

Seznam sekcí a složení komisí

- Sekce: **Anorganická chemie**
posluchárna A 211, 9:00 hod.
- Komise:
- Předseda: Doc. Ing. Olga Smrčková, CSc.
- Členové: Ivan Jirka, CSc. (ÚFCH-JH AV ČR)
Ing. Pavla Nekvindová, Ph.D.
RNDr. Petr Holzhauser
Ing. Irena Hoskovcová, CSc. (organizační tajemník)
- Sekce: **Anorganická technologie I**
posluchárna A25, 9.00 hod.
- Komise:
- Předseda: Prof. Dr. Ing. Josef Krýsa
- Členové: Ing. Ivona Sedlářová, Ph.D.
Ing. Roman Kodým
Ing. Zuzana Cílová, Ph.D.
Ing. Miloslav Lhotka, Ph.D. (organizační tajemník)
- Sekce: **Anorganická technologie II**
posluchárna A35, 9.00 hod.
- Komise:
- Předseda: Doc. Ing. Daria Schrötterová, CSc.
- Členové: Dr. Ing. Vlastimil Fíla
Ing. Martin Zlámal
Ing. Martin Paidar, Ph.D.
Ing. David Gabriš (organizační tajemník)
- Sekce: **Kovové materiály I**
hlavní chodba ústavu 106, 8.30 hod.
- Komise:
- Předseda: Prof. Ing. Pavel Novák, CSc.
- Členové: Doc. Ing. Jitka Jandová, CSc.
Doc. Ing. Jaroslav Bystrianský, CSc.
Ing. Milan Kouřil, Ph.D.
Ing. Petr Dvořák, Ph.D.
Ing. Jan Šerák, Ph.D. (organizační tajemník)
- Sekce: **Kovové materiály II**
hlavní chodba ústavu 106, 8.30 hod.
- Komise:
- Předseda: Prof. Ing. Pavel Lejček, DrSc.
- Členové: Ing. Jan Šerák, Ph.D.
Ing. Pavel Novák, Ph.D.
Ing. Michal Novák
Ing. Alena Michalcová
Ing. Jan Šerák, Ph.D. (organizační tajemník)

Sekce: **Anorganické nekovové materiály I (posterová)
posluchárna A02, 9.00 hod.**

Komise:

Předseda: Prof. Ing. Josef Matoušek, DrSc

Členové: Ing. Jan Macháček, Ph.D.

Ing. František Novotný, CSc.

Ing. Eva Gregorová, CSc. (organizační tajemník)

Sekce: **Anorganické nekovové materiály II (posterová)
posluchárna A02, 9.00 hod.**

Komise:

Předseda: Prof. Ing. Lubomír Němec, DrSc

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

Doc. Ing. Stanislav Kasa, CSc

Ing. Miroslav Rada, CSc. (organizační tajemník)

Sekce: **Aplikovaná mineralogie
posluchárna P09 (108), 9.00 hod.**

Komise:

Předseda: Doc. Ing. František Kovanda, CSc.

Členové: Ing. Barbora Doušová, CSc.

RNDr. Tomáš Grygar, CSc. (ÚACH AVČR)

Ing. Vladimír Machovič, CSc.

Ing. Lenka Herzogová (organizační tajemník)

Sekce: **Syntéza, výroba a využití léčiv (přednášková)
posluchárna A31, 9.00 hod.**

Komise:

Předseda: Prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc. (108)

Členové: RNDr. Alexandr Jegorov, CSc. (Teva-Galena, Opava)

Doc. RNDr. Josef Hájíček, CSc. (Zentiva Praha)

Dr. Ing. Michal Hušák (108)

Ing. Alexandra Kolašínová (ISPE)

Ing. Jan Patera (111) (organizační tajemník)

Sekce: **Organická chemie M 1
posluchárna A11, 9:00 hod.**

Komise:

Předseda: Prof. Ing. Ivan Stibor, CSc.

Členové: Doc. Ing. Igor Linhart, CSc.

Ing. Petr Holý, CSc. (ÚOCHB AV ČR)

Ing. Miroslav Špaček, MBA (Cayman Pharma)

Ing. Hanuš Slavík (Hexion)

Ing. Michal Kohout (organizační tajemník)

- Sekce: **Organická chemie M 2**
posluchárna A278c, 9:00 hod.
- Komise:
- Předseda: Prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.
- Členové: Ing. Radek Cibulka, Ph.D.
RNDr. Jan Kotek, Ph.D. (PřF UK)
Ing. Ivan Hlaváček, CSc. (Interpharma Praha)
Ing. Jan Kroupa (Proxim)
Ing. Jan Budka, Ph.D. (organizační tajemník)
- Sekce: **Organická chemie M 3**
posluchárna A250, 9:00 hod.
- Komise:
- Předseda: Prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.
- Členové: Doc. Ing. František Hampl, CSc.
Ing. Tomáš Martinů, Ph.D.
Ing. Rudolf Smrž (Synthon)
Ing. Pavel Šebek, CSc. (Zentiva)
Ing. Roman Keder, Ph.D. (organizační tajemník)
- Sekce: **Organická chemie B 1**
posluchárna A20, 9:00 hod.
- Komise:
- Předseda: Prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.
- Členové: Ing. Václav Kozmík, CSc.
Ing. Hana Kotoučová (PedF UK Praha)
Ing. Martin Káš (Synthon)
Dr. Ing. Markéta Čechová (Lach-Ner)
Ing. Martin Skalický (organizační tajemník)
- Sekce: **Organická chemie B 2**
posluchárna A278e, 9:00 hod.
- Komise:
- Předseda: Doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.
- Členové: Dr. Ing. Jana Hodačová
Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.
Ing. Ivan Veselý, CSc. (Cayman Pharma)
Ing. Václav Šťastný, Ph.D. (Re&D VÚFB)
Ing. Michal Himl (organizační tajemník)
- Sekce: **Syntéza a výroba léčiv**
posluchárna A081a, 9.00 hod.
- Komise:
- Předseda: Doc. Ing. Vratislav Tukač, CSc.
- Členové: Doc. Ing. Petr Kačer, PhD.
Ing. Miroslav Petrisko, CSc.
Ing. Lucie Potůcká
Ing. Jiří Trejbal, PhD. (organizační tajemník)

Sekce: **Organická technologie**
posluchárna A01, 9:00 hod.

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Bohumír Dvořák, CSc.

Členové: Ing. Pavel Čapek, CSc.

Ing. Ladislav Kurc, CSc.

Ing. Jiří Krupka

Ing. Eliška Leitmannová, PhD. (organizační tajemník)

Sekce: **Chemie a technologie polymerů**
posluchárna BS1, 9.00 hod.

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Petr Hron, CSc.

Členové: Doc. Ing. Petr Sysel, CSc.

Doc. Ing. Antonín Kuta, CSc.

Ing. Zdeněk Hrdlička, PhD.

Ing. Jan Merna, PhD.

Ing. Jana Kredatusová (organizační tajemník)

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

Komise:

Předseda: Prof. Ing. Jindřich Leitner, DrSc.

Členové: Doc. Ing. Petr Macháček, CSc.

RNDr. Barbora Dvořánková, PhD. (1.LF UK Praha)

Doc. Ing. Jiří Brožek, CSc. (112)

Ing. Petr Slepíčka, PhD. (organizační tajemník)

Sekce: **Technologie, konzervování a restaurování - kovy**
posluchárna A63, 10:30 hod.

Komise:

Předseda: Prof. Ing. Pavel Novák, CSc.

Členové: Ing. Jiří Děd, CSc. (106)

Ing. Milan Kouřil, PhD. (106)

Ing. Šárka Msallamová (106)

Ing. Alena Michalcová (106)

Ivan Houska (soukromý restaurátor)

Ing. Petra Vávrová (organizační tajemník)

Sekce: **Technologie, konzervování a restaurování - textil, papír**
posluchárna A63, 9:00 hod.

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Petr Kotlík, CSc.

Členové: Ing. Irena Kučerová, PhD. (148)

Ing. Markéta Škrdlantová, PhD. (148)

Ing. Martina Ohlídalová (148)

Dr. Ing. Michal Ďurovič (Národní archiv)

Dorothea Hodková (restaurátorka textilu)

Ing. Petra Vávrová (organizační tajemník)

Sekce: **Technologie, konzervování a restaurování - sklo, keramika, stavební materiály**
posluchárna A63, 10:30 hod.

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Petr Kotlík, CSc.

Členové: Ing. Kateřina Doubravová (148)
Ing. Markéta Škrdlantová, PhD. (148)
Ing. Alexandra Kloužková, CSc. (107)
Dr. Ing. Dana Rohanová (107)
Ljuba Svobodová (Archeologický ústav AV ČR)
Ing. Petra Vávrová (organizační tajemník)

Seznam sponzorů

Sekce: **Anorganická chemie**

Sponzor: Precheza a.s., Přerov

Sekce: **Restaurování**

Ceiba

Sekce: **Organická chemie:**

Sponzor: Interpharma Praha, a.s.

Re&d VÚFB. a.s.

Synthon, s.r.o.

Hexion Speciality Chemicals

Cayman Pharma, s.r.o., Neratovice

Merck, spol. s r.o.

Lach-Ner, s.r.o., Neratovice

Lonza Biotec, s.r.o.

Proxim, s.r.o. Pardubice

Maneko, spol. s r.o.

Ingos, s.r.o.

Azacycles, s.r.o.

Sekce : Anorganická chemie

Optické vlnovody připravené iontovou výměnou a iontovou výměnou v elektrickém poli

Autor: Jakub Aldšmíd
Ročník: B3
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: Ing. Pavla Nekvindová PhD.

Iontová výměna (IE) je v současné době jednou z nejpoužívanějších metod přípravy planárních optických vlnodů. Její hlavní výhodou je nenáročnost na technologické vybavení a jednoduchost provedení. Ve skle jako v základním materiálu dochází ke zvýšení indexu lomu v povrchové optické vrstvě a je tak vytvořeno vhodné prostředí pro šíření optického signálu. IE je nutné provést vždy s vhodnou dvojicí iontů, nejčastěji je využívána výměna iontů stříbrných za ionty sodné. Známe je jak provedení termické IE, kde hnací silou je koncentrační gradient, tak provedení IE v elektrickém poli, v němž je difúze řízena silou el. pole tj. vloženým napětím. V poslední době se výzkum na téma IE v el. poli zaměřil na využití vysokých napětí (500 – 1000V) a různých typů materiálů.

Cílem práce bylo systematicky studovat $IE\ Ag^+ \rightarrow Na^+$ v elektrickém poli ve sklech různého složení. Použitá optická křemičitanová skla se lišila především v obsahu sodíku. Byl tak potvrzen rozhodující vliv obsahu sodíku na změnu hloubkového profilu indexu. Protože děje probíhající při termické IE a IE v el. poli se liší, byl porovnán také charakter vzniklých vlnodů pro oba způsoby IE. V neposlední řadě byla také modifikována stávající aparatura zařazením vysokonapěťového zdroje, byla tak připravena první řada experimentů s vysokým vloženým napětím.

