanovit základní vlastnosti tohoto komplexu za extrémních podmínek skladování. Během degradační studie byly vzorky poloprovozní (PLP) šarže vystaveny vlivu tepla, vlhkosti a předepsaného zdroje záření, dále byl sledován vliv kyselých, alkalických a oxidačních podmínek. Součástí práce byla i charakterizace PLP šarže dalšími analytickými metodami (XRD, IR, TGA, NMR).

Sekce: Syntéza a výroba léčiv I

Příprava p-meth-1-en-7,8-diolu

Autor: Eva Krupková
Ročník: B3
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Eliška Leitmannová, PhD., Ing. Iva Paterová, Ph.D.

Tato práce tématicky navazuje na sérii prací zabývajících se vypracováním technologie výroby Mayolu, který patří mezi velmi žádané vonné látky. Cílem práce je příprava p-meth-1-en-7,8-diolu, který může rovněž najít uplatnění jako vonná silice v parfumářském průmyslu. P-meth-1-en-7,8-diol je připravován adicí vody na komerčně snadno dostupný β -pinenoxid. Hlavní náplní práce bylo sledování vlivu různých reakčních podmínek na průběh hydratace. Sledovanými parametry byla reakční teplota, intenzita míchání, byl optimalizován poměr množství vody, popř. ledu a β -pinenoxidu.

Dále bude studován vliv přítomnosti fázového rozhraní, tj. srovnání rychlosti reakce ve dvoufázovém a jednofázovém systému. Jednofázový systém bude tvořen přítomností rozpouštědla (např. N,N-dimethylformamid).

Sekce: Syntéza a výroba léčiv I

Homogenizace sypkých směsí farmaceuticky účinných látek

Autor: Pavlína Kyselá
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Prof. Ing. Zdeněk Bělohav, CSc.

Homogenizace patří mezi základní procesy při zpracování sypkých směsí ve farmaceutickém průmyslu. Její úlohou je zajistit deklarované množství účinné látky v každé vyrobené tabletě. Byla studována homogenizace sypké směsi dvou účinných látek. Celkem byly provedeny tři experimenty. Každý experiment obsahoval granulovaný paracetamol (80 hm. %) a kofein (10 hm. %), použitý ve třech různých formách - granule, brikety a prášek. Zbylých 10 hm. % tvořila mikrokrytalická celulóza. Vzorky byly odebrány z pěti horizontálních vrstev vsádky homogenizátoru se stejnou vertikální hustotou bodů, čímž bylo zajištěno zmapování celé homogenizační nádoby. Ve všech případech byla doba homogenizace nastavena na 120 min. Vzorky byly analyzovány vysokotlakou kapalinovou chromatografií. Cílem práce bylo sledování případných segregačních vlivů působících na výslednou homogenitu směsi po dlouhé době mísení. Nejlepší vlastnosti vykazovala směs granulovaného paracetamolu s práškovým kofeinem, zatímco nejhůře se jevila směs granulovaného paracetamolu s briketovaným kofeinem.

Sekce: Syntéza a výroba léčiv I

Vliv velikosti částic na homogenizaci sypkých směsí pro výrobu tablet

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

Cílem práce bylo objasnit vliv velikosti částic briketovaného a granulovaného kofeinu a paracetamového granulátu na průběh jejich mísení paracetamolu s kofeinem. Jednotlivé komponenty byly rozděleny do frakcí síťováním a síťovou analýzou byla zjišťována i distribuce velikosti částic. S frakcemi byly provedeny homogenizační experimenty v laboratorním homogenizátoru o objemu 0,8l. Homogenita byla charakterizována směrodatnou odchylkou obsahů složek v odebraných vzorcích stanovených HPLC. Výsledky ukázaly, že distribuce velikosti částic má výrazný vliv na homogenizaci. Lepších homogenit bylo dosaženo při nižší velikosti částic klíčové složky. Síťová analýza produktu ukázala, že při mísení docházelo k částečné tvorbě agregátů a k částečnému rozmělnění granulí otěrem. Vzniklé prachové podíly se podílely na tvorbě částečně uspořádané směsi, která byla zachycena na snímcích pořízených skenovací elektronovou mikroskopií.

Sekce: Syntéza a výroba léčiv I

Vývoj metody pro multimarkerový screening tělních tekutin pro diagnostiku oxidativního stresu

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

Cílem práce bylo vyvinout metodu pro stanovení specifických látek - tzv. biomarkerů - které vznikají při oxidativním poškození buňky reaktivními kyslíkovými částicemi (ROS). 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-hydroxyguanosin, 8-hydroxyguanin a 8-hydroxy-2'-deoxyguanosin (poškození nukleových kyselin), o-tyrosin (poškození bílkovin), 8-iso prostaglandin $F_{2\alpha}$, malondialdehyd a 4-hydroxynonenal (poškození lipidů). Stanovení jejich koncentračních hladin může sloužit jako prostředek medicínské diagnostiky k potvrzení řady onemocnění (např. rakovina plic, azbestóza, silikóza ad.). Vyvinutá analytická metoda kombinuje separaci analytů z biologické matrice (tělní tekutiny) s citlivou a selektivní detekční metodou na bázi hmotnostní spektrometrie. Zvalidovaná metoda pro kvalitativní a kvantitativní stanovení biomarkerů v tělních tekutinách byla testována v klinické studii, která měla ověřit vhodnost vyvinuté metody pro klinickou praxi.

Sekce: Syntéza a výroba léčiv I

Syntéza a vývoj nového psychofarmaka- pregnanolonu glutamátu

Autor: Lukáš Rambousek
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D., RNDr. Karel Valeš Ph.D.

Předkládaná práce se zabývá syntézou a výzkumem vlastností syntetického steroidu na bázi derivátu pregnanolonu substituovaného v poloze 3alfa ($3\alpha 5\beta$ PG). Tato látka je patentována a registrována v databázi EMEA jako nová látka s potenciálním terapeutickým účinkem. První fáze vývoje byla orientována do oblasti syntézy této látky a výběru optimální lead-structure. Druhá fáze studie testovala efekt $3\alpha 5\beta$ PG v preklinickém hodnocení na intaktních potkanech a v animálních modelech neuropsychiatrických poruch. Třetí fáze studie je zaměřena na vývoj analytické metody, která umožňuje kvantifikovat hladiny $3\alpha 5\beta$ PG v mozku, ledvinách, játrech, srdci a plicích. S tím souvisí syntéza deuterovaného derivátu a vývoj metody pro mikroextrakci této látky z mozku. Analytické stanovení steroidních molekul z biologických matric v nízkých koncentracích ($<1\text{ng/ml}$) představuje v současné době analytický problém. Kombinace vysoce selektivní a senzitivní metody HPLC-MS/MS, deuterium značeného vnitřního standardu a vhodné extrakční metody představuje dostatečně citlivou cestu pro kvantifikaci $3\alpha 5\beta$ PG z výše uvedených tkání. Tato metoda bude aplikována ve farmakokinetických a toxikologických studiích $3\alpha 5\beta$ PG. Naměřená data budou představovat kritickou informaci při dalším rozhodování o postupu této látky k léčivu.

Sekce: Syntéza a výroba léčiv I

Příprava magnetických nanočástic pro separaci biomarkerů z tělních tekutin

Autor: Kateřina Šimková
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Kamila Syslová, 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 kombinuje vysoce specifickou separaci biomarkerů alergických reakcí – cysteinylovaných leukotrienů (LTC₄, LTD₄ a LTE₄) - založenou na reakci 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 na bázi hmotnostní spektrometrie. Vyvinutá metoda je charakterizovatelná vysokou citlivostí, nízkou chybou stanovení (<9%) a možností vícenásobného použití připravené molekulární sondy. V neposlední řadě v sobě zahrnuje i možnost vývoje biočipu pro automatické, rychlé a na obsluhu nenáročné řešení uvedeného diagnostického principu pro molekulární profil a multimarkerový screening tělních tekutin.

Sekce: Syntéza a výroba léčiv I

Aquatace ammin-tri(chlorido)platnatanu draselného

Autor: Eliška Žížková
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Prof. Ing. Libor Červený, DrSc.

Platinová cytostatika patří mezi významná léčiva nádorových onemocnění, která jsou druhou nejčastější příčinou úmrtí naší populace. Prekurzorem pro přípravu cytostatik na bázi platiny může být ammin-tri(chlorido)platnatan draselný, K[Pt(NH₃)Cl₃]. Tato práce byla zaměřena na studium aquatace K[Pt(NH₃)Cl₃]. Jedná se o následnou reakci při syntéze K[Pt(NH₃)Cl₃], kdy produkt aquatace, [Pt(NH₃)(H₂O)Cl₂], velmi rychle reaguje s molekulou amoniaku za vzniku nežádoucího biologicky aktivního *cis*-[Pt(NH₃)₂Cl₂].

Byl sledován průběh aquatace K[Pt(NH₃)Cl₃] za různých reakčních podmínek, jako jsou změna teploty, změna pH reakční směsi, přítomnost denního světla a přítomnost chloridových iontů. Reakce probíhaly ve skleněném vsádkovém reaktoru a odebírané vzorky byly analyzovány HPLC analytickou metodou s UV/Vis detekcí. Následně byl v programu ERA navržen kinetický model reakce.

Bylo zjištěno, že hlavním produktem reakce není zmíněný monoaquakomplex, ale di- příp. triaquakomplexy. Přesné složení nebylo možné danou analytickou metodou identifikovat. Obě pozorované reakce nejsou tepelně zabarvené a je možné je potlačit nízkou teplotou, přidávkem Cl⁻ iontů, nízkým pH (< 7) a zamezením přístupu denního světla.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv II

Selektivní acetylace v nové variantě přípravy COREYALKOHOLU-A

Autor: Martin Bobek
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

COREYALKOHOL-A je důležitým meziproduktem v syntéze prostaglandinů a prostaglandinových analogů. Tyto látky jsou součástí všech zánětlivých i hormonálně řízených procesů v těle a jejich využití ve farmaceutickém průmyslu zahrnuje mnoho indikačních skupin. Ekonomické zlepšení výrobních možností COREYALKOHOLU-A jako klíčového meziproduktu je jedním z cílů dalšího výzkumu firmy Cayman Pharma s.r.o. (CP). Řešením může být efektivní napojení alternativní cesty syntézy COREYALKOHOLU-A konkurenční firmy, na současnou syntézu CP ve stupni GAMALAKTONU-A. Toto napojení závisí na úspěšné selektivní acetylaci COREYDIOLU-A na zmíněný GAMALAKTON-A. Při acetylaci výchozího diolu vznikají nežádoucí produkty ve formě sekundárního acetátu a diacetátu. Cílem je dosáhnout co nejvyšší selektivity na žádaný primární acetát, tzv. GAMALAKTON-A. Pro optimalizaci tohoto kroku byla navržena řada katalyzátorů a reakčních systémů, které jsou v současné době testovány a kinetika reakce analyzována pomocí GC.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv II

Modelování disoluce rozpadavých tablet

Autor: Jana Ettelová
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Doc. Ing. Petr Zámstný, Ph.D.

Cílem práce bylo vytvořit matematický model disoluce léčivé látky z rozpadavé lékové formy. Rychlost uvolňování účinné látky z léčiva se stanovuje zkouškou disoluce, která se dle lékopisu používá k hodnocení jakosti léčivých přípravků při výstupní kontrole. Stanovení disolučního profilu hraje také důležitou roli při formulaci nového léčiva, při níž by bylo možné využít model disoluce.

Disoluční profily byly stanoveny pro různé velikostní třídy modelové látky - granulátu paracetamolu, jenž simuluje dezintegrovanou lékovou formu. Všechny experimenty byly provedeny na přístroji Sotax AT7 pádelkovou metodou za stejných hydrodynamických podmínek.

Výpočet disoluční rychlosti v modelu vychází z kombinačního modelu popsaného v literatuře, jenž je založen na konvekčně-difuzní teorii, kterou je možné použít pro špatně rozpustné aktivní substance, a jenž je vhodný pro popis disoluce v hydrodynamickém systému, kde se rozpuštěné částice pohybují uvnitř disolučního média. Stanovení parametrů modelu bylo provedeno regresním zpracováním experimentálních dat.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv II

Studie vlivu přídatku aminů na efektivnost VPHP dekontaminačního procesu

Autor: Bc. Petra Hušková
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Jiří Švrček, Prof. Ing. Libor Červený, DrSc.