Sekce : Anorganická chemie

Příprava supravodiče Bi-2223 chelatační metodou sol-gel

Autor: Tomáš Hlásek
Ročník: B2
Ústav: 101
Školitel: Ing. Kateřina Rubešová, Ph.D.

Cílem práce bylo připravit gely použitelné pro spin coating tenkých filmů supravodivé fáze Bi-2223. Tyto gely musí být stabilní vůči precipitaci přítomných kovů (Bi, Pb, Sr, Ca, Cu) a jejich další tepelní zpracování by mělo vést k supravodivé fázi Bi-2223.

Byla použita tzv. chelatační metoda sol-gel, kdy se v roztoku kovy naváží do chelátu a ten se pak zahušťuje až do vzniku gelu. Jako chelatační činidlo byla použita kyselina ethylendiamintetraoctová (EDTA), a to buď samotná, nebo v kombinaci s triethanolaminem (TEA). Výsledné gely byly následně tepelně zpracovány (na základě výsledků TG) a reakcí v pevné fázi byly připraveny objemové supravodivé vzorky. Prvkové složení po zpracování gelů bylo ověřeno fluorescenční RTG analýzou, fázové složení bylo během přípravy monitorováno RTG difrakční analýzou. U připravených objemových vzorků byla měřena teplotní závislost měrného odporu a hodnota kritické proudové hustoty při 77 K jako základní supravodivé charakteristiky.

Sekce : Anorganická chemie

Komplexy Fe(III) a (2-hydroxybenzyliden)aminoctové kyseliny

Autor: Hana Kvapilová
Ročník: B3
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: Ing. Irena Hoskovcová, CSc.

Cílem práce byla syntéza komplexu železitých iontů s (2-hydroxybenzyliden)aminoctovou kyselinou majících jednoznačně definovanou strukturu. Literatura neuvádí postup pro izolaci čistého ligandu, v podobných pracích byl kov přidáván přímo do roztoku po kondenzaci salicylaldehydu a glycinu. Ligand byl proto syntetizován a izolován čtyřmi různými způsoby. Před syntézou komplexu byla provedena spektroskopická studie, kdy bylo ke stálému množství methanolového roztoku ligandu přidáváno vždy jiné množství methanolového roztoku Fe^{3+} a naopak ke stálému množství Fe^{3+} proměnlivé množství ligandu. Průběh těchto reakcí byl sledován v UV-Vis oblasti záření. V závislosti na poměru reaktantů a tedy na pH prostředí vznikl odlišný produkt, jeho struktura však byla nezávislá na pořadí přidávaných reaktantů. Pro syntézu komplexu byly zvoleny molární poměry Fe^{3+} ku ligandu 1:1 při pH 1,4; 1:5 při pH 5,3 a 1:2 při pH regulovaném na 11,3. V prvním a třetím případě byly získány pevné práškovité produkty, ve druhém případě se pevný produkt získat nepodařilo. Dle rentgenové strukturní analýzy produkty nejsou krystalické. Infračervená spektroskopie prokázala, že vazba karboxylové skupiny ligandu na Fe^{3+} je v těchto produktech odlišná.

Sekce : Anorganická chemie

Příprava a studium vlastností optických planárních vlnovodů připravených iontovou výměnou ve speciálních silikátových sklech s různým obsahem erbia a ytterbia

Autor: Bc. Jan Málek
Ročník: M2
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: Ing. Pavla Nekvindová PhD.

Skla obsahující Er^{3+} ionty jsou v současné době studována za účelem přípravy aktivních optických struktur, které mohou sloužit zejména jako optické zesilovače nebo vlnovodné lasery. Využívá se emise Er^{3+} iontů v oblasti $1,5 \mu\text{m}$. U komerčně dostupných silikátových skel bylo ale s rostoucím přídatkem vzácných zemin ve skle pozorováno koncentrační zhášení této luminiscence způsobené shlukováním iontů vzácných zemin.

Cílem této studie bylo připravit optické vlnovody v nově navržených silikátových sklech s různým obsahem vzácných zemin a charakterizovat jejich vlastnosti. Použitá skla se lišila množstvím Er_2O_3 a/nebo množstvím Yb_2O_3 . Optické vlnovody byly v těchto sklech připraveny iontovou výměnou $\text{Ag}^+ \leftrightarrow \text{Na}^+$ nebo $\text{K}^+ \leftrightarrow \text{Na}^+$. U připravených optických vrstev byl měřen hloubkový profil indexu lomu, fotoluminiscenční a absorpční spektra. Bylo zjištěno, že přídavek vzácných zemin zvyšuje index lomu skla a zhoršuje jeho propustnost pro vyměňované ionty. Ag^+ vlnovody připravené v těchto sklech mají velký přírůstek indexu lomu ($\Delta n \sim 0.1$), přičemž změna indexu lomu nastává skokově. Naopak u K^+ vlnovodů má hloubkový profil indexu lomu gradientní průběh a přírůstek indexu lomu je řádově menší. Bylo zjištěno, že v Ag^+ vlnovodech dochází ke zvýšení intenzity emise Er^{3+} iontů.

Sekce : Anorganická chemie

Příprava komplexů Fe(III) a Fe(II) s N-(2-hydroxybenzyl)glycinem

Autor: Radka Metelková
Ročník: B3
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: Ing. Irena Hoskovcová, CSc.

Předběžnou spektroskopickou studií bylo zjištěno, že Fe(III) reaguje s N-(2-hydroxybenzyl)glycinem v různém stechiometrickém poměru v závislosti na pH reakčního prostředí. Proto byly pro syntézu komplexů Fe(III) s daným ligandem zvoleny tři různé hodnoty pH odpovídající oblastem postupné deprotonizace vazebných míst ligandu, a to pH = 2, které odpovídá samotným reaktantům, dále pH = 4 a pH = 12., kterých bylo dosaženo zalkalizováním reakční směsi přidávkou NaOH. Průběh reakce byl sledován prostřednictvím UV-Vis spekter a elektrochemicky. Na naměřených polarografických křivkách byl pozorován pouze oxidační děj, ale žádný děj redukční. Pro srovnání jsme syntetizovali i komplex s Fe(II) a celou reakci prováděli v argonové atmosféře.

Stechiometrii a vlastnosti takto získaných komplexů jsme vyhodnocovali na základě UV-Vis spekter, elektrochemického chování, elementární analýzy a atomové absorpční spektroskopie.

Sekce : Anorganická chemie

Vliv dopujících iontů na optické vlastnosti rutilu

Autor: Bc. Marek Ostrčil
Ročník: M1
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: Ing. Zlatko Šrank, CSc.

Cílem práce bylo připravit řady kalcinátů oxidu titaničitého rutilového typu s různou impregnací dopujícími ionty a zkoumat dopad těchto impregnací na změnu optických vlastností pigmentu. Při přípravě řad kalcinátů jsem použil rutilové zárodky připravené za zvýšeného tlaku, jejichž přípravou jsem se zabýval v předchozích letech a je popsána v mé bakalářské práci.

Impregnace různými dopujícími ionty se provádí za účelem zlepšení optických parametrů titanových bělob rutilového typu. Tyto vlastnosti jsou negativně ovlivňovány vysokou teplotou přípravy rutilu a příměsemi pocházejícími z ilmenitu, který je výchozí surovinou pro síranový způsob výroby titanové běloby.

U jednotlivých řad byly použity k impregnaci K^+ , Li^+ a Mg^{2+} soli při několika různých poměrech vůči oxidu titaničitému a ve vzájemných kombinacích. Dopad těchto použitých impregnací na užité vlastnosti získaných kalcinátů jsem zkoumal jak z hlediska rychlosti vzniku rutilu v závislosti na cílové teplotě kalcinace, tak i z hlediska měnících se optických parametrů kalcinátů. Ve své práci jsem se zaměřil zejména na tyto optické parametry – bělost, barvivost (barvicí síla) a barevný podtón.

Sekce : Anorganická chemie

Iontová výměna $\text{Ag}^+ \rightarrow \text{Na}^+$ v optickém skle obsahujícím zinek jako dvoumocný modifikátor

Autor: Stanislav Staněk
Ročník: B3
Ústav: Anorganické chemie
Školitel: Ing. Pavla Nekvindová Ph.D.

Současný výzkum a vývoj v oblasti fotoniky se po velmi optimistickém období konce minulého století dostává do období zefektivňování stávajících světlovodných prvků a materiálů. V oblasti planárních optických členů na bázi skel se v naší laboratoři jedná především o zlepšení existujících skelných materiálů tj. důležité jsou poznatky prakticky až na atomární úrovni s hledáním co největšího množství vztahů a souvislostí.

V tomto příspěvku jsme navázali na již probíhající výzkum, kdy se jako velmi slibný materiál pro fotonické aplikace jeví optická skla obsahující zinek jako dvoumocný modifikátor. Taková skla jsou jednak vhodná pro iontovou výměnu (IE) jako technologii pro vytváření optických vlnodů a jednak tvoří zajímavé prostředí pro laserující prvky. V tomto typu skla byly provedeny tři základní soubory experimentů sledujících závislost hloubkového profilu indexu lomu připravené optické vrstvy na: i) čase iontové výměny $\text{Ag}^+ \rightarrow \text{Na}^+$, ii) teplotě IE a iii) koncentraci stříbra v tavenině používané pro IE. Experimentálně byl takto charakterizován proces iontové výměny v novém typu skla a vytvořen soubor dat vhodný pro následné navržení teoretického modelu.

Sekce : Anorganická technologie I

Alkalický polymerní elektrolyt pro elektrolytický rozklad vody

Autor: Jaromír Hnát
Ročník: M2
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Prof. Dr. Ing. Karel Bouzek

Velkokapacitní elektrolýza vody je v současné době zavedeným technologickým procesem. Nejčastěji se využívá elektrolýzy vodného roztoku 20 – 30% KOH. Avšak s ohledem na předpokládané využití vodíku jakožto zdroje energie získané z palivových článků, je této oblasti v poslední době věnována rostoucí pozornost odborné komunity. Kromě klasických alkalických elektrolýzérů s kapalným elektrolytem se v současné době ve stoupající míře již používá elektrolýzérů, kde jako elektrolyt slouží polymerní membrána. Tato zařízení mimo jiné umožňují pracovat až s 5x vyšší proudovou hustotou, což vede k výrazné intenzifikaci celého procesu.

Polymerní membrány schopné vyměňovat anionty obsahují kladně nabitě skupiny zabudované do polymerní matrice. Kladně nabitá skupina je nejčastěji představována kvartérními sloučeninami dusíku. Alternativu ke sloučeninám dusíku představuje čtyřvázný fosfor, či trojvázná síra. Cílem této práce je stanovení vlastností nově syntetizovaných anexových membrán a ověření jejich využitelnosti jako pevného elektrolytu za pracovních podmínek elektrolýzérů.