Tato práce svým obsahem spadá do oblasti chemické dekontaminace využívající jako účinné činidlo páry peroxidu vodíku (VPHP = Vapor Phase Hydrogen Peroxide). V současné době je většina aplikací VPHP zaměřena na bio-dekontaminaci prostorů a povrchů ve farmaceutickém, potravinářském, aj. prostředí. Hlavními nevýhodami jsou požadavky na koncentraci a dobu expozice potřebnou pro detoxifikaci chemických kontaminantů v atmosféře par peroxidu vodíku. Prostým přidavkem bazických těkavých látek do této atmosféry, lze však významně zvýšit efektivitu tohoto činidla. Z tohoto důvodu bylo hlavním cílem této práce podrobně prozkoumat vlastnosti a faktory ovlivňující účinnost tohoto směsného dekontaminačního činidla (VPHP + primární, sekundární, terciární aminy) k degradaci zvolených modelových substancí - derivátů benzaldehydu. Z experimentálních dat jasně vyplývá, že degradace benzaldehydových derivátů probíhá mnohem rychleji v případě užití kombinace par peroxidu vodíku s bazickou látkou (aminem), než v případě užití samotného VPHP a rychlost degradace modelových substancí je ovlivněna jednak množstvím, ale také typem přidané bazické látky. Poznatky získané z těchto experimentů by měly být využity k navržení optimálního dekontaminačního činidla, které by mělo být následně aplikováno na degradaci strukturně složitějších farmaceutických substancí.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv II

Vliv technologie výroby na segregační chování tabletoviny

Autor: Bc. Alena Jakoubí
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Doc. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.

Při výrobě tablet přímým lisováním je základní operací homogenizace tabletoviny, která má za cíl dosáhnout rovnoměrného rozložení koncentrací všech složek směsi. Homogenizace je doprovázena opačným nežádoucím dějem – segregací, při kterém se v loži práškové hmoty vytváří koncentrační gradienty, což snižuje rychlost homogenizace i limitní homogenitu směsi. Experimenty byly zaměřeny na dominantní mechanismus segregace zvaný fluidace. K fluidaci dochází, jestliže přesypáme jemnější částice spolu s hrubšími. Hrubší částice jsou tlačeny do lože, zatímco jemné se vznášejí směrem k povrchu a dochází k segregaci ve vertikálním směru. Segregační chování tabletoviny bylo experimentálně stanoveno pomocí fluidačních testů, při kterých dochází ke vzniku dočasné fluidní vrstvy. Testy obecně vyhodnocují, zda a v jaké míře má sypká hmota tendenci vytvářet koncentrační gradienty stanovovaných látek. K experimentu byly použity dvě tříložkové tabletoviny se stejnými poměry účinných látek, ale odlišnou technologií výroby a složením pomocných látek.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv II

Optimalizácia rozloženia meracích jednotiek v skladovacích priestoroch farmaceutických produktov na základe teplotnej analýzy vytvorenej pomocou termovízie

Autor: Juraj Kořínek
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: prof. Ing. Zdeněk Bělohlav, CSc., Ing. Jaromír Šolc (Zentiva)

Kontrola skladovacích podmienok farmaceutických produktov podlieha predpisom Správnej skladovacej a distribučnej praxe (Good Storage and Distribution Practices GS & DP) a predpisuje ju aj Český lékopis. Teplota predstavuje veličinu, ktorá značne ovplyvňuje skladovacie podmienky farmaceutických produktov.

Kontrolu a monitoring teploty zabezpečujú bodové teplotné snímače, ktoré sú rozmiestnené v skladovacom priestore. Ich nevýhodou je bodové meranie (teplota meraná v blízkom okolí snímača) a rozmiestnenie týchto snímačov na základe expertného odhadu.

Cieľom bolo overenie optimalizácie rozloženia meracích jednotiek v skladovacích priestoroch farmaceutických produktov na základe teplotnej analýzy vytvorenej pomocou termovízie. Z termosnímkov vytvorených pomocou termovíznej kamery je možné analyzovať problémové miesta s vyššou fluktuáciou teploty a na základe tejto termovíznej analýzy optimalizovať rozloženie meracích jednotiek v skladovacích priestoroch farmaceutických produktov.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv II

Molekulární strukturní vlivy v hydrogenacích alkenů na palladiových katalyzátorech

Autor: Hana Lupoměská
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Doc. Ing. Petr Kačer Ph.D.,

Katalytická reakce, jejíž hlavní součástí je interakce katalyzátor – substrát, je ovlivněna řadou faktorů. Mezi tyto faktory neodmyslitelně patří strukturní vlivy, zejména vliv aktivního místa katalyzátoru a reagující molekuly. Na řadě palladiových nosičových katalyzátorů lišících se svou velikostí aktivního kovu, byla detailně studována hydrogenační přeměna alkenických alkoholů – vzájemně se lišících polohou $C\equiv C$ terminální vazby a OH skupiny.

Práce sledovala dva hlavní cíle. Za prvé poukázat na vliv molekulární struktury těchto substrátů. Druhým cílem bylo sledování vlivu velikosti částic aktivního kovu katalyzátoru na stabilitu adsorbovaného komplexu, který je jednou z klíčových struktur vznikajících při hydrogenační přeměně. K interpretaci získaných výsledků byla použita experimentální data získaná z kinetických experimentů, která byla porovnávána s daty získanými teoretickými výpočty na bázi molekulárního modelování a to jak, vlastních adsorbovaných komplexů na heterogenních katalyzátorech, tak jejich vhodných teoretických aproximací (modelů). Získané výsledky umožnily nejen interpretovat uvedený molekulární strukturní vliv, ale především navrhnout model pro predikci chování dalších alkenických hydroxysloučenin na palladiových nosičových katalyzátorech.

Sekce: Syntéza a výroba léčiv II

Vliv externích a interních parametrů organismu na úroveň hladiny biomarkerů plicních onemocnění

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

V současné době se medicínální diagnostika stále více zabývá sledováním specifických biomolekul tzv. „biomarkerů“ produkovaných organismem při probíhajícím patologickém procesu. Včasná diagnostika hraje důležitou roli z hlediska zahájení účinné terapie a minimalizace poškození organismu pacienta. Informace o koncentrační hladině biomarkerů lze získat molekulárním screeningem celé řady tělních tekutin. Poměrně novou a dynamicky rozvíjející se metodou je analýza látek obsažených ve vydechovaném vzduchu. Princip analýzy kondenzátu vydechovaného vzduchu (KVV) spočívá v kvantifikaci biomarkerů celé řady onemocnění. Mezi nejvýznamnější biomarkery detekované v KVV patří malondialdehyd, 8-iso-prostaglandin $F_{2\alpha}$, cysteinylované leukotrieny – LTC_4 , LTD_4 , LTE_4 (markery alergické reakce) a LTB_4 (marker zánětlivého procesu). Pro stanovení těchto biomarkerů v KVV byla vypracována analytická metoda kombinující separační metodu (SPE) s vysoce citlivou detekční metodou (LC-MS). Cílem předkládané práce bylo vyhodnocení změn koncentračních hladin uvedených biomarkerů v závislosti na vnějších faktorech (cirkadiální rytmy organismu, probíhající paralelní onemocnění, úroveň zavodnění/odvodnění organismu ad.), jejichž znalost by měla přispět ke zvýšení validity získaných diagnostických výsledků.

ekce: Syntéza a výroba léčiv II

Technologie Mayolu

Autor: Martina Štekrová
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Eliška Leitmannová, PhD., Ing. Iva Paterová, PhD.

Předkládaná práce se zabývá syntézou Mayolu, který patří mezi velmi žádané vonné látky. Výchozí látkou této syntézy je β -pinenoxid a celá syntéza se skládá ze dvou kroků. Náplní práce bylo řešení první z těchto reakcí, kterou je katalytické štěpení β -pinenoxidu na perillový alkohol a jeho izomery. Štěpení β -pinenoxidu bylo realizováno v koloně na vrstvě katalyzátoru a následně byla reakční směs dělena na vrstvě silikagelu. Pro dělení výchozí látky (nezreagovaného β -pinenoxidu) od produktu (perillového alkoholu) bylo třeba nalézt vhodné eluční činidlo a optimalizovat různé parametry kolony s cílem vyřešení problémů nastávajících při vsádkovém uspořádání. Možným řešením optimalizace kolony bylo uspořádání vrstva katalyzátoru- vrstva silikagelu- vrstva katalyzátoru- vrstva silikagelu. V takovém uspořádání byly provedeny pokusy s cílem dosažení co nejvyššího výtěžku perillového alkoholu

Sekce: Syntéza a výroba léčiv II

Vývoj technologického postupu přípravy 6-deoxy sacharidů

Autor: David Stíbal
Ročník: B3
Ústav: Organické technologie
Školitel: Doc. Ing. Petr Kačer, PhD.

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

Vyvinutý postup se vyznačuje snadnou separací meziproduktů, absencí použití tlakové aparatury a absencí použití drahých katalyzátorů či těžkých kovů. Tento zcela originální postup lze charakterizovat vysokou univerzálností, která byla ověřena na řadě hexóz a pentóz. V současné době jsou v laboratorním měřítku experimentálně ověřovány alternativní způsoby redukce, kde je snahou zvýšení výtěžků. Nicméně již v současné době je syntetický postup používán v provozním měřítku a zpracováván do formy patentové přihlášky.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv II

Mechanismus asymetrické transfer hydrogenace dihydroisochinolinů na Ru katalyzátorech Noyoriho typu

Autor: Jiří Václavík
Ročník: B2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D., Ing. Marek Kuzma, Ph.D.

Asymetrická transfer hydrogenace (ATH) je v současnosti velmi žádaná reakce hlavně ve farmaceutickém průmyslu pro jednoduché provedení a vysokou stereoselektivitu. ATH dihydroisochinolinů vznikají enantiomerně čisté tetrahydroisochinoliny, které jsou stavební jednotkou mnoha biologicky aktivních látek, jako je například Mivacurium, které se používá při kombinované celkové anestezii. ATH poskytuje značně vyšší výtěžky než „klasické“ metody přípravy enantiomerů (chirální krystalizace apod.).

Cílem předkládané práce bylo objasnění mechanismu ATH probíhající na Ru katalyzátorech Noyoriho typu v přítomnosti báze a kyseliny mravenčí (zdroj vodíku). Současný stav poznání v této oblasti považuje bázi pouze jako deprotonační činidlo kyseliny, případně akceptor chloridového ligandu Ru komplexu. Ukázala se však hlubší spojitost mezi bazí a Noyoriho katalyzátorem, přičemž bylo prokázáno, že báze tvoří vlastní ligand Ru-komplexu a ovlivňuje nejen rychlost, ale i enantioselektivitu procesu. Tato skutečnost byla prokázána měřením na FT-MS a NMR s připravenými ¹⁵N značenými bázemi. Originální popsání mechanismu dovoluje sofistikovaně ladit reakční podmínky pro konkrétní ATH odlišných substrátů a tím maximalizovat enantioselektivitu, případně aktivitu procesu.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv II

Škrob jako pojivo při vlhké granulaci léčiv

Autor: Marta Zapletalová
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Prof. Ing. Zdeněk Bělohav, CSc.

Škrob je látka používaná ve farmaceutickém průmyslu jako plnivo, pojivo či rozvolňovadlo. Zatímco dochází k poklesu užívání nativních škrobů, do popředí se dostávají škroby modifikované, především předželovaný škrob. Podobně jako účinná látka musí i škrob splňovat určité parametry podle lékopisu. Přesto však mezi jednotlivými šaržemi škrobu existují kvalitativní rozdíly, které se výrazně projevují právě během procesu vlhké granulace při výrobě pevných lékových forem. Byly proto studovány vlastnosti osmi předželovaných kukuřičných škrobů - jejich rozpustnost a bobtnavost ve vodě. Na základě těchto výsledků byla provedena studie kinetiky přeměn předželovaných škrobů pomocí disolučního zařízení při dvou teplotách 25 a 35 °C. Jednoduchý test chování předželovaných škrobů byl uskutečněn i ve vlhkostní komoře.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Redukce obsahu oxidu zinečnatého v gumárenských směsích

Autor: Bc. Anna Brodská
Ročník: M1
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Zdeněk Hrdlička, Ph.D.

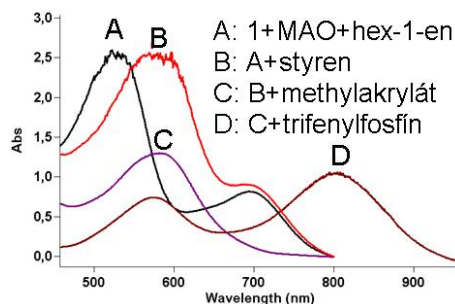
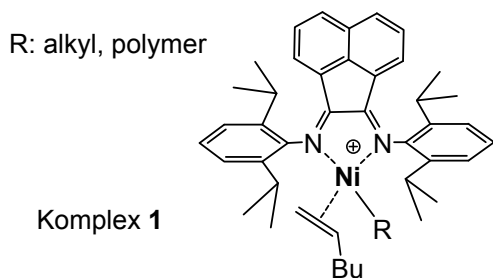
Oxid zinečnatý je nejběžnějším aktivátorem sirné vulkanizace kaučuků. Snižování jeho obsahu v kaučukových směsích se stalo důležitým tématem z důvodů vysokých obsahů zinku v evropských tocích a jeho nepříznivého vlivu na vodní organismy. Dále může být snižování obsahu oxidu zinečnatého v kaučukových směsích motivováno jeho poměrně vysokou cenou. Tato práce se snaží zdokumentovat vliv typu a obsahu oxidu zinečnatého v kaučukových směsích na jejich zpracovatelské vlastnosti a na kvalitu pryže. Pro přípravu směsí byly použity 3 typy oxidu zinečnatého, lišící se způsobem výroby. Jde o oxid zinečnatý Red Seal, Actif a Actif Free Flowing. Tyto přísady byly testovány v přírodním kaučuku (světlé krepě).