Sekce : Anorganická technologie I

Charakterizace dvoufázového toku kapalina-plyn v mikrokanálu

Autor: Petr Zálaha

Ročník: M2

Ústav: Ústav anorganické technologie

Školitel: Doc. Ing. Vladimír Mejta, CSc.; Ing. Vladimír Jiříčný, CSc., (ÚCHP AV ČR Praha, v.v.i.)

Práce byla zaměřena na studium toku v elektrochemickém mikroreaktoru s tenkou štěrbinou při probíhající elektrochemické alkoxylationi, kdy se vyvíjí vodík na protielektrodě. Při různých operačních podmínkách byly studovány tři základní charakteristiky proudění, a to režim toku, rozdělení velikosti bublin a zadrž plynů, které podstatně ovlivňují selektivitu a konverzi probíhající elektrodové reakce.

Pro získání experimentálních dat byla použita vizualizační cela vlastní konstrukce a digitální fotoaparát. Byla vytvořena metodika měření a zpracování dat s použitím postupů zpracování digitálního obrazu.

Výsledky práce byly využity k návrhu a optimalizaci mikroreaktoru pro elektrochemickou alkoxylationi v rámci projektu EU IMPULSE, konkrétně jeho části T2.3. Tomu odpovídaly i studované operační podmínky, které se přizpůsobovaly optimálním provozním podmínkám dané reakce.

Sekce : Anorganická technologie I

Sledování průběhu reakce kyseliny sírové s vápenecem pomocí vodivostní cely nebo pH elektrody

Autor: Petra Kuželová

Ročník: M2

Ústav: Anorganické technologie

Školitel: Ing. Ivona Sedlářová, Ph.D.

Neutralizace kyseliny sírové uhličitánem vápenatým je jednou z možností, jak zpracovávat odpadní kyselinu sírovou z chemických výroby. Jedná se o heterogenní, nevratnou, nekatalyzovanou reakci mezi pevnou a kapalnou fází s velmi rychlým průběhem.

Laboratorní měření byla provedena v izotermním míchaném polovsádkovém reaktoru a průběh reakce byl studován dvěma metodami. Při použití vodivostní cely byla sledována

specifická vodivost roztoku, která se titrací koncentrovanější kyselinou sírovou udržovala na konstantní hodnotě. Při použití pH elektrody byla stejným způsobem udržována konstantní hodnota pH. Jako vstupní suroviny byly použity čistá kyselina sírová a vápenec z lokality Čertovy schody s frakcí částic 0,4 – 0,5 mm. Cílem této práce bylo zjistit vhodnost použití těchto metod při studiu průběhu dané reakce a provést jejich porovnání.

Z naměřených výsledků vyplynulo, že obě metody lze při studiu průběhu dané reakce za určitých omezení využít.

Sekce : Anorganická technologie I

Aplikace fotokatalýzy pro čištění odpadních vod

Autor: Petr Pánek
Ročník: M2
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Prof. Dr. Ing. Josef Krýsa

Odpadní voda v automobilce TPCA Kolín po úpravě koagulací a filtrací obsahuje množství organických látek, které je třeba odstranit. Tato práce je zaměřena na možnosti využití fotokatalýzy při jejich odbourávání. Aplikován byl cirkulační deskový fotoreaktor s filmovým tokem kapaliny po vrstvě fotokatalyzátoru. Sledovaným parametrem byla hodnota celkového organického uhlíku (analýza TOC), z jejíhož poklesu lze vyvozovat závěry o efektivitě aplikované metody. Bylo však zjištěno, že hodnota TOC odpadní vody není v čase stálá. Během týdne poklesne hodnota TOC i o několik desítek mg/l. Je tedy nutné, aby byla analýza provedena v co nejkratším čase po odebrání vzorku, jinak dochází ke zkreslení výsledků.

Pro zlepšení fotokatalytických účinků TiO_2 vrstvy a tedy zrychlení fotodegradace organických látek byl do systému přidáván peroxid vodíku. Z literární rešerše vyplynulo, že optimální koncentrace H_2O_2 by se měla pohybovat mezi hodnotami 0,01 - 0,015 mol/l. Množství peroxidu vodíku v systému bylo stanovováno manganometricky. Z výsledků je zřejmé, že v přítomnosti H_2O_2 dochází k největšímu poklesu hodnoty TOC.

Sekce : Anorganická technologie I

Aging of the TiO_2 colloidal particles in water: effect on their properties

Autor: Šárka Paušová
Ročník: M2
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Prof. Dr. Ing. Josef Krýsa, Dr. Gilles Mailhot

This work describes the behaviour of the aqueous colloidal solutions of quantum sized titanium dioxide particles (Q- TiO_2). The main interest of this work was to investigate aging of these colloidal particles at different temperatures (4 °C, 20 °C and 40 °C) and different pH (2,5 and 11). The process of aging most probably consists in slow re-crystallization that should lead to somewhat bigger particles, and it seems that this process of re-crystallization is faster at the highest temperature. The phenomenon of aging of these Q- TiO_2 solutions has been investigated employing spectroscopic methods (determination of band gap energy E_g), and dynamic light scattering method (particle size determination). The photocatalytic activity, which represents the most important quality of Q- TiO_2 particles, was determined through quantum yield of 4-chlorophenol degradation. Q- TiO_2 particles were prepared by hydrolysis of TiCl_4 , the final pH was 2,5 and particles size around 7 nm. After two weeks at pH 2,5 and temperature 4°C particles size increased to 9 nm, while at 20 °C to 22 nm. For the further application it is important to keep these particles at alkaline pH without big change of their size. It was found that the change of size depended on the type of used alkaline reagent (KOH, NH_4OH) and on its concentration.

Sekce : Anorganická technologie I

Stanovení proudové účinnosti alkalické zinkovací lázně

Autor: Karel Plíhal
Ročník: M2
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Doc. Ing. Vladimír Mejta, CSc., Ing. Petr Szelač

Nová generace alkalických bezkvanidových zinkovacích lázní umožňuje dosáhnout rovnoměrnějšího rozložení zinku na pokovovaných předmětech. Zároveň používá přísady s nízkou komplexotvornou schopností, takže se vyčerpaná lázeň a oplachové vody snadno likvidují a díky tomu je příznivá pro životní prostředí.

Cílem této práce bylo změřit proudovou účinnost vylučování zinku z alkalické bezkvanidové zinkovací lázně při různých katodických proudových hustotách. Měření bylo prováděno ve skleněné vaně za použití 3D anod a katody o ploše 1,4 dm². Měření bylo provedeno bez míchání a za použití pohybu katodové tyče při pěti různých proudových hustotách.

Sekce : Anorganická technologie I

Hydraulika toku kapaliny na síťové distanční vložce mezimembránového prostoru elektrodialyzační cely

Autor: Kristýna Vítková
Ročník: M2
Ústav: Ústav anorganické technologie
Školitel: doc. Ing. Vladimír Mejta, CSc.; Ing. Roman Kodým

Cílem této práce bylo měření a porovnání hydraulických vlastností různých typů distančních vložek do elektrodialyzačních membránových komor, zejména pak jejich tlakovou ztrátu v závislosti na rychlosti proudění. Na základě těchto charakteristik lze vytipovat síťoviny vhodné pro použití do průmyslových aparátů, jejich tendenci k zavzdušňování v zařízení a ověřit matematický model hydrodynamiky toku kapaliny v síťovině. Práce byla provedena ve spolupráci s firmou Mega a.s, která dodala 12 druhů síťovin a měřicí aparaturu.

Sekce : Anorganická technologie I

Matematický model laminárního a turbulentního toku v pravoúhlém kanálku s výplní ve tvaru sítě

Autor: František Vlasák
Ročník: M2
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Prof. Dr. Ing. Karel Bouzek, Ing. Roman Kodým

Předmětem této práce je matematická simulace hydrodynamiky toku v pravoúhlém kanálku s výplní ve tvaru sítě. Uvedená geometrie je typická pro řadu membránových separačních procesů, např. pro elektrodialýzu. Jedná se vesměs o procesy řízené přenosem hmoty, kde rovnoměrnost hydrodynamiky toku (HT) hraje klíčovou roli. V praxi je s cílem dosažení této rovnoměrnosti do prostoru mezi membránami vkládána síťka. Ta plní zároveň funkci mechanické opory membrán a zvyšuje intenzitu přenosu hmoty k mezifázovému rozhraní. Rovnoměrný nátok kapaliny do mezimembránového prostoru dále zajišťují distributory toku.

V první části tohoto projektu byl vyvinut 3D model laminárního toku s cílem charakterizovat HT v uvedeném systému. Z důvodů vysokých výpočetních nároků byl tento model řešitelný pouze na malé části síťové výplně. Jeho výsledky však ukázaly, že proudění kapaliny sítvou lze zjednodušeně popsat jako tok ve dvou vrstvách. Na základě této představy byl navržen 2D model dvou vrstev, a to v laminárním i v turbulentním režimu proudění. Z porovnání s experimentálními daty vyplynulo, že laminární model lze použít s uspokojivou přesností pouze v mezimembránovém prostoru. V oblasti distribučních kanálků a jejich blízkém okolí však selhává. Zde je tedy nutno použít model turbulentní. Jeho vývoj je cílem druhé etapy projektu.

Sekce : Anorganická technologie II

Fotokatalytická degradace azobarviva Oranž II v suspenzích a na vrstvách TiO₂ fotokatalyzátorů

Autor: Michal Baudys
Ročník: M1
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Prof. Dr. Ing. Josef Krýsa, Ing. Martin Zlámal

Cílem práce je porovnání rychlostí fotokatalytické degradace modelového azobarviva Oranž II při použití komerčních práškových TiO₂ fotokatalyzátorů. Katalytické materiály byly studovány ve formě suspenze a ve formě částicových vrstev, které mají význam z hlediska jejich aplikace. U katalyzátorů ve formě suspenze byla nejvyšší rychlost fotokatalytické degradace zaznamenána u materiálu Kronos vlp S7001 a Degussa P25, nejnižší u materiálu Millenium PC 500. V případě částicových vrstev byla zaznamenána nejvyšší rychlost fotodegradace u materiálu Precheza AV-01 s/f a Kronos vlp 7001, nejnižší u materiálu PC 500. Rychlost fotodegradace je u nejméně aktivních materiálů o 75% nižší než u neaktivnějších fotokatalyzátorů a to jak ve formě vrstev tak i ve formě suspenzí.

Fotokatalyzátory ve formě částicových vrstev mají nižší fotoaktivitu, než suspenze. Nejmenší rozdíl rychlosti fotodegradace mezi suspenzí a vrstvou byl zaznamenán u materiálu Eurosupport S7001, kde je rychlost fotodegradace vrstvy pouze o 15% nižší než u suspenze, naopak nejvyšší rozdíl byl zaznamenán u materiálu Degussa P25, kde je rychlost fotodegradace u vrstvy cca o 75% nižší než u suspenze. Možným vysvětlením pro odlišné chování jednotlivých materiálů je rozdílný způsob jejich výroby.

Sekce : Anorganická technologie II

Chování stříbrné elektrody v roztoku hydroxidu s příměsí chloridu

Autor: Karel Vazač
Ročník: M1
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Ing. Martin Paidar, Ph.D.

Vzhledem ke způsobům výroby hydroxidů alkalických kovů nelze zcela eliminovat přítomnost chloridových sloučenin v produktu. Přítomnost chloridových nečistot může pro některé aplikace představovat vážné komplikace. Jednou z možností odstranění chloridových příměsí je jejich imobilizace jako AgCl na povrchu stříbrné elektrody. Cílem práce bylo ověřit chování stříbrné elektrody v roztoku 1M KOH. Byly změřeny cyklovoltametrické křivky a identifikovány jednotlivé elektrodové děje. Dále byl sledován vliv přídavku chloridových iontů na chemismus elektrodových reakcí.

Přítomnost chloridů v hydroxidu způsobuje částečné pokrytí povrchu elektrody AgCl. Tím je omezena tvorba oxidické vrstvy na povrchu elektrody. Další přídavek chloridů způsobil úplné potlačení některých reakcí spojených s tvorbou a redukcí oxidů. V roztoku obsahujícím pouze chloridy nebyly elektrodové reakce spojené s tvorbou oxidů detekovány. Získané poznatky naznačují, že metoda odstraňování chloridů z roztoků KOH může být prakticky realizovatelná. V dalším kroku je nutné použít vyšší koncentraci KOH, používanou v průmyslu.

Sekce : Anorganická technologie II

Výroba kombinovaných hnojiv rozkladem fosfátů minerálními kyselinami

Autor: Monika Drakselová
Ročník: M1
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Doc. Ing. Jan Vídenský, CSc.

Práce obsahuje přehled technologií výroby kombinovaných hnojiv rozkladem fosfátů minerálními kyselinami. Nejčastěji se využívá kyseliny dusičné nebo její kombinace s kyselinou sírovou. Výběr příslušného způsobu je ovlivňován zpracováním "břečky" získané rozkladem. Použití kyseliny dusičné má řadu výhod. Je možné komplexně využít základní suroviny a získat hnojivo s vysokým obsahem živin. Tento proces se označuje jako nitrátová technologie a podle následného zpracování rozkladné "břečky" se dělí na vymrazovací, nitrosulfátové, nitrofosforečnanové a nitrokarbonátové technologie. Žádná z technologií není zcela optimální. Nedostatky jednotlivých výrobních postupů lze částečně odstranit jejich kombinací, jak ukazuje navržený postup.

Sekce : Anorganická technologie II

Ionic liquids - transport properties, stability and their influence on electrocatalytic activity of Pt

Autor: Bc. Michal Kolafa
Ročník: M1
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Prof. Dr. Ing. Karel Bouzek

Fuel cells are considered to be an important and perspective source of electric energy. Their expansion is unfortunately hindered by relatively high purchase and operation costs. One possible solution is the increase of operation temperature from 80 °C to 160 °C. Acceleration of electrode reaction kinetics connected with the increase of temperature will solve the problem with platinum catalyst sensitivity to poisoning by carbon monoxide. It will also enable to replace platinum by more cost-effective materials. The problem is that under high temperatures it is impossible to use a perfluorinated sulfonated membrane such as Nafion as a solid electrolyte. It is necessary to find an alternative electrolyte which would be sufficiently conductive also under low humidity conditions at temperatures exceeding 100 °C.

Membranes with incorporated ionic liquids seem to be an alternative. In this work, five ionic liquids were studied: 1-butyl-3-methyl pyridinium triflate, 2-hydroxy ethyl trimethyl ammonium dimethyl phosphate, 1-ethylimidazolium triflate, 1-ethylimidazolium phosphate and 1-(3-sulfopropyl)pyridinium triflate. Ionic conductivity, viscosity and electrochemical stability of the ionic liquids and their mixtures with water were determined in a wide range of temperatures. Behavior of selected ionic liquids was tested in a fuel cell operated at elevated temperatures.

Sekce : Anorganická technologie II

Vliv výměny iontů v titanosilikátu ETS-4 na jeho vlastnosti

Autor: Matej Konvičný
Ročník: M1
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Dr. Ing. Vlastimil Fíla, Ing. Zuzana Cílová, Ph.D.

Zeolity a s nimi související krystalické mikroporézní materiály mají široké aplikační možnosti. Lze je používat jako katalyzátory, adsorbenty, při čištění odpadních vod nebo při různých separačních procesech. Mezi krystalické mikroporézní materiály se řadí i materiály na bázi titanosilikátů; ty se liší od klasických zeolitů svou vnitřní strukturou. Sorpční i katalytické vlastnosti těchto materiálů mohou být ovlivňovány způsobem jejich syntézy popř. jejich dalším zpracováním. Tato práce je věnována studiu změn vlastností titanosilikátu ETS-4 v důsledku iontové výměny. Pro iontové výměny byly zvoleny následující dvojmocné ionty (Sn^{2+} , Cu^{2+} , Sr^{2+}). V první fázi práce byly použity 2 typy prášků ETS-4 lišící se molekulárním složením syntézní směsi. Při studiu vlastností původních i upravených prášků byla využita řada analytických metod. Morfologie vzorků byla posuzována metodou elektronové mikroskopie. Stupeň výměny byl zjišťován pomocí metody RTG fluorescenční analýzy. Na základě získaných výsledků bude navržen optimální postup pro substituci iontů u již připravených membrán typu ETS-4. U takto upravených membrán budou studovány jejich permeační, katalytické a separační vlastnosti (např. separace plynů N_2/CH_4).

Sekce : Anorganická technologie II

Vliv provozních parametrů na výkon palivového článku typu PEM

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

Využití palivových článků jako potenciální zdroj energie je atraktivní v mnoha odvětvích průmyslu. Výkon palivového článku lze ovlivnit konstrukcí a provozními parametry. V konstrukci palivového článku hraje velkou roli geometrie rozvodných kanálků a stažení palivového článku, které ovlivňuje distribuci paliva a kontakty na mezifázových rozhraních. Pro výkon membránových palivových článků jsou určujícími parametry: provozní teplota, složení vstupních plynů, jejich průtok a tlak. Vodivost v současné době používaných perfluorovaných membrán je silně závislá na obsahu vody, které jsou v suchém stavu prakticky nevodivé. Z toho důvodu je nutné dávkované plyny rovněž zvlhčovat. Všechny výše zmíněné veličiny ovlivňují provoz palivového článku a proto musí být brány v úvahu při jejich testování.

U laboratorních palivových článků typu PEM byl zkoumán především vliv teploty, síla stažení, zvlhčení a tlaku vstupních plynů. Dále byl sledován vliv provozních podmínek na provoz článku. Byly identifikovány příčiny poklesu výkonu článku během provozu a nalezeny optimální parametry sestavení palivového článku typu PEM s ohledem na maximální dosahovaný výkon. Ve druhém kroku byl dlouhodobě sledován výkon článku provozovaném při optimálních podmínkách s cílem ověřit životnost článku.

Sekce : Anorganická technologie II

Příprava membrán typu ETS-4 metodou „secondary growth“

Autor: Lucie Ondryášová
Ročník: M1
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Ing. Zuzana Cílová, Ph.D., Dr. Ing. Vlastimil Fíla

V dnešní době se výrazně zvyšuje zájem o využitelnost membrán na bázi zeolitů, tzv. molekulových sít. Molekulová síta jsou krystalické mikropórezní 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 zmíněných 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 nebo kovových nosičích. Cílem této práce je příprava vrstvy ETS-4 na uhlíkatém typu nosiče s využitím metody „secondary growth step“ (využití krystalizačních zárodků). Pro přípravu membrán byly použity nosiče s odlišným typem krystalizačních zárodků (seedů). V prvním případě byly získány zárodky na bázi ETS-4 přímo na nosiči - metodou in situ. Jako druhý typ zárodků byly použity částice TiO_2 , které byly nanášeny metodou in-situ a ex situ. Připravené membrány byly charakterizovány pomocí vybraných analytických metod a na základě získaných výsledků byl zjištěn pozitivní vliv seedů na kvalitu připravené vrstvy.

Sekce : Anorganická technologie II

Vliv kontaminace vodíku parami rtuti na životnost palivového článku typu PEM

Autor: Martina Plíšková
Ročník: M1
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Prof. Dr. Ing. Karel Bouzek

Jedním z problémů, které jsou řešeny v souvislosti s problematikou širokého uplatnění palivových článků, je rozšíření spektra vhodných zdrojů vodíku jako paliva namísto dnes používaných nerostných surovin. Velice perspektivní je především efektivní upotřebení vodíku vznikajícího jako vedlejší produkt v dalších velkokapacitních výrobcích. Cílem této práce je posoudit možnost využití vodíku uvolňujícího se při amalgámové elektrolýze solanky. Tento vodík i po přečištění obsahuje 5 až 15 mikrog/Nm³ rtuti. Ta by v důsledku interakce s materiálem elektrody, zejména pak s katalyzátorem, mohla způsobit zkrácení životnosti palivového článku. Cílem této práce je posoudit význam tohoto nebezpečí a možnosti případné regenerace kontaminovaného článku.

Sekce : Anorganická technologie II

Vývoj metodiky testování katalyzátorů pro AFC

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

Alkalické palivové články (AFC) byly mezi prvními úspěšně provozovanými palivovými články na světě. Již od prvního člověka na Měsíci NASA používala a dnes v raketoplánech Space Shuttle používá alkalické palivové články jako zdroj energie a vody.

Stejně jako jeho „kyselý“ protějšek (PEM), používá i alkalický palivový článek katalyzátor pro oxidaci vodíku. Charakteristika používaných katalyzátorů se zkoumá nejrůznějšími metodami, mezi kterými jedno z předních míst zaujímá elektrochemické měření na rotační diskové elektrodě (RDE). Aby bylo měření na RDE proveditelné, je nutné katalyzátor imobilizovat na povrchu diskové elektrody.

Ve své práci jsem zkoumal a porovnával možnosti imobilizace katalyzátoru na povrch RDE: kationtově výměnnou membránou Nafion (standardní prostředek imobilizace u PEM článků), inertním PTFE a aniontově výměnnou membránou AN-VBACI 30. Testované látky byly srovnány s hlediska vhodnosti jejich použití v AFC a byl doporučen další postup ve zkoumané problematice.

Sekce : Anorganická technologie II

Měření tlakových ztrát v mikroaparátech

Autor: Zuzana Vajglová
Ročník: M1
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: Ing. Vladimír Jiříčný, Csc.