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Mechanismus polymerace alkenů katalyzované diiminovými komplexy niklu I: UV-VIS studie reakcí růstových center s terminačními činidly

Autor: Darja Hasalíková
Ročník: B3
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Jan Merna, Ph.D.

Vhodnou metodou charakterizace paramagnetických komplexů je UV-VIS spektroskopie. Interpretace málo rozlišeného UV-VIS spektra diiminového komplexu niklu (viz. obr.) může být usnadněna sledováním jeho změn v závislosti na přidavku činidel, která mění strukturu absorbujících částic. Cílem této práce byla studie změn absorpčních spekter komplexu **1** přidávkou sloučenin, které s k Ni centru koordinují silněji než monomer (hex-1-en). Na základě provedených experimentů byla navržena nová interpretace UV-VIS spektra.

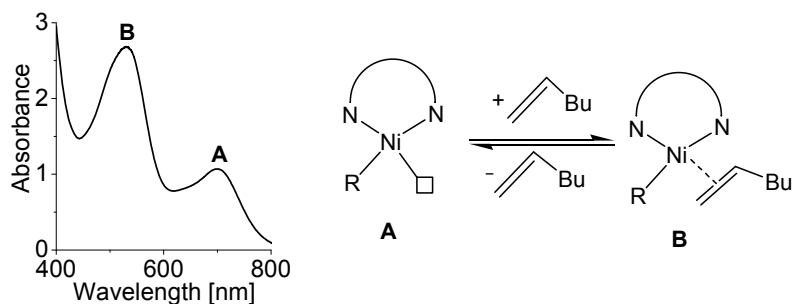


Sekce : Chemie a technologie polymerů

Mechanismus polymerace alkenů katalyzovaných diiminovými komplexy niklu III: DFT výpočty UV-vis spekter růstových center

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

Teoreticky odhadnout počet a polohu absorpčních píků v UV-VIS spektru složitějších komplexů je téměř nemožné. Experiment je rovněž technicky omezen rozsahem vlnových délek (cut-off rozpouštědla, možnosti přístroje), kde můžeme studovat spektrální vlastnosti daného komplexu. Pro potvrzení mechanismu polymerace hexenu katalyzované diiminovými komplexy niklu navrženého na základě experimentálních dat je možno využít kvantově-chemické metody DFT. Cílem této práce bylo potvrdit nebo vyvrátit interpretaci experimentálně získaných UV-VIS spekter (viz. obr.) založenou na rovnováze částic **A** a **B** v průběhu polymerační reakce.



Sekce : Chemie a technologie polymerů

Příprava nanokompozitů hydrotalcit-polyamid-6

Autor: Dana Lennerová
Ročník: B3
Ústav: Polymerů
Školitel: Doc. Ing. Jiří Brožek, CSc.

Systematický výzkum nanokompozitů na bázi polyamidu 6 a vrstevnatých silikátů typu montmorillonitu započal před třiceti lety. Tyto materiály již našly uplatnění v automobilovém průmyslu. Montmorillonit obsahující v mezivrsteví sodné kationty se organofilizuje alkylamoniovými kationty pro zvýšení kompatibility silikátu s polymerem. Takto modifikovaný silikát však není vhodný pro přípravu nanokompozitů aniontovou polymerací ϵ -kaprolaktamu.

Mnohem méně pozornosti je věnováno využití hydrotalcitu pro přípravu nanokompozitů. Hydrotalcit na rozdíl od montmorillonitu obsahuje v mezivrsteví vyměnitelné anionty. Předpokládáme, že aniontovou polymerací ϵ -kaprolaktamu v přítomnosti vhodně modifikovaného hydrotalcitu bude možno připravit nanokompozity.

Srážecí reakcí roztoků anorganických solí při konstantním pH a teplotě byly připraveny hydrotalcity typu Mg/Al (2:1) obsahující chloridové nebo uhličitánové anionty. Tyto produkty byly využity jako plniva pro přípravu nanokompozitů polyamidu 6 aniontovou polymerací. Připravené materiály byly charakterizovány stanovením konverze, obsahu plniva a mechanických vlastností.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Polymerizace cyklických esterů iniciovaná komplexy biogenních kovů II

Autor: Bc. Jakub Mráček
Ročník: M2
Ústav: Polymerů
Školitel: Doc. Ing. Irena Prokopová, CSc.

Pro iniciaci polymerizace cyklických esterů se využívá organokovových komplexů, zvláště 2-ethylhexanoátu cínatého. Ten je sice schválen U.S. Food and Drug Administration; v literatuře se ale spekuluje o možné bioakumulaci dvojmocného cínu v lidském organismu, což je problematické zvláště pro medicínské aplikace výsledného polymerního materiálu. Cílem práce proto bylo připravit a otestovat analogické komplexy na bázi biogenních kovů jako iniciátorů pro homopolymerizaci a kopolymerizaci cyklických esterů (L-laktidu a ϵ -kaprolaktonu).

Vedle 2-ethylhexanoátu hořečnatého a vápenatého byl také studován iniciační účinek 2-ethylhexanoátu zinečnatého. Komplex, který není komerčně dodáván, byl syntetizován, analyzován a aplikován pro zmíněné homo- i kopolymerizace. Podle dosavadních výsledků je zinečnatý komplex účinnějším iniciátorem než jeho hořečnatý a vápenatý analog.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Vliv vlhkosti na průběh vulkanizace

Autor: Bc. Petra Pikulová
Ročník: M2
Ústav: Polymerů
Školitel: Doc. Ing. Antonín Kuta, CSc

Vlastnosti přírodního kaučuku jsou ovlivněny mnoha vlivy, působící od pěstitelské činnosti až po zpracování. Vlhkost se může do přírodního kaučuku dostat již ve stádiu sběru, při zpracování latexu na tuhý přírodní kaučuk, při skladování, v dopravě, a v neposlední řadě při výrobě konečného produktu.

Vlhkost v kaučuku zhoršuje zpracovatelské chování, zejména při míchání a vytlačování. Navíc může docházet k růstu plísní a bakterií, které mají negativní vliv nejen na mechanické vlastnosti, ale i na vzhled vulkanizátu.

V této práci byl studován vliv vlhkosti na průběh sirné vulkanizace přírodního kaučuku SMR 20 u dvou různých vulkanizačních systémů. Byly porovnávány základní vulkanizační charakteristiky směsí připravených ze suchého i „vlhkého“ kaučuku uložených v prostředích s různou relativní vlhkostí.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Vliv původu E-SBR na zpracovatelnost kaučukových směsí a vlastnosti vulkanizátů

Autor: Bc. Vojtěch Podzimek
Ročník: M1
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Zdeněk Hrdlička, Ph.D., Ing. Jiří Brejcha

Butadien-styrenový kaučuk je dnes nejvíce vyráběným syntetickým kaučukem, který tvoří přibližně 50 % z celkové výroby syntetických kaučuků na světě. Většinou obsahuje 23 % až 25 % vázaného styrenu. Vyrábí se emulzní (E-SBR) nebo roztokovou (S-SBR) kopolymerací butadienu se styrenem.

E-SBR je jedním z nejvýznamnějších typů syntetických kaučuků. Nejčastěji obsahuje 23,5 % vázaného styrenu, 10 % cis-1,4, 75 % trans-1,4 a 15 % 1,2-polybutadienu s různou distribucí monomerů v polymerním řetězci. E-SBR se vyrábí studenou radikálovou kopolymerací ve vodném prostředí. Na světě se vyrábí mnoho druhů E-SBR, které se podle svého původu výroby lépe či hůře zpracovávají z důvodu odlišných vlastností.

Cílem této práce bylo porovnat několik druhů E-SBR z pohledu jejich zpracovatelnosti a fyzikálně-mechanických vlastností. Pozornost byla zaměřena především na množství přidaného plniva, kterým byly saze, jež výrazně ovlivňují mechanické vlastnosti E-SBR. V budoucnu se budeme věnovat porovnání různých druhů S-SBR a srovnání roztokového a emulzního butadien-styrenového kaučuku.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Řízená solvolýza poly(3-hydroxybutyrátu)

Autor: Jan Štěpánek
Ročník: B2
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Marie Kutáčová, Doc. Ing. Jiří Brožek, CSc.

Poly(3-hydroxybutyrát) (PHB) je přírodní, biodegradovatelný, semikrystalický polymer. Je produkován řadou bakterií, kterým slouží jako zásobní zdroj energie. Průmyslově se PHB vyrábí fermentačním procesem v bioreaktorech.

PHB má mechanické vlastnosti srovnatelné s polypropylenem. Jeho rozšíření zatím brání citlivost k termické degradaci v blízkosti jeho teploty tání a postupná dokrystalizace po zpracování. Tyto nepříznivé vlastnosti se dají omezit fyzikální nebo chemickou modifikací.

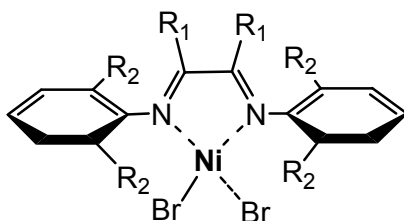
Předkládaná práce studuje solvolýzu PHB ethylenglykolem nebo methanolem v chloroformu za katalýzy p-toluensulfonové kyseliny. Produkty solvolýzy lze využít pro chemickou modifikaci PHB. Připravené materiály byly charakterizovány stanovením průměrné molární hmotnosti viskozimetrickou metodou a rozměrově vylučovací chromatografií, a dále pomocí termických metod (DSC, TGA).

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Mechanismus polymerace alkenů katalyzovaných diiminovými komplexy niklu II: Vliv struktury Ni komplexů na jejich UV-VIS spektra

Autor: Viviana Tandlerová
Ročník: B3
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Jan Merna, Ph.D.

Důkladná znalost mechanismu koordinační polymerace přispívá k lepšímu pochopení funkce katalyzátoru. Cílem této práce byl výzkum vlivu substituentů R_1 a R_2 diiminových komplexů niklu **1-3** (viz obr.) na jejich UV-VIS spektra, která umožňují identifikaci struktur růstových a sledování jejich vzniku. Byl prokázán významný vliv skeletálních substituentů (R_1) na rozložení elektronové hustoty ve studovaných Ni komplexech. Naopak arylové substituenty (R_2) ovlivnily spektrální vlastnosti komplexů **1-3** minimálně. Spektroskopická data katalytického systému byla korelována se strukturou připravených polymerů (SEC, NMR).



Kat.	R_1	R_2
1:		iPr
2:	Me	iPr
3:	Me	Et

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Studium směsí polyvinylchloridu a kopolymerů na bázi ϵ -kaprolaktonu a L-laktidu.

Autor: Bc. Markéta Žídková
Ročník: M2
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Radka Kalousková, CSc.

Poly(ϵ -kaprolakton) je lineární, biodegradabilní, krystalizující polyester, který je úspěšně využíván ve směsích PVC jako netoxické změkčovadlo. Kopolymerací L-laktidu s ϵ -kaprolaktonem vzniká statistický kopolymer, který obsahuje méně krystalické fáze než poly(ϵ -kaprolakton).

Předmětem práce byla příprava směsí PVC a kopolymerů na bázi ϵ -kaprolaktonu a L-laktidu, které se lišily podílem laktidových strukturních jednotek v polymerním řetězci. Sledován byl vliv podílu kopolymerů ve směsi a podmínky přípravy. Všechny získané směsi byly homogenní a byly hodnoceny z hlediska tepelné stability a mechanických a termických vlastností.

Sekce : Materiálové inženýrství

Relativní entalpie a tepelná kapacita $\text{Bi}_4\text{Ta}_2\text{O}_{11}$

Autor: Jiří Tůma
Ročník: M1
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Prof. Ing. Jindřich Leitner, DrSc.

Práškový vzorek $\text{Bi}_4\text{Ta}_2\text{O}_{11}$ byl připraven vysokoteplotním keramickým postupem ze stechiometrické směsi Bi_2O_3 a Ta_2O_5 . Pro identifikaci připraveného vzorku byla užitá RTG difrakční analýza. K měření relativních entalpií byl použit kalorimetr Multi HTC96 Setaram s detektorem pro vřazovací kalorimetrii. Měření byla provedena v rozsahu teplot 620–1370 K na vzduchu. Jako standard byl použit syntetický safír. Pro vyhodnocení teplotní závislosti molární tepelné kapacity $\text{Bi}_4\text{Ta}_2\text{O}_{11}$ byly užity změřené hodnoty relativní entalpie a rovněž dříve změřené hodnoty C_{pm} v oboru teplot 205–350 K. Výsledky byly porovnány s empirickou predikcí tepelné kapacity podle Neumannova - Koppova pravidla.

Sekce : Materiálové inženýrství

Senzory na bázi ZnO a ZnAcAc

Autor: Jitka Kupková
Ročník: M1
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Doc. Ing. Vladimír Myslík, CSc.