Mikroaparáty reprezentují zásadně nový přístup nejen z hlediska výzkumu optimalizace vlastního procesu, ale i v aplikaci pro průmyslem požadované objemy produkce, to je zvětšování měřítka (scale up). Významnou veličinou, která slouží jako základní informace pro správný návrh distribuční sítě je znalost tlakové ztráty mikroaparátu v rozmezí očekávaných provozních průtoků. Závisí na ní zejména energetická náročnost procesu při paralelizaci. Měření jsou zaměřena především na oblast laminárního jednofázového toku kapaliny (voda, etanol) nebo plynu (dusík) s cílem verifikovat vliv fyzikálně chemických vlastností v širokém rozmezí hodnot.

Jako reprezentativní zařízení jsou testovány kovové kapiláry z nerezové oceli o různé délce a průměru a skleněné pravoúhlé kanály.

Údaje jsou zaznamenávány běžnými komerčními tlakovými snímači umístěnými před a za studované mikrozařízení.

Výsledkem práce je databáze tlakových ztrát v daných mikrozařízeních ve studovaném rozsahu operačních podmínek a také posouzení vhodnosti teoretických modelů při predikci tlakových ztrát v daných mikrozařízeních.

Sekce : Anorganická technologie II

Mokrý postup výroby kyseliny trihydrogenfosforečné

Autor: Helena Váňová
Ročník: M1
Ústav: Anorganické technologie
Školitel: doc. Ing. Jan Vídenský, CSc.

Obsahem práce je přehled a rozbor technologických postupů výroby kyseliny trihydrogenfosforečné. Práce je zaměřena na tzv. mokré způsob výroby, což je rozklad fosfátových surovin minerálními kyselinami. Existuje několik postupů, které se liší jednak v použité rozkladné kyselině a jednak v kvalitě zpracovávané fosfátové suroviny. Většina technologií využívá kyselinu sírovou. Běžně se zpracovávají apatitové i fosforitové koncentráty. Největší množství kyseliny trihydrogenfosforečné se spotřebuje při výrobě hnojiv. Kyselina trihydrogenfosforečná určená pro tyto účely by měla mít koncentraci alespoň 70% hm. Dále je kladen důraz na obsah nežádoucích látek. Ideální proces by tedy měl bezodpadově produkovat koncentrovanou a čistou kyselinu trihydrogenfosforečnou. V práci jsou navrženy tři postupy, které se jeví jako velmi výhodné.

Sekce : Kovové materiály I

Recyklace cinvalditových odpadů sádrovou metodou

Autor: Bc. Katrin Bialasová
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Jitka Jandová, CSc.

Z cinvalditových odpadů (0,21% Li) po zpracování Sn-W rud těžených v minulosti na Cínovci byl připraven cinvalditový koncentrát (1,36% Li), ze kterého bylo extrahováno lithium za využití sádrové metody. Její podstatou je spékání koncentráту při cca 950°C se směsí vápenných solí a následné loužení spečenců v H₂O. Cílem práce bylo stanovit vliv hmotnostního poměru koncentráту, CaSO₄ a Ca(OH)₂ ve spěkané směsi a fázového složení spečenců na výtěžnost lithia. Bylo zjištěno, že maximální extrakce Li se dosáhne pro zpracování směsi koncentrát: CaSO₄: Ca(OH)₂ = 6: 4: 2. Snížení množství CaSO₄ nebo Ca(OH)₂ má za následek významné snížení extrakce Li, zatímco fázové složení spečenců se výrazně nemění.

Sekce : Kovové materiály I

Vliv podmínek spékání cinvalditových koncentrátů na vyluhování Li a Rb do vodné fáze

Autor: Bc. Jaroslav Čapek
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Hong Vu, Ph.D.

Cílem práce bylo aplikovat vápencovou a modifikovanou síranovou metodu pro zpracování lithiových cinvalditových koncentrátů získaných z gravitačních odpadů po těžbě Sn-W rud na Cínovci. Při vápencové metodě byl sledován vliv teploty spékání, hmotnostního poměru cinvalditového koncentráту: CaCO₃ a doby spékání na fázové složení a na extrakci Li a Rb ze vzniklých spečenců. Li-cinvalditový (slídový) koncentrát s uhličitánem vápenatým byl spékán při teplotním rozmezí od 800 - 875°C po dobu od 0,5 – 1,5h (poměr CaCO₃: Li-koncentrát = 1: 4-6). Jemně rozemleté spečence byly louženy ve vodě při 80-90°C, při k:p=10:1 po dobu 3 h. Nejlepší výtěžnost Li a Rb do roztoku byla dosažena při teplotě spékání 825°C, době spékání 1h a poměru CaCO₃: Li-koncentrát = 1: 5. Při modifikované síranové metodě byl sledován vliv složení spěkáací směsi na fázové složení a na extrakci Li a Rb ze vzniklých spečenců. Li-cinvalditový (slídový) koncentrát se síranem vápenatým a uhličitánem vápenatým byl spékán při teplotě 950°C po dobu 1h (poměr Li-koncentrát:CaSO₄:CaCO₃ = 6: 4: 1-2,5). Jemně rozemleté spečence byly louženy ve vodě při 80-90°C, při k:p=10:1 po dobu 1 h. Nejlepší výtěžnost Li a Rb do roztoku byla dosažena při poměru Li-koncentrát:CaSO₄:CaCO₃ = 6: 4: 2.

Sekce : Kovové materiály I

Korozní vlastnosti titanu grade 2 a slitin Ti35Nb6Ta, Ti35Nb pro dentální implantáty

Autor: Bc. Karel Dám
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Luděk Joska, CSc.

Práce se zabývá studiem korozních vlastností slitin titanu, které jsou pro své dobré korozní a mechanické vlastnosti využívány mj. jako dentální implantáty. Některé přípravky používané ve stomatologii mohou v ústní dutině díky svému nízkému pH a obsahu fluoridů vytvořit takové podmínky, kdy dochází k narušení pasivní vrstvy a nežádoucí korozi titanových částí.

Vzorky byly vystaveny prostředí modelující použití stomatologických přípravků. Byly měřeny hodnoty samovolného korozního potenciálu, potenciálového a proudového šumu a studována závislost korozního chování vzorků na pH přípravku a rozdíl chování v kuřáckých a nekuřáckých slinách. U časových závislostí naměřených veličin a šumového odporu, vypočteného z hodnot elektrochemického šumu, byla posouzena jejich schopnost reagovat na korozní děje probíhající na vzorcích.

K porušení pasivní vrstvy na vzorcích docházelo při stejném obsahu fluoridů nejen při nízkém pH, ale vlivem šterbinové koroze i při hodnotách pH vyšších. Bylo prokázáno, že měření elektrochemického šumu může poskytovat okamžitou informaci o korozním chování vzorků.

Sekce : Kovové materiály I

Zpracování odpadních luminoforů ze zářivek a výbojek

Autor: Bc. Jiří Formánek
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Hong Vu, Ph.D.

Cílem práce bylo nalézt podmínky pro převedení Eu a Y, popř. Sr, z odpadních luminoforů ze zářivek a výbojek do roztoku rozpouštěním v anorganických kyselinách. Pro loužení luminoforů, jejichž hlavní složkou jsou fluorofosforečnan vápenatý, fosforečnan strontnatý a oxidy yttria a europia byly použity kyselina sírová, dusičná a chlorovodíková. Byl sledován vliv teploty, poměru k:p na účinnost a kinetiku loužení.

Sekce : Kovové materiály I

Korozní odolnost materiálů pro elektrolyzéry vody v horké koncentrované kyselině fosforečné

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

Alternativou výroby vodíku, jako paliva pro palivové články, ke zpracování fosilních paliv – metanu, je elektrolyza vody. Zavedení této technologie do praxe je závislé na ekonomice provozu, která vyžaduje zdokonalení všech součástí a procesů elektrolyzérů. Jednou z cest zvýšení efektivity je zvyšování provozních parametrů. Vedle zvyšování tlaku a teploty se u elektrolytů s kyselou náplní jedná též o výběr vhodné náplně elektrolyzérů. Kyselé elektrolyzéry pracují například s koncentrovanou kyselinou fosforečnou nebo sírovou. Elektrody musí být schopny nejen zajišťovat distribuci elektrického proudu k reakčnímu povrchu pokrytého katalyzátorem, ale také odolávat korozně extrémním podmínkám. Korozní odolnost musí být dostatečná nejen z konstrukčního hlediska, ale také z pohledu kontaminace elektrolytu korozními produkty, jež mohou snižovat výkon elektrolyzérů. V rámci prezentované práce byla sledována korozní odolnost různých kovů, které jsou vhodné jako konstrukční materiál i jako podklad pro vrstvu katalyzátoru. Nabízí se různé typy vysokolegovaných ocelí, titan, tantal, niob a jejich slitiny. Vysokou odolnost v koncentrované kyselině fosforečné za teploty až 150°C prokázala korozivzdorná ocel FeCr25Ni20Mo3Cu. Naopak titan se v tomto prostředí velmi intenzivně rozpouští.

Sekce : Kovové materiály I

Vliv povlakování na korozní chování dentálních implantátů

Autor: Bc. Monika Hradilová
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Luděk Joska, CSc.

Excelentní biokompatibilita stejně jako rychlost integrace s kostí se u titanových implantátů odvíjí od vlastností (především složení a topografie) jejich povrchu. Pro úpravu povrchů se používají různé metody, mezi které lze zařadit i povlakování, konkrétně TiN a ZrN. Tyto povlaky jsou komerčně využívány pro zvýšení životnosti výrobků, převážně z ocelí, v nejrůznějších aplikacích. Jsou atraktivní nejen svým zlatým zbarvením, ale hlavně vysokou tvrdostí, otěruvzdorností stejně jako deklarovanou vyšší korozní odolností. V oblasti dentální implantologie je studována jejich interakce s tělním prostředím - adheze, růst, množství buněk a také kumulace bakterií, které mohou vyvolat zánět či vést k odmítnutí implantátu. Bylo prokázáno, že TiN i ZrN povlaky nijak nezhoršují biokompatibilitu ani integraci, maskují reaktivnější povrch slitinových titanových implantátů a snižují akumulaci bakterií.

Informací o korozní odolnosti v oblasti ústní dutiny, kdy jsou používány preventivní přípravky obsahující fluoridy, v literatuře chybí. Proto byl pomocí elektrochemické impedanční spektroskopie studován vliv nitridových povlaků TiN a ZrN na korozní chování komerčně čistého Ti grade 2 a jeho slitin plánovaných pro použití v implantologii.

Sekce : Kovové materiály I

Článek s diferenční aerací a katodická pasivace - - Evansův pokus

Autor: Bc. Tomáš Hron
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: prof. Ing. Pavel Novák, CSc.; Ing. Šárka Msallamová.