Práce je zaměřena na studium vlastností chemických vodivostních senzorů připravených pomocí pulsní laserové deposice na základě zdrojových terčů slisovaných z nanočástic ZnO a prášku ZnO + ZnAcAc, tedy z anorganických a směsných materiálů. Prezentovaná práce je součástí výzkumu senzorových struktur určených pro kontrolu výskytu malých koncentrací plynů a par v atmosféře. Výsledky jsou určeny pro optimalizaci složení detekčních vrstev včetně optimalizace technologických parametrů pulsní laserové deposice.

Hlavní cíle práce:

- Proměření teplotní závislosti vodivosti tenkých detekčních vrstev nanesených na nevodivou podložku opatřenou Pt kontakty. Následné vyhodnocení stejnosměrné citlivosti S_{dc} jako poměru změny vodivosti při měnící se okolní atmosféře.
- Studium vlivu katalyzátorů na změny vodivosti a citlivosti detekčních vrstev.
- Proměření vlivu UV záření na povrchovou sorpci a desorpci okolní atmosféry.
- Zpracování výsledků a vzájemné porovnání vlastností anorganických a směsných detekčních vrstev.

Sekce : Materiálové inženýrství

Změny polarity modifikovaných folií pro tkáňové kultury

Autor: Karolína Górecká
Ročník: M2
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Prof. Ing. Václav Švorčík, DrSc.

Polymerní materiály jsou využívány v tkáňovém inženýrství jako nosiče pro pěstování buněk. Ve své práci jsem se zabývala modifikací povrchu high density a low density polyethylenu. Studovala jsem změnu polaritu povrchu polyethylenu k níž po modifikaci dochází. Polymerní folie jsem modifikovala několika způsoby - naprašováním uhlíkové vrstvy, působením Ar^+ plasmu a naroubováním polyethylenglykolu na plasmou aktivovaný povrch. Dále jsem sledovala vliv sterilizace na polaritu modifikovaných materiálů.

Změnu polaritu jsem zjišťovala goniometricky měřením kontaktního úhlu mezi polymerem a kapkou destilované vody.

Bylo zjištěno, že působením plasmu, naroubováním vrstvy PEG a naprašováním uhlíku dochází ke změně polaritu a povrchu sledovaných polymerů.

Sekce : Materiálové inženýrství

Modifikace PE v plazmatu a následným roubováním Au nanočástic

Autor: Kateřina Bartečková
Ročník: M1
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Jakub Siegel

Vlastnosti polymerů jako jsou nízká cena, flexibilita a chemická odolnost spolu s možností úpravy povrchových vlastností šitými doslova na míru, předurčují tyto materiály pro aplikace ve všech odvětvích průmyslu. Zmíněné vlastnosti polymerů jsou žádány také v lékařství, kde se ve velké míře uplatňuje i polyethylen jako materiál pro růst buněk s vysokou proliferací. Tato studie je zaměřena na vliv modifikace na povrchovou rezistanci polyethylenu, jež je jedním z faktorů ovlivňujícím buněčnou proliferaci. Při práci jsem použila fólie HDPE a LDPE, které byly modifikovány plazmatem. Sledován byl vliv působení různých roztoků na modifikovaný povrch PE a tvorba elektricky souvislé Au vrstvy při depozici kovu na takto modifikované substráty. Au jsem deponovala metodou katodového naprašování na přístroji SPUTTER COATER 050. Plošnou rezistanci jsem měřila pikoampérmetrem KEITHLEY 487 a multimetrem UNI-T UT83. Změna povrchové morfologie před depozicí zlata byla studována AFM.

Sekce : Materiálové inženýrství

Depozice podvojných vrstevnatých hydroxidů na nosič **Al₂O₃/Al**

Autor: Lukáš Krúpa
Ročník: M1
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: Doc. Ing. František Kovanda, CSc.

Podvojně vrstevnaté hydroxidy obecného složení $M^{II}_{1-x}M^{III}_x(OH)_2A^{n-}_{x/n}\cdot yH_2O$, kde M^{II} a M^{III} značí dvojmocný a trojmocný kation a A^{n-} n-mocný anion, se často používají jako prekurzory pro přípravu katalyzátorů na bázi směsných oxidů. Cílem práce bylo připravit takové prekurzory na nosiči Al₂O₃/Al získaného anodickou oxidací hliníkové fólie. Depozice byla prováděna v roztoku dusičnanů různých dvojmocných kationtů (Co, Ni, Cu, Mn) za hydrotermálních podmínek při teplotě 140 °C po dobu 65 hodin. Celková koncentrace kationtů v roztoku byla 0,1 mol/l s molárními poměry Ni:Mn nebo Co:Mn 2:1 a Ni:Co:Mn, Ni:Cu:Mn nebo Co:Cu:Mn 1:1:1. Bylo zjištěno, že do nanesených vrstev se zabudovává pouze velmi malé množství Mn, jeho obsah ve vzniklých produktech vzrostl po zvýšení pH roztoku z 6,8 na 8,5. Zvýšení pH roztoku vedlo také ke zvýšení hmotnosti nanesené vrstvy. Prášková rentgenová difrakční analýza prokázala vznik podvojných vrstevnatých hydroxidů na povrchu nosiče a na snímcích pořízených elektronovým mikroskopem (SEM) jsou patrné tenké listkovité krystaly orientované přibližně kolmo k povrchu nosiče.

Sekce : Materiálové inženýrství

Adheze a růst cévních hladkých svalových buněk na **modifikovaném polyethylenu**

Autor: Markéta Bačáková
Ročník: M1
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Prof. Ing. Václav Švorčík, DrSc.

Práce se zabývá studiem adheze a růstu cévních hladkých svalových buněk izolovaných z aorty potkana na modifikovaném polyethylenu. Jako studované materiály byly použity nízkohustotní (LDPE) a vysokohustotní (HDPE) polyethylen, které byly ozářeny Ar⁺ ionty po dobu 50, 150 a 400 s. Následně na jejich povrch byly naroubovány biomolekuly obsažené v médiu bez fetálního bovinního séra (DMEM), s tímto sérem (DMEM+FS) a bovinní sérový albumin (BSA). Ke kultivaci buněk bylo použito médium DMEM s obsahem 10% fetálního bovinního séra a bezsérové médium SmBM. Kritériem hodnocení adheze a růstu buněk bylo sledování jejich počtu, morfologie a velikostí adhezních ploch ve 2., 4. a 6. dnu po nasazení.

Výsledky ukazují, že modifikace PE výrazně ovlivňuje chování buněk, tzn., na modifikovaném PE buňky adherovaly ve větším počtu a byly rozprostřeny větší plochou než na PE nemodifikovaném. U vzorků, kde byly buňky kultivovány v médiu se sérem, nebyly příliš patrné rozdíly v adhesi a růstu buněk mezi jednotlivými modifikacemi. Naproti tomu při použití bezsérového média byly tyto rozdíly dobře patrné, největší hustoty buněk a velikosti jejich ploch bylo dosaženo u PE pouze ozářeného plasmou a roubovaného biomolekulami z DMEM.

Sekce : Materiálové inženýrství

Schottkyho kontakty na karbidu křemíku

Autor: Bc. Martin Orna
Ročník: M1
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Doc. Ing. Petr Macháček, CSc.

Práce je zaměřena na tvorbu a studium Schottkyho kontaktů na polovodičovém substrátu karbidu křemíku. K experimentům byla užita dodaná substrátová deska 6H-SiC s N dotací cca $5 \cdot 10^{-17} \text{cm}^{-3}$ opatřená 2 μm epitaxní vrstvou s N dotací $5,5 \cdot 10^{15} \text{cm}^{-3}$, na kterou byly napařovány zkoumané kovy (Pt, Pd, Ni, Ti, Ag, Au). Spodní strana substrátu byla dále vybavena ohmickým kontaktem, čímž byla k experimentům zpřístupněna struktura klasické Schottkyho diody. K vyhodnocování diod je užito standardní měření volt-ampérových charakteristik v propustném i závěrném směru. Studovaným parametrem je pak vliv podepozičního žíhání na formování a transformaci získaných Schottkyho kontaktů při nižších teplotách. Jako nejlepší výsledek se jeví paládiové kontakty, kde se vzrůstem žíhacích teplot dochází k zlepšování usměrňovacích vlastností v protikladu s titanovými kontakty, které inklinují k ohmickým strukturám.

Sekce : Materiálové inženýrství

Teplotně namáhané naprášené Au nanovrstvy

Autor: Ondřej Kvítek
Ročník: M2
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Jakub Siegel

V této práci byly studovány vlastnosti tenkých vrstev zlata různých tloušťek připravených naprašováním na skleněnou podložku po různou dobu. U vrstev byla změřena závislost odporu na době naprašování a absorpční charakteristiky v UV-VIS oblasti. Vzorky byly následně teplotně zatíženy na 300°C po dobu 1 hodiny, přičemž byla sledována dramatická změna vlastností jak ve spektru absorbovaných vlnových délek záření, tak ve zvýšení rezistivity vrstev. Metodou AFM byly změřeny tloušťky vrstev, zároveň byly pozorovány změny struktury povrchu.

Sekce : Materiálové inženýrství

Bodové poruchy v křemíku

Autor: Peter Pikna
Ročník: M2
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Doc. Ing. Vladimír Myslík, CSc.

Hluboké úrovně vytvořené mědí a železem jsou zkoumány v monokrystalickém a polykrystalickém křemíku dopovaném borem. Vzorky jsou napařené mědí nebo železem, zahřáty na 1050°C, prudce ochlazený vodou nebo vzduchem na pokojovou teplotu a leptány ve směsi kyselin. Schottkyho přechod je připraven napařením hliníku na křemík a následně je pomocí kapacitní tranzientní spektroskopie zjišťována přítomnost elektricky aktivních nečistot. Jsou detekovány dvě energetické úrovně patřící intersticiálnímu železu Fe_i a komplexu FeB . Hluboká hladina Fe_i má energii $E_v + 0.48$ eV. Substituční měď je pozorována ve dvou nábojových stavech: $+0$ s energií $E_v + 0.21$ eV a $0/-$ s energií $E_v + 0.54$ eV. Předpokládá se i přítomnost komplexu Cu_i-Cu_s , ale překryv s komplexem FeB brání přesnému přiřazení. V některých monokrystalických vzorcích je detekována hladina s energií $E_v + 0.37$ eV. Její původ není známý. Energie všech pozorovaných hlubokých úrovní jsou vypočteny bez jakékoliv korekce. Koncentrace nečistot v křemíku je menší než 10^{13} cm^{-3} , pouze u některých monokrystalických vzorků napařených železem je koncentrace vyšší.

Sekce : Materiálové inženýrství

Vytváření pravidelné povrchové struktury na PMMA pomocí dotace polymeru a laserového skenování

Autor: Petr Šimek
Ročník: M1
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Doc. Ing. Ivan Hüttel, DrSc.

Na skleněném substrátu byl z roztoku PMMA a porfyriu metodou spin-coating připraven tenký film polymeru (tloušťka 2000 nm). Takto připravené vzorky byly vystaveny působení koherentního polarizovaného záření laseru o vlnové délce 405 nm. V absorpčním spektru porfyritu této vlnové délce odpovídá výrazný pík (tzv. Soretův pás). V důsledku absorpce světelných kvant dochází k periodickému ohřevu ozařovaných míst na povrchu polymeru nad teplotu tečení (T_f). Při současném posuvu vzorku ve směru kolmém k záření laseru se na povrchu vytváří složitější struktury (mřížky). Ty byly charakterizovány měřením periodicity a amplitudy v závislosti na koncentraci porfyritu v PMMA a rychlosti posuvu. U samotných vrstev byla též měřena absorpční spektra, tloušťky vrstev, drsnost povrchu a závislost indexu lomu na vlnové délce. Vzniklé povrchové struktury mají zajímavé optické vlastnosti a nacházejí využití v oblasti výroby součástek fotoniky (např. pro navazování (nebo vyvazování) optického záření do vlnovodů).

Sekce : Materiálové inženýrství

Využití polarizovaného světla pro diagnostiku léčiv

Autor: Tereza Ambrůzová
Ročník: M1
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Pavel Novotný, CSc.

Trendem dnešního farmaceutického průmyslu při výrobě chirálních léčiv je přechod od racemického k opticky čistému léčivu. A to hlavně z důvodu omezení nežádoucích účinků, snížení dávky oproti racemické směsi a často také díky rychlejšímu nástupu účinku léčiva. Ke kontrole se používá klasická polarimetrie.

Cílem měření bylo experimentální studium optické aktivity léčiv pomocí polarizačního mikroskopu, který na rozdíl od klasické polarimetrie disponuje potenciálem velké rozlišovací schopnosti. Pomocí programu NIS elements byly studovány tyto látky: D-fruktóza a L-carnitin. Mikroskopická metoda se ukázala vhodná pro měření malých objemů.

Sekce : Materiálové inženýrství

Vliv působení plasmu na polymerní folie

Autor: Zuzana Makajová
Ročník: M2
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Nikola Slepíčková Kasálková

Práce se zabývá působením plasmu na polymerní materiály. Studovanými materiály byly polystyren (PS) a vysokohustotní polyetylen (HDPE), které byly modifikovány různou dobou (50, 100, 300s) ionty Ar^+ .

Pro studium vlivu působení plasmu bylo využito metody goniometrického měření kontaktního úhlu, mikroskopie atomárních sil (AFM) a dále byla na vzorcích zjišťována adheze a proliferace buněk.

Bylo zjištěno, že v závislosti na době expozice vzorků v plasmě dochází ke změně hodnot kontaktního úhlu (smáčivosti). Povrchová modifikace vede také k výrazným změnám povrchové morfologie. Dále bylo zjištěno, že modifikace plasmou neovlivňuje buněčnou adhezi. Ke zlepšení buněčné proliferace je nutné vzorky modifikovat plasmatickým výbojem.

Sekce: S2 Restaurování a konzervování uměleckořemeslných děl z kovu

Hodnocení povrchových patin na historické mědi

Autor: Martina Anisová
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jan Stoulil, Ph.D.

Na povrchu mědi vznikají při expozici v atmosféře kompaktní vrstvy korozních produktů – patiny. V našich podmínkách se jedná většinou o zásadité sírany či uhličitany. Vlivy sklonu střechy, doby ovlhčení a směrové orientace plechu už jsou známy delší dobu. Jedním z nevysvětlených jevů je výskyt zelené a černé patiny na jednom plechu, vystaveném stejným podmínkám. V rámci práce byly hodnoceny plechy ze střechy VŠCHT Praha a Letohrádku královny Anny. Povrchové vrstvy byly hodnoceny pomocí scanovací elektronové mikroskopie a infračervené spektroskopie.

Sekce: S2 Restaurování a konzervování uměleckořemeslných děl z kovu

Jezdecká pistole M 1770

Autor: Klára Čechlovská
Ročník: B4
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Šárka Msallamová, PhDr. Norbert Riegel

Rakouská vojenská jezdecká pistole Model 1770 je pistole předovka, opatřená francouzským křesadlovým zámkem. Na zámkové desce je patrná signatura PENEL. Jedná se o výrobek zhotovený francouzskou manufakturou v Saint-Étienne, v níž působila řada puškařů rodiny Penel. Ve vojenském historickém ústavu v Praze byl nalezen stejný model pistole. Porovnáním byly zjištěny chybějící části předmětu. Materiálové složení bylo určeno metodou metalografické analýzy. Na výrobu bylo použito svářkové železo. Pažba je ze dřeva, jak bylo dáno předpisem z roku 1770, jedná se o ořechové dřevo. V čelistech zámku je štípaný pazourek. Následoval průzkum předmětu pod stereoskopickým mikroskopem a vyhodnocení průzkumu. Veškeré navrhované techniky restaurování a konzervování předmětu vycházely z předchozího průzkumu. Po demontáži předmětu byly mechanicky odstraněny korozní produkty železa. Poté byly zbylé korozní produkty stabilizovány pomocí taninu. Dřevo použité na pažbu pistole je degradováno dřevokazným hmyzem. Dřevokazný hmyz byl zahuben ionizujícím gama zářením. Povrch předmětu byl konzervován včelím voskem. Po kompletaci pistole byl navržen ochranný režim památky.

Sekce: S2 Restaurování a konzervování uměleckořemeslných děl z kovu

Postup restaurátorských prací na dlouhé palné zbrani zvané „Jezail“

Autor: Klára Fišerová
Ročník: B4
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jiří Děd, CSc. , PhDr. Norbert Riegel

V příspěvku je prezentován postup a výsledek restaurátorských prací, provedených na dlouhé palné zbrani zvané „jezail“, pocházející z 1. poloviny 19. století. Nejprve byl proveden detailní průzkum, kdy byly zjištěny chybějící díly, míra korozního poškození, byl určen použitý materiál a jeho struktura pomocí GDS analyzátoru, rastrovacího elektronového mikroskopu s EDS analyzátozem a pomocí metalografického výbrusu. Po průzkumu zbraně byl navržen restaurátorský záměr, který byl schválen vlastníkem. Po zakončení restaurátorských prací byl navržen ochranný režim zbraně.

Sekce: S2 Restaurování a konzervování uměleckořemeslných děl z kovu

Korozní poškození historických olověných bul v prostředí depozitáře Národního archivu Praha

Autor: Eva Hrbáčková
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Šárka Msallamová

Cílem této práce bylo zjistit příčiny korozního napadení olověných bul z depozitáře Národního archivu Praha podrobným prozkoumáním podmínek a historie skladování. Srovnáním výsledků analýz naměřených infračervenou, Ramanovou mikrospektroskopií a RTG difrakční analýzou byly na povrchu olověných bul identifikovány korozní produkty a použité konzervační metody. Na základě Oddy testu a zjištěného pH vodného výluhu papírových obalů byla vyhodnocena agresivita použitých obalů. Elektronovým rastrovacím mikroskopem s analyzátozem EDS bylo určeno složení vybraných olověných bul a korozních produktů na povrchu některých bul.

Ke koroznímu poškození povrchu olověných bul oxidem olovnatým, sulfidem olovnatým a olovnatou bělobou $[\text{Pb}(\text{OH})_2 \cdot 2\text{PbCO}_3]$ došlo již v dávné minulosti. Směs olovnatých solí organických kyselin na povrchu olověných bul naopak pochází z nedávné minulosti. Zdrojem těchto korozních produktů jsou těkavé organické látky vznikající degradací papírových obalů v prostředí s neregulovanou relativní vlhkostí.

Sekce: S2 Restaurování a konzervování uměleckořemeslných děl z kovu

Kinetika vzniku karboxylátových vrstev na oceli

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

Při stabilizaci vrstev korozních produktů na železných archeologických předmětech je nejčastěji používán povlak na bázi tanátu. Jeho stabilita ve vodném prostředí je však omezená. Jako jedna ze stabilnějších alternativ se ukazují povlaky vzniklé konverzí povrchu roztokem na bázi kyseliny dekanové. Stabilizace povrchu běžně probíhá po několik hodin. Cílem práce bylo ověřit nejkratší dobu nutnou pro ponor vzorku v lázni. Byly hodnoceny vzorky s kovově čistým povrchem i předkorodovaným. Kinetika růstu vrstvy byla hodnocena pomocí hmotnostních přírůstků, elektrochemické impedanční spektroskopie (EIS), optické spektroskopie s obloukovým výbojem (GD-OES) a expozičních zkoušek ve vlhké atmosféře.

Sekce: S2 Restaurování a konzervování uměleckořemeslných děl z kovu

Průzkum cínových křtitelnic ze 16.stol.

Autor: Eliška Jindrová
Ročník: B2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Šárka Msallamová

Cín v čisté formě je stříbrný neželezný kov, nemagnetický, velmi měkký a kujný. Má dvě alotropické modifikace závislé na teplotě: β modifikace (bílý cín) existuje mezi teplotami 13,5 a 232 °C a α modifikace tzv. „cínový mor“ (šedý cín) pod teplotou 13,5 °C. Jako ukázka cínařského sakrálního mistrovství v Čechách jsou tři křtitelnice č. 5524, č. 5914 a č. 6617 z depozitáře Národního muzea pocházející z poloviny 16.stol. ze slitiny cínu a olova. K určení korozních produktů na povrchu křtitelnic byla použita RTG difrakční analýza PAN analytical X'Pert PRO se softwarem High Score plus. Složení slitin křtitelnic bylo určeno pomocí elektronového rastrovacího mikroskopu HITACHI S 4700. Metalografické výbrusy byly zdokumentovány pomocí vertikálního metalografického mikroskopu OLYMPUS PME 3. Na žádné z křtitelnic nebyla potvrzena α modifikace cínu. Na tělech nádob křtitelnic byly pozorovány dva druhy korozních produktů: bílé korozní produkty se vyskytovaly v menší míře na povrchu nádob a šedé nekonzistentní korozní produkty se vyskytovaly ve větších dutinách materiálu nádob a nohou nesoucích křtitelnice. Pro křtitelnice byl navržen vhodný ochranný režim a způsob čištění a konzervace.

Sekce: S2 Restaurování a konzervování uměleckořemeslných děl z kovu

Stříbrné příbory

Autor: Martina Charvátová
Ročník: B4
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Šárka Msallamová, Jaroslav Prášil, restaurátor s licenci

Cílem semestrální práce bylo na základě vyhodnocení detailního restaurátorského průzkumu a výsledků metalografické analýzy, chemické analýzy na elektronovém rastrovacím mikroskopu s EDS analyzátozem, zkoušky tvrdosti podle Vickerse a infračervené spektroskopie z odebraných vzorků, posoudit původnost předmětů, určit použité materiály, ze kterých byly předměty vyrobeny a u kovových částí příborů posoudit jejich strukturu. Dále vycházet z těchto výsledků a restaurovat předměty zpět do původní podoby, odstranit korozní produkty, opravit mechanické poškození a konzervovat předměty s ohledem na jejich následné vhodné uchování, případně jejich expozici na výstavách.

Sekce: S2 Restaurování a konzervování uměleckořemeslných děl z kovu

Konzervace a průzkum železné laténské radličky

Autor: Kristýna Kolářová
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jiří Děd, CSc.

Železná radlička z doby laténské je součástí archeologického nálezu v Mikulovicích. Cílem práce bylo očistit předmět bezprostředně k tzv. „původnímu“ povrchu a zabránit dalšímu koroznímu poškození. Dále zachovat zbytky organického materiálu, které jsou součástí předmětu, a provést jejich identifikaci. K bližší identifikaci a upřesnění časového zařazení předmětu provést materiálovou analýzu vzorku odebraného ze zbytku kovového jádra pomocí metalografické analýzy s využitím optické a elektronové mikroskopie.

Prováděné analýzy dokázaly přítomnost struskových vměstků ve struktuře tvořené perlitem se síťovím feritu. Elektronová mikroanalýza vyloučila přítomnost fosforu. Také byl prokázán organický materiál identifikovaný jako jehličnaté dřevo.

Sekce: S2 Restaurování a konzervování uměleckořemeslných děl z kovu

Restaurování křesadla

Autor: Kamila Moravcová
Ročník: B4
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Alena Michalcová, PhDr. Norbert Riegel

Křesadlo pocházející z první poloviny 17.století z Francie sloužilo k zapalování svíček, doutníků, apod. Skládá se ze dvou částí materiálů odlišných – rukojeť je dřevěná s inkrustací ze zvířecí kosti a křesadlo je železné, pájené mosaznou pájkou. Nedochovala se jedna část mechanismu křesadla – bicí pero. V opěrné části vznikla trhлина.

Pro detailní průzkum byla zhotovena analýza složení kovu a korozních produktů, dále byla provedena analýza povrchové vrstvy infračervenou mikrospektroskopií. Na metalografickém výbrusu byla sledována struktura kovu.

Na povrchu železného křesadla se nachází korozní produkty Fe a Cu. Struktura kovu je feritická odpovídající svárkovému železu. Na povrchu předmětu byla identifikována vrstva parafinu.

Tryskáním balotinou byly odstraněny korozní produkty na železné části, zbylé následně pasivovány taninem a natřeny včelím voskem rozpuštěným v technickém benzínu. Korozní produkty na dřevěné části byly odstraněny mechanicky a inkrustace čištěna technickým benzínem. Trhлина byla zatmelena dvousložkovým epoxidovým lepidlem s kovovým plnivem. Předmět bude sloužit k výstavním účelům.

Sekce: S2 Restaurování a konzervování uměleckořemeslných děl z kovu

Restaurování novobarokního stříbrného nástolce

Autor: Radek Němec
Ročník: B3
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Šárka Msallamová, Jaroslav Prášil, restaurátor s licencií

Tématem práce je restaurování a konzervování stříbrného nástolce. S využitím výsledků elektronové rastrovacího mikroskopu Hitachi S-450 s EDS analyzátozem bylo určeno složení stříbrné slitiny a použité olovnato-cínové pájky. Pomocí infračervené spektroskopie byla určena povrchová úprava předmětu. Ze stříbrného nástolce byla odstraněna nevhodně použitá olověno - cínová pájka pomocí rydel, šábrů a ruční frézy. Zbytky pájky byly odstraněny v roztoku kyseliny chlorovodíkové. Spoje byly následně spájeny stříbrnou pájkou a retušovány cizelováním. Předmět byl konzervován lakem Paraloid B32 a byl navržen vhodný ochranný režim, který odpovídá dalšímu využití stříbrného nástolce.

Sekce: S2 Restaurování a konzervování uměleckořemeslných děl z kovu

Restaurování litinových dveří

Autor: Václav Nikendey
Ročník: B3
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jiří Děd, CSc., Jaroslav Prášil, restaurátor s licenci

Předmětem restaurování byly litinové dveře hrobky Františka Marka umístěné na hřbitově příslušícímu chrámu Narození Panny Marie v Turnově. Předmět byl podroben restaurátorskému průzkumu, kterým byla zjištěna technologie výroby restaurovaného předmětu a možných zdobných technik na něm použitých. Z odebraných vzorků byla pomocí skenovacího elektronového mikroskopu HITACHI S-450 s EDS analyzátozem KEVEX DELTA 5 provedena kvantitativní analýza složení použitého materiálu. Metalografickým rozbohem materiálu byla určena struktura slitiny. Ze segmentu původní povrchové úpravy bylo následně zjištěno složení a rozvrstvení jednotlivých vrstev původního nátěrového systému. Samotný restaurátorský zákrok byl proveden otryskáním povrchu předmětu, který vedl k odstranění korozních produktů. Pro novou povrchovou úpravu byl zvolen současný nátěrový systém s ohledem na umístění a užití restaurovaného předmětu se zachováním barevnosti původního nátěrového systému.