Vznik elektrochemického článku s diferenční aerací je spojen s korozí uhlíkové oceli ve vodných elektrolytech. K tomuto jevu dochází v případě, že se materiál vyskytuje v prostředí s rozdílným gradientem koncentrace kyslíku. Pokud by obě části materiálu nebyly elektricky spojeny, probíhala by koroze rychleji v místě s větší koncentrací kyslíku, kde by jeho redukce podpořila katodické reakce spotřebovávající elektrony vznikající při anodickém rozpouštění. Pokud jsou různě ovzdušněné části materiálu v elektrickém spojení koroduje paradoxně rychleji ta část, u které je koncentrace kyslíku nižší. V místě s malou koncentrací kyslíku dochází v krátké době k jeho vyčerpání a katodický děj začíná prioritně probíhat na místě s lepším přístupem kyslíku. Odvzdušněná část materiálu se tedy stává anodou, na které probíhá především oxidace materiálu a část s lepším přístupem kyslíku katodou s redukcí složek prostředí. Pro názornou demonstraci chemických změn probíhajících při uplatnění článku s diferenční aerací slouží Evansův pokus.

Sekce : Kovové materiály I

Podmínky pasivace katodicky polarizované oceli

Autor: Bc. Jan Hruška
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Prof. Ing. Pavel Novák, CSc.; Ing. Milan Kouřil, PhD.

Katodická ochrana je dnes běžným způsobem doplňkové protikorozní ochrany. I když je používání více než sto let, není dodnes jednoznačně jasné jakým principem se dosahuje snížení korozní rychlosti chráněného předmětu. Zda-li se jedná o imunitu, potlačenou aktivitu nebo o pasivitu v důsledku zvýšení pH v okolí chráněného předmětu. Pomocí potenciostatických závislostí se ověřoval průběh katodické větve polarizačních křivek s cílem určit ze zjištěné odchylky od lineárního průběhu $\log j - E$) průběh anodické křivky za podmínek rozkladu vody (vyučování vodíku). Zjištěné hodnoty pasivačního potenciálu a korozních proudů je třeba porovnat s již publikovanými daty. Výsledky budou použity pro stanovení podmínek katodické pasivace při katodické protikorozní ochraně.

Sekce : Kovové materiály I

Odolnost ocelí FeCr k bodové korozi; vliv oxidické vrstvy

Autor: Bc. Jiří Rapouch
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Bystrianský, CSc.

Ke vzniku oxidické vrstvy na povrchu korozivzdorných ocelí dochází při zpracovatelských operacích i během provozních expozic. Vzniklá oxidická vrstva zpravidla snižuje odolnost oceli k lokalizované korozi. Je známo, že v rozmezí teplot 200-300°C dochází k přeměně pasivní vrstvy na jiný typ oxidu. Cílem práce bylo zjistit vliv oxidické vrstvy vzniklé při různých teplotách a v různých prostředích na odolnost ocelí k bodové korozi.

Zkoušky odolnosti proti bodové korozi byly prováděny potenciodynamickou polarizací v roztoku NaCl za laboratorní teploty. K experimentům byly použity oceli Fe-Cr, které byly podrobeny oxidaci v rozmezí teplot 140-340°C na vzduchu a ve vodě s různým obsahem kyslíku.

Bylo zjištěno, že oxidace při zvýšených teplotách způsobuje pokles odolnosti ocelí k bodové korozi. Dále bylo pozorováno, že s rostoucím obsahem chromu v oceli roste odolnost k bodové korozi i u ocelí s oxidovaným povrchem. Bylo zjištěno rovněž, že po oxidaci ve vzduchu vznikají vrstvy s lepším ochranným účinkem než při oxidaci ve vodě.

Sekce : Kovové materiály I

Zpracování elektrodové hmoty Zn/MnO₂ baterií

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

V práci byla ověřována možnost recyklace Zn z elektrodové hmoty vypotřebovaných Zn/MnO₂ baterií. Pro loužení elektrodové hmoty byla použita odpadní cca 10% H₂SO₄ z AKU baterií z Kovohutí Příbram Nástupnická, a.s. Při rafinaci výluhů byly odstraňovány nečistoty, které negativně ovlivňují elektrolytické vylučování Zn. Zvláštní důraz byl kladen na odstranění Mn, pro které byla vyzkoušena metoda oxidačního srážení pomocí NaClO. Volbou vhodných podmínek lze dosáhnout prakticky úplného vysrážení Mn ve formě jeho oxidů za současně minimálního spolustrhávání Zn. Z rafinovaných roztoků byl Zn vysrážen jako zásaditý ZnCO₃ s velmi nízkým obsahem nečistot.

Sekce : Kovové materiály I

Permeace vodíku pasivovatelnými materiály

Autor: Václav Šefl
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Bystrianský, CSc.

Permeační metoda je používána ke studiu interakce vodíku s kovy. Permeační chování vodíku je však silně ovlivněno přítomností oxidické vrstvy na povrchu kovu. V práci bude sledována permeace vodíku za podmínek, kdy povrch kovu (na absorpční i extrakční straně) je pokryt různým typem oxidické vrstvy. Bude vyhodnocen vliv vhodného aktivátoru pro alkalická prostředí v nichž jsou oxidické vrstvy na ocelích stabilní.

Sekce : Kovové materiály I

Sestavení a ověření zkušebního zařízení pro zkoušky za zvýšených teplot

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

Za přestupu tepla dochází ke vzniku, popř. i šíření, tepelně únavového poškození. Řídícím dějem je změna teploty v povrchové vrstvě ocelí a tím i vyvolání lokalizované plastické deformace. K tomuto poškození dochází i v chemicky / korozně neaktivním prostředí. V rámci práce bude sestavena zkušební aparatura pro zkoušky tepelné únavy umožňující používat ke zkouškám prostředí s proměnnou agresivitou.

Sekce : Kovové materiály II

Tepelná stabilita kompozitů TiAl-Ti₅Si₃

Autor: Bc. Petra Guhlová
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Doc. Dr. Ing. Dalibor Vojtěch

Titanové slitiny nabízejí atraktivní kombinaci mechanických a chemických vlastností, jako je vysoká pevnost, vynikající korozní odolnost a odolnost proti tečení. Slitiny titanu s křemíkem a hliníkem mohou mít díky své vyšší odolnosti proti vysokoteplotní oxidaci a díky snížené hustotě uplatnění i při vysokoteplotních aplikacích, a proto je v současné době kladen velký důraz na výzkum a zlepšení jejich tepelné stability.

Teoretická část práce je věnována tepelné stabilitě kompozitů in situ na bázi Ti. Předmětem praktické části je výzkum tepelné stability slitiny TiAl-Ti₅Si₃ a slitiny (Ti,Nb)Al-(Ti,Nb)₅Si₃. U těchto slitin byl zkoumán vliv tepelného zpracování na jejich strukturu a mechanické vlastnosti. Slitiny byly vystaveny teplotě 900°C v inertní atmosféře po dobu 150 a 300 hodin.

Sekce : Kovové materiály II

Tepelné zpracování Ni-P a Ni-P-Al₂O₃ vrstev

Autor: Michala Zelinková
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Michal Novák

Cílem práce je srovnat vliv tepelného zpracování na strukturu povlaků na bázi Ni-P a na strukturu kompozitních povlaků Ni-P-Al₂O₃. Vrstvy byly připraveny bezproudovým niklováním, jako substrát byla použita běžná slévárenská slitina hliníku. Na rozdíl od běžných postupů byla použita výztuž ve formě vláken. Připravené vrstvy byly následně tepelně zpracovány při teplotách 400 – 550°C po dobu 1 – 8 hodin. U získaných vzorků byla zkoumána struktura a fázové složení.

Při tepelném zpracování za vyšších teplot dochází na rozhraní mezi substrátem a povlakem k tvorbě intermetalických fází. Vzhledem k rozdílu v teplotní roztažnosti těchto fází a substrátu dochází během chladnutí vzorku často k jejich odprýskávání. Bylo zjištěno, že vyztužením povlaku vlákny Al₂O₃ je možné toto odprýskávání významně omezit.

Sekce : Kovové materiály II

Vliv přídavku ceru na rychle ztuhlé slitiny hliníku

Autor: Václav Hošek
Ročník: B3
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Alena Michalcová

Rychle ztuhlé slitiny hliníku s přechodnými kovy se vyznačují dobrými mechanickými vlastnostmi a výbornou tepelnou stabilitou. Taktéž je známo, že přídavek ceru do těchto slitin ještě zlepšuje jejich mechanické vlastnosti a tak je touto cestou možné připravit velmi lehké slitiny s tvrdostí a pevností srovnatelnou se slitinami titanu. Zkoumané slitiny měly složení Al-5,5 hm.% Cr – 3 hm.% Fe – 1,5hm.% Ti –X hm.% Ce (kde X = 0; 1,5 a 3) a byly připraveny ve formě rychle ztuhlých pásků metodou melt spinning. Z pásků jednotlivých slitin byly připraveny metalografické výbrusy v příčném řezu, které byly pozorovány optickým a rastrovacím elektronovým mikroskopem. Fázové složení slitin bylo určeno metodou XRD. Rychle ztuhlé pásky byly podrobeny selektivnímu rozpouštění, čímž došlo k extrakci intermetalických fází. Tyto fáze byly zkoumány XRD a byly také pozorovány transmisním elektronovým mikroskopem.

Sekce : Kovové materiály II

Rafinace slitiny AlSi10Cu2MgFe

Autor: Tomáš Janoušek
Ročník: B3
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jan Šerák, Ph.D.

Byly připraveny modelové slitiny s odstupňovaným obsahem Fe a Si. Slitiny byly podrobeny tepelnému zpracování sestávajícího z žhání slitiny mezi solidem a likvidem a následného pomalého ochlazení.

Tepelné zpracování se u některých slitin projevilo postupnou změnou morfologie přítomných intermetalických fází obsahujících železo. Morfologie primární fáze β -AlFeSi s deskovou morfologií se změnila na morfologii polyedrickou. Vzhledem k vysoké hustotě těchto fází došlo postupně k sedimentaci těchto polyedrických fází ke dnu kelímku a tím k ochuzení železa v horní části slitiny a k jeho zvýšení v části spodní. Metoda je velmi perspektivní pro průmyslové zpracování recyklovaných hliníkových slitin.

Sekce : Kovové materiály II

Elektrochemické sycení slitin hořčíku

Autor: Jan Kaňok
Ročník: B3
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Alena Michalcová

V posledních letech se oblast vodíkových technologií dostala do popředí zájmu vědců, protože vodík je považován za jedno z potenciálních paliv budoucnosti. Jako nejvhodnější metoda skladování vodíku se jeví jeho uchování v pevné fázi v podobě hydridů lehkých kovů. Tyto hydridy jsou běžně připravovány reakcí kovu s plynným vodíkem za zvýšených teplot a tlaků, což je ekonomicky velmi náročné. Použitím elektrochemického vodíkování je možné značně snížit náklady na výrobu kovových hybridů. Atomární vodík získaný elektrolýzou vstupuje do katody připravené z vhodného materiálu, kde reaguje s materiálem katody za vzniku hybridů. Ty jsou nestabilní za zvýšených teplot a tak při zahřátí nasycené katody dochází ke zpětnému uvolnění vodíku. Cílem této práce je navrhnout vhodné podmínky elektrochemického sycení slitiny MgNi₁₄. Jemná struktura usnadňuje difúzi vodíku materiálem, proto byla slitina před sycením zpracována metodou melt spinning.

Sekce : Kovové materiály II

Mikrostruktura a vlastnosti slitin Fe-Al-Si vyrobených reaktivní sintrací

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

Slitiny tvořené intermediálními fázemi Fe-Al a Fe-Si jsou perspektivními materiály pro použití v náročných aplikacích vyžadujících výborné mechanické vlastnosti a oxidační odolnost při zvýšených teplotách a při nižší hustotě než u běžně používaných slitin niklu nebo železa. V této práci byly připraveny slitiny systému Fe-Al a Fe-Al-Si pomocí práškové metalurgie s využitím reaktivní sintrace. U připravených slitin bylo hodnoceno fázové složení, pórovitost a tvrdost v závislosti na výchozím poměru kovových prášků.

Sekce : Kovové materiály II

Mechanismus a kintetika vzniku intermediálních fází v systémech Ti-Al, Fe-Al, Ti-Al-Si a Fe-Al-Si

Autor: Jiří Kubásek
Ročník: M1
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Pavel Novák, Ph.D.

Reaktivní sintrace (spékání), jako jedna z metod práškové metalurgie, nabízí alternativní způsob výroby některých materiálů na bázi intermediálních fází. Pro efektivní volbu podmínek procesu je však nutné znát kinetiku a mechanismus reakcí, ke kterým při sintraci dochází. V případě systémů, kde dochází k přechodnému vzniku kapalné fáze (např. Ti-Al, Ti-Al-Si, Fe-Al, Fe-Al-Si), lze modelovat průběh reaktivní sintrace reakcí povrchu kompaktního vzorku pevné komponenty (titanu, železa) s taveninami (Al a Al-Si). Kinetiku a mechanismus probíhajících dějů je následně možné vyhodnotit ze závislosti tloušťky, mikrostruktury a fázového složení vznikajících vrstev na době a teplotě procesu. V rámci této práce byl uvedený postup využit ke studiu procesů probíhajících při reaktivní sintraci binárních slitin Ti-Al a Fe-Al a ternárních slitin Ti-Al-Si a Fe-Al-Si. Výsledky ukázaly pozitivní vliv křemíku na rychlost vzniku vrstev intermediálních fází. Bylo popsáno fázové složení vrstev a diskutován mechanismus vzniku intermediálních fází v jednotlivých systémech.

Sekce : Kovové materiály II

Příprava slitin hliníku se zvýšenou teplotní stabilitou

Autor: Bc. Lukáš Kubiš
Ročník: M2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jan Šerák, Ph.D., Ing. Alena Michalcová

V této práci byl zjišťován vliv Ce na teplotní stabilitu rychle ztuhlých hliníkových systémů Al-Fe-Cr-Ti. Byly sledovány slitiny o složení Al_{88,3} Ti_{0,7} Cr_{5,2} Fe_{4,2} Ce₂ Al_{83,8} Ti₁ Cr_{7,15} Fe_{4,52} Ce_{3,5} a pro srovnání slitina Al_{86,7} Ti_{0,8} Cr_{7,5} Fe₅. Z připravených slitin byly připraveny rychle ztuhlé pásky metodou rovinného lití, které byly vystavovány vyšším teplotám po dobu 60min. Pro sledování strukturních změn byl použit elektronový a světelný mikroskop. Změny mechanických vlastností byly sledovány měřením mikrotvrdosti jednotlivých pásků.

Sekce : Kovové materiály II

Oxidační odolnost a tepelná stabilita slitin Ti-Al-Si

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

Slitiny tvořené intermediálními fázemi Ti-Al se vyznačují kromě nízké hustoty také velmi dobrou odolností proti vysokoteplotní oxidaci. Dalšího zlepšení vysokoteplotního chování lze dosáhnout vhodným přidavkem křemíku. V rámci této práce byly testovány slitiny TiAl₂₀Si₁₀, TiAl₂₀Si₁₅, TiAl₂₀Si₂₀ a TiAl₁₀Si₂₀ vyrobené reaktivní sintrací. Oxidační zkoušky byly prováděny při teplotě 1000°C, rychlost oxidace byla vyhodnocována ze změn hmotnosti vlivem tvorby oxidů. Byla studována struktura a fázové složení oxidických vrstev. Zároveň byla průběžně zaznamenávána změna mikrostruktury a tvrdosti materiálu po různých dobách žíhání. Jako referenční materiál byl zvolen titan hutní čistoty. Cílem práce byl popis kinetiky a mechanismu vysokoteplotní oxidace slitin Ti-Al-Si.

Sekce : Kovové materiály II

Struktura a vlastnosti rychle ztuhlé slitiny AlCr_{5,5}Fe₃Ti_{1,5}

Autor: Miroslav Šíma
Ročník: B3
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Alena Michalcová

Rychle ztuhlé slitiny hliníku s přechodnými kovy se vyznačují dobrými mechanickými vlastnostmi a výbornou tepelnou stabilitou. V této práci byla zkoumána slitina se složením Al-5,5hm.% Cr – 3 hm.% Fe – 1,5hm.% Ti, připravená metodou melt spinning při obvodové rychlosti chladicího kotouče 10 m/s. Touto cestou byly připravené tenké pásy, ze kterých byly připraveny metalografické výbrusy v příčném řezu. Struktura pásků byla pozorována optickým mikroskopem. Pro ověření teplotní stability byla slitina žíhána při různých teplotách a následně byla měření mikrotvrdost. Fázové složení pásků bylo určeno metodou XRD. Rychle ztuhlé pásy byly podrobeny selektivnímu rozpouštění, čímž došlo k extrakci intermetalických fází. Tyto fáze byly zkoumány XRD a byly také pozorovány transmisním elektronovým mikroskopem. Elektronovou difrakcí byla prokázána přítomnost kvazikrystalů v rychle ztuhlé slitině.

Sekce : Kovové materiály II

Možnosti výroby kompozitních materiálů s matricí NiAl metodou reaktivní sintrace

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

Slitiny tvořené intermetalickými fázemi NiAl nebo Ni₃Al jsou perspektivní materiály pro vysokoteplotní aplikace, vyráběné obvykle běžným slévárenským postupem. Alternativní metodou jejich výroby je technologie práškové metalurgie zahrnující reaktivní sintraci. Při tomto postupu se smísí prášky kovů, požadované intermediální fáze pak vznikají při sintraci (spékání) slisované směsi prášků. V této práci byla testována možnost využití technologie reaktivní sintrace pro přípravu kompozitních materiálů, kde matici tvoří intermetalická fáze NiAl a výztuží jsou částice Al₂O₃ nebo SiC. Byla vyhodnocena mikrostruktura a tvrdost připravených materiálů v závislosti na objemovém podílu výztuže. Fázové složení produktu bylo porovnáno s termodynamickými předpoklady.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Geopolymerní materiály na bázi popílku

Autor: Lucie Alberovská
Ročník: B3
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Doc.RNDr. František Škvára DrSc.

V práci byly sledovány materiálové parametry geopolymerních materiálů připravených z odpadních popílků a to pevnost v tlaku, vyluhovatelnost a tendence k výkvětům. Vyluhovatelnost byla sledována podle platných předpisů EU a to pro prvky Na, Ca, Al, V, a As. Tendence k výkvětům byla stanovena kvalitativně podle normy ČSN 72 2608 pro stanovení výkvětů na cihlářských výrobcích. Pevnosti připravených geopolymerních materiálů dosahují a často překračují pevnosti standardních portlandských cementů třídy 32.5 až 52.5. Vyluhovatelnost Na a As je závislá na vodním součiniteli použitém při přípravě materiálů. Vymytí povrchové vrstvy geopolymerních materiálů velmi snižuje další vyluhovatelnost. Použití principu výměny iontů Ca vs. Na v případě geopolymerních materiálů nepřineslo kladné výsledky. Výkvěty u geopolymerních materiálů jsou vázány na použití sodných aktivátorů. Při užití draselných aktivátorů nejsou výkvěty viditelné. K odstranění výkvětů dojde při zhutnění geopolymerního materiálu vypálením na teplotu nad 600-800 °C.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Chemická odolnost barnatých skel

Autor: Zdeňka Včelišová
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Prof. Ing. Aleš Helebrant, CSc., Konzultant: Ing. Helena Hradecká

Barnatá křišťálová skla jsou v současné době vyráběna jako levnější alternativa drahých olovnatých křišťálů. Práce navazuje na výsledky předchozí diplomové práce, kdy byla sledována chemická odolnost barnatých skel proti různým vodným roztokům (kyselým i zásaditým). Z uvedených testů překvapivě vyplynulo, že rychlost rozpouštění skel při statickém testu loužení je srovnatelná do destilované vody a alkalického roztoku, ačkoliv je známo, že rychlost rozpouštění v alkalickém prostředí bývá u běžných křemičitých skel výrazně vyšší. Předložená práce se proto podrobněji zabývá porovnáním loužení 2 typů barnatých křišťálových skel ve formě skleněné drti do destilované vody a roztoku NaOH (pH=11). Statické testy byly provedeny bez míchání či za stálého míchání modelových roztoků při laboratorní i zvýšené teplotě (40°C) po dobu 1 až 48 hodin. Výluhy byly hodnoceny měřením pH a stanovením koncentrace vybraných složek (Si, K, Na a Ba) metodou AAS.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Identifikace příměsí keramiky zabrušanského typu

Autor: Petra Babková
Ročník: M1
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Alexandra Kloužková CSc

Tato práce je zaměřena na identifikaci mineralogického složení zabrušanské keramiky za použití analytických metod - XRF, XRD, DTA, TG, Ramanovy spektrometrie a optické mikroskopie. Hlavním předmětem je určení hrubých fází slíd, křemene a živců a zejména příměsí, jejichž prostřednictvím lze určit možné surovinové zdroje historické keramiky. Sledována byla především tzv. černá zrna a uhličitany (kalcit). Právě tyto příměsi jsou pro danou skupinu keramiky zabrušanského typu charakteristické a odlišují ji od keramiky míšeňské, která je v současné době předmětem dalšího výzkumu.

Původ černých zrn, které byly analyzovány termickou analýzou a identifikovány Ramanovou spektrometrií jako grafitický uhlík, lze vysvětlit přítomností uhelných „proklásků“ letny a lupku v surovinovém jílu.