Sekce: S2 Restaurování a konzervování uměleckořemeslných děl z kovu

Měření korozní rychlosti ve znečištěné atmosféře

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

Korozní agresivita atmosféry na kovové památky je často hodnocena jen na základě sledování relativní vlhkosti, teploty a méně často též obsahu agresivních látek v atmosféře. Resistometrická metoda umožňuje téměř kontinuální měření korozní rychlosti kovu pomocí odporových sond vyrobených přímo ze sledovaného kovu. Možnost posuzování korozní agresivity na kovový předmět je omezena, pokud je resistometrické čidlo vyrobeno z jiného kovu. Citlivost reakce každého kovu a různé polutanty je odlišná. Železné, měděné a mosazné senzory byly exponovány ve vlhké atmosféře znečištěné různými polutanty. Práce hodnotí vliv přítomnosti různých polutantů na odezvu železa, mědi a mosazi exponovaných ve formě resistometrických čidel.

Sekce: S2 Restaurování a konzervování uměleckořemeslných děl z kovu

Restaurování ramene závěsného lustru z druhé poloviny 19. století

Autor: Ludmila Vaňková - Svozilová
Ročník: B3
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Alena Michalcová; Jaroslav Prášil, restaurátor s licenci

Obsahem práce je analýza stavu a provedení restaurátorského zásahu na rameni neúplného závěsného zlaceného lustru ze zinku a mosazi, který pochází z inventáře kostela Nanebevzetí Panny Marie v Černošicích (odhadované stáří 200 let). Práce popisuje demontáž lustru a jeho ramene, postup při čištění objektu od nečistot (např. prach, cínolověné pájka, asphalt, maltové směsi) a sejmutí nepůvodních polychromií. Restaurátorský zásah popisuje techniky tmelení trhlin v zinkové slitině pomocí epoxidů s aditivy, doplňování chybějících dílů pomocí epoxidových odlitků a techniku nepravého zlacení pomocí metalu. Práce obsahuje ochranný režim památky, rozpočet a kalkulace restaurátorského zásahu. Práce dále obsahuje: Grafy EDS mosazi, zinkové slitiny z přelomu 19. a 20. století, vzorky povrchové úpravy pravého zlacení a zlacení metalem. Metalografický výbrus: trhliny a póry v zinkové slitině, intermetalické fáze železa v zinkové slitině. Obrazovou fotodokumentaci jednotlivých restauračních zásahů a postupů.

Sekce: S2 Restaurování a konzervování uměleckořemeslných děl z kovu

Restaurování zinkové sošky Erota

Autor: Petra Witoszková
Ročník: B3
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jiří Děd, CSc., Jaroslav Prášil, restaurátor s licenci

Zrestaurováno bylo osvětlovadlo ve tvaru stojícího Erota. Z výsledků elektronového rastrovacího mikroskopu HITACHI S-450 s EDS analyzátozem bylo zjištěno, že Eros je z velmi čistého zinku, s minimální přísadou olova a železa. Na vzorku z křídla byla analýzou metalografického výbrusu prokázána dvojí vrstva pokovení. Předmět byl nejprve poměděn a následně pomosazen.

Byly domodelovány chybějící části Erota. Do lomových ploch (špiček křídel a prstů) byly vyvrtané otvory, do kterých byl vsazen a zalepen epoxidovým dvousložkovým lepidlem zinkový drátek. Následně byly ručně vymodelované chybějící dílky, taktéž z epoxidového lepidla. Na konec byl celý povrch sjednocen v souladu se žádostí majitele. K retuši byla použita olejová barva.

Byl navržen ochranný režim památky, který vyhovuje podmínkám jejího dalšího použití.

Sekce : Konzervování a restaurování anorganických nekovových materiálů

Restaurování užitkového skla z období 18. – 20. století ve Východočeském muzeu Pardubice

Autor: Radka Bukovjanová
Ročník: B4
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Václava Siglová, licencovaný restaurátor

Předmětem práce bylo restaurování osmi neúplných nádob z dutého skla. Restaurátorské práce byly provedeny ve spolupráci s Východočeským muzeem v Pardubicích. Restaurovaná obalová skla z 20. let minulého století byla v dobrém stavu, většinou beze známek koroze. Lahve z tohoto období byly pravděpodobně vyrobeny na poloautomatech typu Schiller nebo Wolf Patent B lisofoukacím způsobem, nebo na prvním automatu Owens. Stroj Owens měl zautomatizované nabírání skloviny do formy, což zaručovalo jednotnou váhu vyráběných obalů. Obalová skla se vyznačují zelenou nebo hnědou barvou a hlavními barvicími ionty jsou Fe a Cr. Dalším typem nalezeného skla z konce 18. a počátku 19. století (tzv. křídová nebo křišťálová skla), byla určena k servírování nápojů. Také tato skla jsou pravděpodobně české výroby. Vykazují významné stopy koroze. Skla jsou matná nebo pokrytá iridiscentní vrstvičkou. Jednou z příčin koroze nápojových skel vyráběných v Čechách je vysoký obsah taviva K_2O na úkor SiO_2 . Zrestaurovaná skla jsou zajímavým průhledem do designu a kultury stolování v Čechách.

Sekce : Konzervování a restaurování anorganických nekovových materiálů

Restaurování historické vitráže - vzorníku

Autor: Petra Dudková
Ročník: B4
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Petr Coufal, licencovaný restaurátor

Cílem práce bylo restaurování vitráže vyrobené kolem roku 1920, která sloužila jako vzorník dílny Jiříčka – Coufal. Na této vitráži je cenný přehled technických řešení i estetických hodnot prvorepublikové doby.

Dlouhým, bezmála devadesátiletým používáním a skladováním byl vzorník značně poškozen. Olověná síť byla zdeformovaná a potrhána. Skleněné díly vitráže byly na více místech popraskané, avšak samotná skla nebyla zkorodována. Poškozená olověná síť se odstranila, skla se vyčistila od usazených nečistot. Popraskané díly se nahradila skly z depozitáře dílny Jiříčka – Coufal a skla se nakonec zasadila do nové olověné sítě.

Sekce : Konzervování a restaurování anorganických nekovových materiálů

Restaurování kameninového džbánu z oblasti Westerwaldu

Autor: Kolajová Radka
Ročník: B4
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Magdalena Velebilová, Ing. Alexandra Kloužková, CSc.

Restaurovaný džbán je z velmi pozdního období produkce v oblasti Westerwaldu, pravděpodobně z první třetiny 19. století, dnes je umístěn v soukromé sbírce. Jedná se o porýnskou kameninu se solnou glazurou s charakteristickým kobaltovým dekorem a cínovým víkem. Džbán byl velmi neodborně slepen. V rámci restaurátorského zásahu bylo původní lepidlo odstraněno, střepy očištěny a poté opět slepeny. Chybějící části byly doplněny a dobarveny. Analýza střepové hmoty (rtg. fluorescence a difrakce) prokázala přítomnost mullitu a tak byl potvrzen předpoklad relativně vysoce pálené střepové hmoty. U kovového víka byla provedena analýza korozních produktů elektronovou mikrosondou.

Sekce : Konzervování a restaurování anorganických nekovových materiálů

Restaurování amfory z pozdního eneolitu

Autor: Kamila Máchová
Ročník: B4
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Zdeňka Benedikovičová

Předmětem mé práce bylo restaurování amfory z konce staršího eneolitu (od 3800 př. Kr. až do 3350 př. Kr.), jednalo se o bolerázský stupeň kultury badenské. Místem nálezu byl kostrový hrob v Bubenči na Praze 6. Amfora byla ve formě střepů a již dříve byla restaurována. Vzhledem ke špatnému stavu byla nádoba vzata z depozitáře k opravě. K rozpadu nádoby došlo především použitím nesprávného lepidla ke slepení střepů. Analýza (Raman-spektroskopie) vzorku lepidla prokázala, že se jedná o kostní klíh. Z lehce drobných střepů byly také odebrány vzorky na analýzy (XRD, XRF), které prokázaly, že střepová hmota byla tvořena z : křemene, mikroklinu, sericitu, muskovitu a železitých a fosforečných sloučenin, a že teplota výpalu byla nižší než 1000 °C. Část amfory se zachovala ve stavu po prvním restaurování. Vzhledem k tomu, že tato část byla slepená z menších střepů a její převážná část byla doplněna sádkou, která byla malovaná černou barvou, se nepřešlo k jejímu rozebrání. Po vyhledání zbylých střepů, byla amfora slepena do původního tvaru. K lepení bylo použito lepidlo Dispercoll D2. Chybějící střepy byly doplněny sádkou. Amforu se podařilo úspěšně zrestaurovat. Uložením ve vhodných podmínkách, snížíme stárnu procesy nádoby.

Sekce : Konzervování a restaurování anorganických nekovových materiálů

Restaurování historické vitráže s florální malbou

Autor: Eliška Trochová
Ročník: B4
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Petr Novotný

Předmětem restaurování je vitráž přibližně z první poloviny 19. století. Vzhledem k tomu, že byla nalezena na půdě soukromého domu, nelze zjistit bližší dataci. Vitráž je zhotovena tradiční vitrážovou technikou, tedy zasazením skleněných segmentů do olověných H profilů. Je tvořena ústřední obdélníkovou částí, která se nedochovala. Kolem ústředního motivu probíhá bordura tvořená původně 4 segmenty s motivem řetězu. Tato bordura je orámována silnějším pásem skla tvořeným pravidelnými kosočtverci z rubínových a fialových skel s abstraktní malbou florálního motivu. Vitráž byla znečištěna pevnými polutanty, olovo bylo na mnoha místech zdeformované a zteřelé. Kromě ústředního motivu chyběla tři skla z bordury a další dvě skla z krajové oblasti. Nejprve bylo nutné vyjmout vitráž z původní olověné sítě, skla šetrně vyčistit a poškozená nebo chybějící skla doplnit odpovídajícími replikami. Následně byla vitráž vložena do nových olověných H profilů.

Sekce : Konzervování a restaurování anorganických nekovových materiálů

Restaurování neolitické nádoby

Autor: Barbora Valentová
Ročník: B4
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Zdena Benedikovičová, Ing. Alexandra Kloužková, CSc.

Náplní práce je restaurování již v minulosti restaurované polokulovité neolitické nádoby s pupky, z nálezů Jíry J. Antonína v Praze Vokovicích. Jedná se zde o příklad postupu restaurátorské a konzervátorské práce po nedokonalém předchozím úkonu s negativními následky.

Nádoba se v důsledku použití nevhodného adheziva a pravděpodobně i nevhodných podmínek uložení v depozitáři rozpadla. Při vyhledávání nádoby bylo zjištěno, že došlo k expanzi střepové hmoty (rtg difrakce potvrdila, že předmět je tvořen relativně nízkopálenou střepovou hmotou). Z tohoto důvodu byly původní výplně nahrazeny novými a část původních doplnění byla uchována jako dokumentace předešlých zásahů. Dále byly odstraněny barevně retušované sádrové vrstvy, které překrývaly originální střepy.

Po slepení a doplnění novými výplněmi byla u neolitické nádoby z důvodu jejího umístění do expozice přístupné veřejnosti provedena na doplňcích barevná retuš reverzibilním materiálem.

Sekce : Konzervování a restaurování anorganických nekovových materiálů

Restaurování skleněných komponent na Relikviáři Panny Marie

Autor: Bc. Šárka Jonášová DiS.
Ročník: B1
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Dr. Ing. Dana Rohanová

Obrazový relikviář Panny Marie byl zhotoven v roce 1780 jeptiškami z ženského kláštera Magdalenitek ze Záhořan u Mostu. Cílem práce byl průzkum skleněných doplňků jak z pohledu degradace, tak i chemického složení. Na základě získaných znalostí byl navržen restaurátorský záměr a provedeno restaurování poškozených skleněných doplňků.

Relikviář je symbiózou mnoha materiálů – kovové drátky z mosazi, železa a mědi, na nichž jsou navlečeny skleněné korálky. Dále se zde vyskytuje textilie, vosk, papír, pergamen a dřevo. Korálky jsou zastoupeny v mnoha tvarových a materiálových variantách. Jedná se především o sekané (zelené, červené, bílé a černé), kulaté (červené a bílé, které jsou pokryty perletí) korálky a ručně broušené skleněné kameny. Tyto kameny jsou zhotoveny z čirého skla a neobvykle se skládají ze dvou kusů. Horní a spodní část šatonu jsou slepeny lepidlem s přídavkem pigmentu organického původu. Přidané barvivo mělo navozovat iluzi barevné skloviny. Ramanovou spektroskopií bylo zjištěno, že broušené modré a červené kameny v okolí voskové Panny Marie jsou také pouze skleněnými korálky.

Sekce : Konzervování a restaurování anorganických nekovových materiálů

Vliv solí a jejich imobilizace v anorganických porézních materiálech

Autor: Markéta Holubová
Ročník: M2
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Doc. Ing. Petr Kotlík, CSc.

Vzorky opuky a pískovce z hořické oblasti byly kontaminovány vybranými vodorozpustnými solemi – 10 % roztoky síranu sodného, dusičnanu sodného a chloridu sodného. Zasolené vzorky budou impregnovány komerčně vyráběnými konsolidanty, jejichž účinnost bude porovnávána z hlediska schopnosti imobilizace solí ve vzorku. Výsledky budou vyjádřeny jako hmotnostní procento aniontu solí v odsolovací vodné lázni ku obsahu aniontu uměle do vzorku daného.

Sekce : Konzervování a restaurování anorganických nekovových materiálů

Vliv přísad na vlastnosti čerstvé malty z románského cementu

Autor: Bc. Adéla Peterová
Ročník: M2
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Kateřina Doubravová, Ph. D.

V nedávné době se na našem trhu objevil románský cement od firmy Vicat. Ve své práci jsem se věnovala studiu vlastností čerstvé malty z tohoto cementu. Sledovala jsem vliv dvou přísad na vlastnosti čerstvé malty. Jednalo se o polymerní přísadu Vinnapas RE 545Z a vápenný hydrát. Sledovala jsem zejména vodní součinitel, rychlost tuhnutí a objemovou hmotnost čerstvé malty. Kromě vlivu přísad jsem také pozorovala vliv teploty a množství záměsové vody na rychlost tuhnutí malty.

Zjistila jsem, že polymerní přísada Vinnapas RE 545Z zpomaluje tuhnutí cementu. Dále jsem zjistila, že vlastnosti čerstvé malty ze směsi cement – vápenný hydrát závisí na hmotnostním poměru látek. Pokud je poměr cement ku vápennému hydrátu alespoň 3 : 7, směs tuhne stejnou rychlostí jako malta ze samotného cementu. S nižším obsahem cementu se více prosazují vlastnosti typické pro čerstvou maltu z vápenného hydrátu. V současné době práce pokračuje studiem vlastností zatvrdlé malty.

Sekce : Konzervování a restaurování anorganických nekovových materiálů

Charakteristika střepové hmoty mondidolů

Autor: Petra Zemenová
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Alexandra Kloužková, CSc.

Mondidoly jsou keramické předměty, které mají tvar měsícovitého břevna s rohy. Nazývají se měsíční symboly nebo býčí rohy a nejstarší jsou datovány do doby bronzové. Jejich význam není dosud objasněn nejčastěji se předpokládá praktické využití jako ohništní kozlík, popř. podhlavník. Někdy se zvažuje pouze význam symbolický - symbol býka a plodnosti, měsíce a slunce, ohně.

Cílem práce bylo především stanovit chemické a mineralogické složení (použitím metod XRD, XRF, IČ, Raman. spektroskopie) mondidolů z doby bronzové vyjmutých z několika různě vzdálených nalezišť a v souvislosti s tím zvážit, zda byly použity podobné surovinové zdroje a jaké teploty mohly být vystaveny resp. zda byly před použitím vypáleny. U jednoho předmětu z analyzovaného souboru bylo prokázáno, že středová část byla podrobena expozicím na vyšší teploty oproti okrajovým částem, u kterých byly identifikovány pozůstatky tuhování. Zajímavostí dalšího mondidolu je rovněž použití organického ostřiva ve formě kousků dřeva.

Sekce : Konzervování a restaurování organických materiálů

Restaurování rukopisu z 15. století napadeného plísni

Autor: Bc. Marie Benešová
Ročník: M1
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Dr. Ing. Michal Ďurovič

Cílem této práce bylo zrestaurování rukopisu z 15. století technikou „in situ“. Knižní blok byl napaden plísní, kdy došlo ke ztrátě až 1/3 folia. Okraje těchto ztrát byly velice křehké a při každé manipulaci docházelo k uvolňování fragmentů, obsahujících původní text. Bylo tedy nutné nalézt vhodný způsob jak zajistit tyto snadno poškoditelné okraje a poté navrhnout postup vlastního restaurování celého knižního bloku.

Sekce : Konzervování a restaurování organických materiálů

Restaurování hasičských uniforem

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

Restaurované uniformy pocházejí z roku 1938 a jsou prvními uniformami Sboru dobrovolných hasičů v Příčovech. Pracovní uniforma byla silně znečištěna, na místech, kde se nacházejí kovové knoflíky či háčky byly skvrny od rzi, tkanina byla v malé míře mechanicky poškozená. Byl proveden historický a textilně technologický průzkum, identifikace vláken a identifikace kovových materiálů. Na základě výsledků těchto průzkumů byl navržen postup restaurování. Byla zabezpečena mechanicky poškozená místa a odstraněny nečistoty, které by mohly dále degradovat materiál. Dále byly zakonzervovány zkorodované kovové části uniforem (knoflíky a háčky).

Přáním zadavatele bylo zrestaurované uniformy vystavit a tak podstatnou součástí zásahu byla také výroba figurín k jejich vystavení.

Sekce : Konzervování a restaurování organických materiálů

Bursa na kalich

Autor: Ing. Jindřiška Drozenová
Ročník: B4
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Dorothea Hodková

Předmětem této práce bylo restaurování bursy na kalich z majetku Arcibiskupství pražského. Na základě provedeného textilně-technologického průzkumu (vazebný rozbor materiálu, identifikace vláken, analýza port) byl navržen postup restaurování. Restaurátorský zásah zahrnoval dokumentaci, demontáž, čištění, zpevnění poškozených částí podložením a skeletováním a zpětnou montáž.

Sekce : Konzervování a restaurování organických materiálů

Vliv chemických sloučenin na poškození dřeva

Autor: Bc. Kateřina Dvořáková
Ročník: M2
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Irena Kučerová

Tato práce se zabývá vlivem různých chemických sloučenin na poškození dřeva. Impregnační roztoky různých chemických sloučenin jako jsou kyseliny, zásady, oxidační činidla atd., bylo připraveno modelové poškození dřeva kyselou nebo alkalickou hydrolýzou a oxidací. Na těchto vzorcích byly sledovány změny v chemické struktuře pomocí infračervené spektroskopie. Z výsledků experimentu vyplývá, že největší poškození způsobují zásadité roztoky, především dochází k úbytku ligninu ve dřevě, což je ve shodě s literárními údaji. Po aplikaci roztoku síranu železnatého dochází k úbytku celulózy i ligninu. Železnatý kation pravděpodobně působí jako katalyzátor rozkladu. Působením vodného roztoku amoniaku došlo k významnému poklesu hodnoty pH dřeva, kde pravděpodobně v důsledku oxidace vznikají produkty kyselé povahy.

Sekce : Konzervování a restaurování organických materiálů

Reštaurovanie manipulu

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

Manipul (zvláštna ozdobná manžeta) bol zapožičaný z Pražského arcibiskupstva. Pri prevzatí bol predmet značne znečistený, poškodený hlavne po krajoch. Vytkávanie bolo na niekoľkých miestach vydreté, na ozdobnej stuhe bola poškodená základná väzba. Na jednej strane chýbala časť brokátu. Bol prevedený historický a textilno technologický prieskum (mikroskopia a makroskopia vlákien, skúška stálofarebnosti). Na základe výsledkov bol stanovený ďalší postup reštaurovania – demontáž, čistenie jednotlivých častí, výber a príprava pomocných materiálov. Hlavnou náplňou práce bolo vlastné reštaurovanie, ktoré spočívalo v prichytení uvoľnených útkov z rubovej strany, podložení stuhy a brokátu, skeletáži uvoľnených útkov a poškodených častí niťou vyťahanou z krepelíny a prešití poškodenej väzby stuhy. Poškodená časť brokátu bola uzavretá do tzv. sendviča a predmet bol následne zmontovaný do pôvodného stavu. V priebehu práce bola vytvorená kompletná fotodokumentácia a reštaurátorská správa.

Sekce : Konzervování a restaurování organických materiálů

Restaurování štóly

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

Štóra (součást liturgického oděvu) byla zapůjčena z Pražského arcibiskupství a je datována na přelom 19.st. a 20.st.. Předmět byl celkově znečištěn od prachu, místy se objevovaly skvrny od zapuštěných barev a skvrny od plísně. V pravé části se nacházela díra o velikosti 2,5 x 1 cm, po obvodu bylo patrné opotřebení, podšívka byla téměř celá zasažena plísní. Nejvíce poškozeny byly třásně - vytrhané, znečištěné od prachu a pokrčené.

Byl proveden historický a textilně technologický průzkum, identifikace vláken a identifikace kovových materiálů. Na základě výsledků byl navržen postup restaurování.

Postup restaurování: demontáž podšívky a třásní; zkouška stálobarevnosti; čištění jednotlivých dílů; výběr a příprava pomocných materiálů; vlastní restaurování – zajištění uvolněných nití na rubové straně, podložení díry hedvábnou tkaninou a následná skeletáž kladeným stehem nití tažené z krepelíny, částečné podložení běžových třásní tzv. tunýlkem z hedvábné krepelíny, zpětná montáž. Během práce byla vytvořena fotodokumentace a kompletní restaurátorská zpráva.

Sekce : Konzervování a restaurování organických materiálů

Restaurování vlaječky Vzkříšeného Krista

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

Restaurovaný předmět je vlaječka využívaná při velikonoční liturgii. Stav před restaurováním byl velmi špatný. Práce započala důkladnou dokumentací a textilně-technologickým průzkumem. Dále jsem individuálně volila restaurování jednotlivých dílů z různých materiálů. Kovové nitě jsem dala na analýzu, podle níž jsem zvolila způsob čištění. Dřevěný díl jsem očistila tampónky vlhčenými destilovanou vodou. Nejvíce poškozená textilní část vlaječky byla fixována sendvičem a tím celkově zpevněna. Je nutné dodržovat doporučené podmínky pro uložení.

Sekce : Konzervování a restaurování organických materiálů

Restaurování dalmatiky z Arcibiskupství pražského

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

Dalmatika pochází z 2. poloviny 19. století. Je zhotovena z žakárské tkaniny krémové barvy se žlutým květinovým motivem. Celá po obvodu i podélně je zdobená kovovými tkanými portami. Celá dalmatika je vyztužena tuženkou, vypodšívkována a zapínaná na knoflíky s poutky.

Před restaurováním byla silně znečištěna prachovými nečistotami, skvrnami neznámého původu a voskem. Žakárská tkanina byla silně potrhána na PD, podšívka potrhána v průkrčníku a v podpaží. Porty byly pokryty korozními produkty a v kraji místy potrhány.

Mikroskopicky byly identifikovány textilní vlákna. U vláken, které tvoří duši kovového dracounu byla provedena analýza FTIR, zda-li se jedná o vlákno přírodní nebo syntetické. U dracounů byla provedena analýza kovu na elektronové mikrosondě. Dále byly provedeny textilní rozbory materiálů.

Při restaurování byla demontovaná podšívka, následovalo čištění, barvení pomocných materiálů, skeletáž potrhanych částí, oprava port, zhotovení kopie chybějícího knoflíku a zpětná montáž všech částí dalmatiky. Po celou dobu restaurování byla prováděna podrobná fotodokumentace a byla sepsána restaurátorská zpráva.

Restaurování jsem prováděla v akademickém roce 2008/2009 a probíhalo po dobu 5 měsíců.

Sekce : Konzervování a restaurování organických materiálů

Studium degradačních procesů v barevné vrstvě

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

V rámci studia degradačních procesů probíhajících v barevných vrstvách obrazů při jejich stárnutí byl sledován vliv několika vybraných pigmentů na složení degradačních produktů stárnutí, a to především na obsah solí mastných kyselin.

Ke vzniku solí dochází reakcí kationtů kovů, obsažených v pigmentech, s volnými mastnými kyselinami, tvořícími se při štěpných degradačních reakcích triglyceridů. Podmínky, za nichž soli v barevných vrstvách vznikají, však ještě nebyly zcela objasněny.

Protože se při malbě používají spíše kombinace barev, byly v práci sledovány barevné filmy nejen jednotlivých čistých pigmentů (titanové běloby, olověné běloby, měděnky a ultramarínu), ale i jejich směsí. Ve všech případech byly pigmenty míchány s olejovým pojivem ve třech různých koncentracích. Pojivem byl zvolen lněný olej, a to jak tepelně upravený, tak bez dalších úprav. Pro sledování přítomnosti solí mastných kyselin a dalších změn v barevných filmech byla použita infračervená spektroskopie.

Sekce : Konzervování a restaurování organických materiálů

Studium stability textilních vláken po dezinfekčním zásahu

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

Přítomnost mikroorganismů v archeologickém a hrobovém textilu je neustále řešeným tématem mnoha setkání a diskuzí. Je otázkou, zda jsou mikroorganismy opravdu schopny dlouhodobě přežívat v daných klimatických podmínkách, jak moc jsou nebezpečné a jak je lze účinně odstranit bez poškození stavu textilie a zdraví konzervátorů.

Předmětem této práce je tedy nalézt výhody a nevýhody různých typů dezinfekčních prostředků a posoudit stabilitu textilních vláken po jejich zásahu.

Sekce : Konzervování a restaurování organických materiálů

Vliv amonných solí na vlastnosti dřeva

Autor: Bc. Eva Štemberová
Ročník: M1
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Irena Kučerová, Ph.D.

Amonné soli, které se (síran a fosforečnany) dříve používaly k protipožární ochraně konstrukčního dřeva historických budov, způsobují jeho poškození projevující se chlupacením povrchu dřeva. Proto byl v této práci hodnocen vliv amonných solí (síranu, chloridu, hydrogenfosforečnanu, dihydrogenfosforečnanu amonného) na poškození dřeva za různých expozičních podmínek. Vliv solí byl sledován na základě změny hodnoty pH dřeva, úbytku hmotnosti vzorků a chemických změn v polymerech dřeva zjištěných pomocí infračervené spektrometrie. Ke zjišťování změn vlastností dřeva je využito dřevo ošetřené metodou vakuové impregnace 5% vodnými roztoky solí a stárnuté v rozdílných podmínkách – vlhké stárnutí (teplota 60 °C a relativní vlhkost vzduchu 80%) a suché stárnutí (teplota 103 °C).

Sekce : Konzervování a restaurování organických materiálů

Restaurování manipulu

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

Manipul (součást liturgického oděvu) byl zapůjčen z Pražského arcibiskupství a je datován na 2. polovinu 19. st.

Vrchní hedvábnická tkanina byla značně poškozená, zejména ve středové části manipulu, která byla z tohoto důvodu druhotně překrytá novou tkaninou. V některých částech chyběly útkové a místy i osnovní nitě za vzniku otvorů s roztřepenými okraji. Vrchní i podšívková tkanina byla celoplošně mírně znečištěná díky dlouhodobému užívání.

Byl proveden historický a textilně technologický průzkum, identifikace vláken a identifikace kovových materiálů. Na základě výsledků byl navržen postup restaurování.

Postup restaurování zahrnoval celkovou demontáž, zkoušku stálobarevnosti, čištění jednotlivých dílů, výběr a přípravu pomocných materiálů. Dále bylo nutné zajistit vrchní tkaninu a to technikou tzv. sendviče (skeletáž kladeným stehem nití tažené z krepelíny) a na závěr zpětná montáž. Během práce byla vytvořena fotodokumentace a kompletní restaurátorská zpráva.

Sekce : Konzervování a restaurování organických materiálů

Využití perličkové celulózy pro čištění papíru

Autor: Bc. Petra Urbanová
Ročník: M1
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Petra Vávrová

Práce se zabývá využitím perlové celulózy v restaurování pro čištění historického papíru. Výsledkem výzkumu by mělo být vědecky podložené doporučení či nedoporučení používat perlovou celulózu pro restaurátorské účely. Perlová celulóza (PERLOZA®) je čistá regenerovaná celulóza o stupni polymerace 300-500. Jedná se o látku, jejíž částice jsou dokonale kulovité (průměr 50 – 500 µm) a vysoce porézní. Její vynikající čistící účinky vychází ze schopnosti perliček adsorbovat do sebe nečistoty. Využití perlové celulózy pro čištění papíru by mělo být výhodné z mnoha důvodů. Účinnost čištění by mohla být mnohem vyšší oproti jiným tradičním metodám. Přitom by se jednalo o metodu šetrnou k čištěnému materiálu, neboť se provádí suchou cestou, tudíž nedojde k nadměrnému provlhnutí materiálu, což je pro historický papír mnohdy žádoucí. Zároveň se jedná o materiál na bázi celulózy, čili na stejné chemické bázi jako papír. Je ovšem třeba najít způsoby, jakými by se dala čistící látka ze struktury papíru neúčinněji odstranit, a zjistit, zda by její aplikace nemohla nastartovat či urychlit degradaci papíru v budoucnosti.

Sekce : Konzervování a restaurování organických materiálů

Albuminové filmy

Autor: Bc. Lenka Zamrazilová
Ročník: M2
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Doc. Ing. Petr Kotlík, CSC.

Albumin byl ve druhé polovině 19. století používán jako nosič a pojivo světlocitlivých solí. Díky jednoduché přípravě a velmi dobré dostupnosti surovin se stal nejpoužívanějším druhem fotografického materiálu (ve formě albuminové fotografie). Albumin je vlastně směs, která vzniká smíšením vaječného bílku s halogenidovou solí.

Prezentovaná práce se zabývá přípravou albuminového filmu na skle za účelem zjištění chování albuminu, používaného pro přípravu albuminových fotografií, na skleněné podložce a vlastností vzniklého albuminového filmu.

Sekce : Informatika a chemie

Triviální názvy v organické chemii – webový portál

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

Jedním z problémů, které řeší studenti chemie na všech úrovních, je orientace ve spletitostech názvosloví organické chemie. Speciální kapitolou je pak množství triviálních názvů, které jsou stále hojně používané. Prezentovaný portál se snaží pomoci uživatelům s orientací v této problematice.

Portál obsahuje triviální a systematické názvy v češtině, angličtině a slovenštině pro víc než 100 nejběžnějších organických sloučenin. Kromě abecedního seznamu názvů jsou látky rozříděny do skupin podle chemické povahy (aromáty, karboxylové kyseliny apod.). Stránky jednotlivých sloučenin obsahují také obrázek chemické struktury a odkaz na další informace o dané sloučenině do encyklopedie Wikipedia.

Data shromážděná při práci na portálu byla využita při zpracování elektronických výukových materiálů pro střední školy, které jsou dostupné na stránce <http://vydavatelstvi.vscht.cz/echo>.

Sekce : Informatika a chemie

XSLT 2.0 Tutorial

Autor: Ctibor Škuta
Ročník: M1
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Ing. Miloslav Nič, Ph.D.

Výsledkem mé práce je výukový portál programovacího jazyka XSLT 2.0 (*eXtensible Stylesheet Language Transformations*). Zdrojová data jsou uložena v XML souborech, která jsou za pomoci XSLT a Pythonu transformována do HTML stránek. Příklady jsou členěny do kapitol podle typu zaměření. Každý z nich obsahuje stručný popis a programovací kód v podobě zdrojových dat, XSLT šablony a výstupu transformace. Syntaxe je barevně odlišena pro lepší přehlednost. Z použitých XSLT 2.0 instrukcí a XPath 2.0 funkcí vedou hypertextové odkazy do jejich referencí, které jsou také součástí tutoriálu. Tento materiál by měl být dostatečným informačním zdrojem při výuce jazyka XSLT 2.0. V blízké budoucnosti by se měl stát součástí Zvon.org, předního světového serveru o XML technologiích.

Sekce : Informatika a chemie

Transformácia XML dát Chemických listov

Autor: Jaroslav Skalický
Ročník: B2
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Ing. Jiří Jiráť, Ph.D.

Práce si klade za cíl upravit strukturu dat (tie sú tvorené obsahmi jednotlivých čísiel časopisu Chemické listy od roku 1997, uložené v XML formáte a obsahujú informácie o článkoch ako názov, autori a ich príslušnosť k vedeckým inštitúciám, abstrakt a odkaz k plnému textu), ktorá nevyhovuje novým požiadavkám - jednoduchá generácia registrov autorov, článkov, vyhľadávanie. Táto transformácia je hlavne zameraná na elementy obsahujúce mená autorov a ich príslušnosti. Postup práce zahŕňa analýzu vstupných dát (vytvorenie validačnej schémy, ručnú úpravu objavených výnimiek, predbežnú strojovú úpravu niektorých špecifických tvarov), návrh výstupného formátu, vytvorenie transformačnej šablóny, strojovú a vizuálnu kontrolu správnosti výstupu a generáciu ukázkových registrov. Použité technológie: XSLT 2.0 na transformáciu, Relax NG na vytvorenie validačnej schémy a unixové shell skripty.

Sekce : Informatika a chemie

Elektronické studijní opory pro předměty "Obecná a anorganická chemie I, II" – periodická tabulka prvků

Autor: Pavla Nováková
Ročník: M1
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Doc. Ing. Jiří Jiráť, Ph.D.

Elektronické studijní opory pro předměty "Obecná a anorganická chemie I, II" – periodická tabulka prvků jsou součástí projektu Koordinované studijní opory pro studium základních chemických předmětů na středních školách v rámci projektu „Jednotný programový dokument pro Cíl 3 regionu NUTS 2 hlavní město Praha (JPD 3.1)“, jednoho ze strukturálních fondů Evropské unie. Cílem práce je vytvoření elektronických studijních materiálů pro procvičování znalostí periodické tabulky prvků. Základní data byla zpracována XML technologií a XSLT transformací byla převedena do HTML. Hlavní technologií byl JavaScript, jímž byly naprogramovány klíčové ovladače.

Sekce : Informatika a chemie

Databáze citací Čtvrté hodnotící zprávy IPCC

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

Mezivládní panel pro změny klimatu (IPCC) je seskupení vědců z celého světa zabývajících se zejména objektivním poznáním podstaty změny klimatu a hodnocením jejích environmentálních a sociálních důsledků. Hlavním výstupem panelu jsou hodnotící zprávy, které vycházejí v několikaletých intervalech. V roce 2007 vydal panel svoji čtvrtou hodnotící zprávu, založenou na desítkách tisíc odkazů do odborné literatury. Toto citační bohatství je bohužel velmi obtížně využitelné, protože zpráva nedodrжуje žádná jednotná pravidla citování literatury a jednotlivé bibliografické záznamy mají často závažné formální nedostatky. Odkázané zdroje tedy může vyhledat člověk, záznamy jsou však nevhodné pro počítačové zpracování a další automatické vytěžování. V rámci předložené práce je vytvářena databáze všech citací a software pro přístup k těmto citacím. Systém bude zpřístupněn světové veřejnosti v létě roku 2010 včetně statistického zpracování podkladů, jako např. zastoupení časopisů a autorů mezi citačními zdroji.

Sekce : Informatika a chemie

Formát CDXML – struktura, použití a konverze

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

Předkládaná práce se zabývá popisem formátu CDXML a jeho implementací do programu BKChem. CDXML je XML podoba binárního CDX formátu, tedy výchozího formátu profesionálního chemického kreslicího programu ChemDraw. Práce obsahuje detailní popis struktury formátu CDXML v podobě textu a přehledných tabulek. Export a import CDXML formátu je realizován jako zásuvný modul v BKChemu naprogramovaný v jazyce Python. S pomocí tohoto modulu je BKChem schopen načítat a ukládat atomy, vazby, šipky, plus, text včetně fontů, a barvy u všech uvedených prvků.

Sekce : Informatika a chemie

Testování softwaru pro rozpoznávání chemických struktur

Autor: Bc. Tomáš Müller
Ročník: M1
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Mgr. Daniel Svozil, Ph.D.

Cílem práce je vytvořit reprezentativní testovací množinu 2D struktur organických sloučenin o různé komplexitě a kvalitě a následně ji použít pro zhodnocení kvality dostupných softwarových systémů pro Optical Structure Recognition (OSR). V práci je podrobně popsáno získávání vzorců sloučenin z chemického portálu Chemspider, generování 2D strukturních vzorců a jejich převod do formátu vhodného pro OSR, aplikace freeware programu OSRA na jejich zpětné rozpoznávání, získávání a analyzování výstupu, ověřování správnosti a konečné vyhodnocení. Na závěr práce je popsána modelová situace simulující reálné požadavky na program OSRA. V rámci ní OSRA zpracovává několik kompletních vědeckých článků a pokouší se v nich nalézt, rozpoznat a uložit chemické struktury. Z takto uložených struktur je poté vygenerována jejich 2D reprezentace, která je zpětně srovnána se strukturami v původních zdrojových článcích.

Sekce : Informatika a chemie

Knihovna pro jazyk Python zpřístupňující veřejně dostupné databáze chemických struktur

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

Výsledkem předkládané práce je knihovna pro jazyk Python umožňující snadnou komunikaci se třemi veřejně dostupnými chemickými databázemi ChemSpider, PubChem a Chemistry WebBook. Na základě této knihovny pak byly vytvořeny dva efektivní pluginy do programu BKChem, které převádí název chemické látky na její strukturu a naopak. Použití tří veřejně dostupných databází přináší do výsledků různorodost a umožňuje vybrat si potřebnou konvenci v oblasti názvosloví nebo vykreslování struktur.

Sekce : Informatika a chemie

Práce s programem IJC

Autor: Milan Voršilák
Ročník: B3
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Ing. Jiří Jirát, Ph.D.

Projekt je zaměřen na seznámení se s programem InstantJChem, s jeho obsluhou, vlastnostmi a využitím, což je dále převedeno do animací, které funkcionalitu programu demonstrují. Další částí práce je upravení uživatelské příručky.

IJC je databázový produkt firmy Informatics Matters, který je složen z programů firmy Chemaxon. Po vizuální stránce je postaven na NetBeans od společnosti Sun, což naznačuje, že je psán v Javě.

Jako každá databáze, slouží k uchovávání a vyhledávání dat a je specializovaný na chemické látky, popř. chemické reakce. Dovoluje vyhledávání podle struktury, vzorců a dalších charakteristik chemických látek. Je navrhován tak, aby ho bylo snadné rozšířit od další části, třeba i od jiných tvůrců. Není svázán jen s jedním databázovým serverem.