Získané poznatky budou dále využity k porovnání s výsledky analýz středověké míšeňské keramiky zabrušanského typu.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

In vitro testy porézní sklokeramiky připravené z bioaktivního skla Bioglass®

Autor: Iva Březovská
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Dr.Ing.Dana Rohanová, Konzultant: Ing. Diana Horkavcová

Nové materiály, určené k náhradám tvrdých tkání lidského těla, musí projít sérií testů *in vitro* a následně *in vivo*. *In vitro* testy dokážou předpovědět bioaktivitu testovaného materiálu. Simulovaná tekutina je pufrována pufrem TRIS (tris (hydroxymethyl) amino methane), který se využívá k udržení pH na hodnotě kolem 7. Užití pufru TRIS bylo navrženo profesorem Kokubem a standardně se dnes využívá k přípravě roztoku SBF. Ve výluhu jsou sledovány koncentrace Ca a P a v naší práci byly analyzovány i koncentrace Si a Na. Současně je sledován váhový úbytek (nebo přírůstek) i pH roztoku. Dynamický test je uspořádán tak, aby co nejvěrněji modeloval situaci v lidském těle. Vzorek je neustále omýván čerstvým roztokem SBF. Porézní sklokeramika (scaffold) byla testována v roztoku SBF; SBF bez pufru TRIS a v roztoku samotného pufru TRIS. V roztoku SBF bez TRISu a v roztoku SBF (s TRIS) se materiál zpočátku rozpouští, a následně se ionty Ca^{2+} a $(\text{PO}_4)^{3-}$ z roztoku odčerpávali za tvorby fosforečnanu vápenatého. Během expozice vzorků v roztoku TRIS probíhalo neustálé uvolňování Ca^{2+} , Na^+ , $(\text{PO}_4)^{3-}$ i Si^{4+} do roztoku. Testy potvrdily významný vliv pufru TRIS na rychlost rozpouštění testovaného materiálu tak i schopnost tvorby Ca/P fáze v roztoku SBF bez TRIS (tedy jeho možnou bioaktivitu).

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Využití termovize v technologii tavení skla

Autor: Hana Dvořáková
Ročník: B3
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Antonín Lisý, CSc.

V elektrických tavicích pecích se energie potřebná k utavení vsázky na sklovinu dodává systémem elektrod. Na jejich rozložení a připojení ke zdroji střídavého proudu je závislá účinnost pece. Vybavování energie při tavení skloviny v elektrické tavicí peci můžeme simulovat pomocí elektricky vodivého papíru neboť se v něm podobným způsobem vybavuje elektrická energie. Cílem této práce je zjistit možnost napodobení způsobu vybavování energie v teplotně gradientového pole na skutečné peci pomocí fyzikálního modelu z elektrovodivých fólií. Bylo využito dvourozměrných modelů tavicích bazénů pecí z elektricky vodivého papíru, u kterého lze vrstvením měnit elektrickou vodivost. Průchodem elektrického proudu modelem dochází k jeho zahřívání a teplota je v daném místě úměrná vybavovanému výkonu. Termovizní technikou na něm můžeme sledovat teplotní rozložení a tím i koncentraci vybaveného výkonu. Rozsah barev na pořízených infrasnímcích odpovídá ustáleným teplotám na sledovaném modelu. Vyhodnocením snímků se ukáží místa s nižším a vyšším vybavováním energie, která mohou vypovídat o způsobu elektrického ohřevu skloviny v tavicím bazénu pece. Metoda se dá využít k předpovědi tavicí schopnosti dané pece.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Studium vlivu změny surovinového složení na vlastnosti sanitární keramiky

Autor: Lucie Gellerová
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Jana Andertová, CSc.

Zdravotnická keramika je důležitou součástí každodenního života člověka v civilizovaném světě. Keramické výrobky z hlediska hygieny a ostatních užitných vlastností předčí výrobky z jiných materiálů, například polymerních, jimiž se keramiku zatím dosud nepodařilo nahradit. Jedinou známou technologií výroby sanitární keramiky je lití suspenzí do porézních forem.

Práce se zabývá studiem vlivu změny složení licích suspenzí na konečné vlastnosti sanitární keramiky. Cílem práce bylo vytipovat ekonomicky výhodnější jílové suroviny při zachování původních fyzikálně-chemických vlastností licích suspenzí a mechanických vlastností vytvořeného střepeu.

Na základě charakterizace pevné fáze (chemická a fázová analýza, stanovení velikosti a rozdělení velikosti částic), měření tokových vlastností licích suspenzí (základní reologické charakteristiky suspenzí s různými druhy a obsahy aditiv, studium kinetiky tvorby střepeu atd.) a stanovení vybraných vlastností střepeu po nízko- a vysokoteplotním zpracování (smrštění, kritéria hutnosti, pevnost v ohybu atd.) byl vybrán jíl, jenž se vybranými vlastnostmi shoduje s vlastnostmi původní suroviny zahraniční provenience.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Reologie cukerného roztoku jakožto nanofluidu

Autor: Jan Hostaša
Ročník: M1
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Doc. Dr. Dipl. Min. Willi Pabst

Nanofluidy jsou suspenze, jejichž pevnou fází jsou nanočástice (tj. částice o velikosti do 100 nm). Nanofluidy se liší od klasických suspenzí obsahujících větší částice především výrazně větší efektivní viskozitou, která je zpravidla připisována přítomnosti málo pohyblivé vrstvy vodních molekul na povrchu částic, která se strukturou a tuhostí blíží pevné fázi. V této práci je rozvedena myšlenka, že roztok sacharosy je možné považovat za suspenzi tuhých částic o velikosti přibližně 1 nm, včetně vrstvy nepohyblivé vody, tedy za nanofluid. Tuto úvahu v podstatě používal již Einstein (1906) při srovnání svého vztahu pro efektivní viskozitu suspenzí s výsledky experimentálních měření. Cílem této práce je provést srovnání teoreticky vypočtených a v literatuře publikovaných hodnot viskozity cukerného roztoku v závislosti na koncentraci cukru (přepočtené na ekvivalentní objemovou frakci) a určit, do jaké míry lze sacharosu ve vodě skutečně považovat z reologického hlediska za nanofluid. Teoretický výpočet vychází z aproximací molekuly sacharosy koulí resp. sferoidem a používá koncepci "efektivní velikosti částic". Efektivní a tzv. "vnitřní" viskozita je vypočtena za použití Kriegerova vztahu (1972) resp. Brennerovým vztahem (1974). V souvislosti s výsledky této práce je prodiskutován vliv velikosti a tvaru částic na reologii suspenzí s keramickými nanočásticemi.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Tvarování skleněných destiček pro rtg. vesmírné teleskopy

Autor: Martina Landová
Ročník: B3
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Dr. Ing. Martin Míka

Optika pro vysoce pronikavé rentgenové záření je vyráběna nejčastěji z kovových materiálů s vysokou odrazivostí pro tuto oblast. Vyznačují se ale vysokou hustotou, proto je v současné době tendence nalézt technologii využívající materiály s nižší hustotou například sklo nebo křemík jako substrát pro tenkou povrchovou reflexní vrstvu kovu. Tyto destičky pak mají být sestaveny do systému, který fokusuje rentgenové záření do detektoru. Tato práci se zabývá tvarováním destiček z borosilikátového skla Desag D 263 nad transformační teplotou. Rozhodující pro kvalitu výsledného obrazu jsou mikrordsnost a vlnitost povrchu a odchylka tvaru skla od požadovaného tvaru, který určuje forma. Tyto vlastnosti jsou zkoumány v závislosti na čase a teplotě tvarování. Požadovaného tvaru bylo dosaženo volným leháním na konvexní formě, oproti předchozím pokusům, kde byla sklíčka tvarována s přitlakem konkávní formy. Práce obsahuje srovnání těchto dvou metod a je důkazem, že tvarování má vliv na zkoumané vlastnosti.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Měření viskozity zahříváné sklářské vsázky

Autor: Petra Mesteková
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Doc. Ing. Stanislav Kasa, CSc.

Cílem práce bylo navrhnout a sestavit aparaturu na měření viskozity v oblasti 10-104 Pas na principu vytahování kuličky z měřené substance. Viskozimetr byl sestaven podle parametrů tavící pece. Po sestavení následovala kalibrace přístroje na tekutinách o známé viskozitě (oblast 10-104 Pas) při pokojové teplotě. Dále byla proměřena viskozita střepů plochého skla o granulometrii 3-5 mm při teplotách 1000-1500°C. Při tom byly rozlišeny hodnoty viskozity ještě nezhomogenizované a zhomogenizované skloviny. Měření bude rozšířeno o další měření viskozit sklářských vsázek s jiným složením. Výsledky mají být srovnány s jinou metodou měření viskozity.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Analýza koroze vyzdívky celoelektrických pecí z provozních údajů

Autor: Anh Duong Nguyen
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Doc. Ing. Stanislav Kasa, CSc, Konzultant: Ing. Josef Smrček, CSc.

V práci byly proměřeny elektrické proudy, odběr skloviny a teploty v kanálu za provozu tří sklářských tavicích pecí a matematickým způsobem byla vyjádřena rychlost koroze vyzdívky pecí v závislosti na provozních parametrech. Studovaným typem pecí byly Gellovy pece s deskovými molybdenovými elektrodami. Potřebná hustota a viskozita skloviny byla vypočtena pro referenční teplotou 15500C. Měření teploty na pecích bylo prováděno pomocí platinové sondy. Proudů elektrod byly také měřeny provozními přístroji. Celkem byla měření provedena na třech pecích.

V práci byly porovnány příkony a rychlost koroze dna u dvou van (V3 a V4) a také poměr proudů u vany 2, z nichž byla počítána rychlost koroze stěny bazénu pece. Výsledky ukázaly, že příkon u dna vany 4 je větší než příkon u dna vany 3 a tím ztráta energie u vany 4 je rychlejší než vany 3 i když rychlost koroze u vany 3 byla zpočátku trochu větší než rychlost koroze dna vany 4. U vany 2 z porovnání proudů elektrod byly vypočtena rychlost koroze stěny bazénu pece a tím i rychlost jejího stárnutí.

Výsledky této práce mohou být užitečné pro technologii tavení skla a výběr vhodného typu žáromateriálů pro stavbu sklářských tavicích pecí.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Vliv oxidu vzácné zeminy na některé vybrané parametry průmyslově vyráběných skel

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

Cílem mé práce je prozkoumat vliv vybraného oxidu vzácné zeminy v určitém množství na některé parametry průmyslově vyráběných skel. Jedná se o zkoumání vlivu na tyto parametry: stupeň vyčeření skloviny, povrchové napětí, viskozitu, měrný elektrický odpor, krystalizační vlastnosti, hydrolytickou odolnost a na dilatační parametry.

Měření se provádí na následujících průmyslově vyráběných sklovinách: float, bílá obalová sklovina, zelená obalová sklovina, sodnovápenatá křišťálová sklovina, barnatá křišťálová sklovina.

V mé předchozí práci bylo zjištěno, že obsah daného oxidu vzácné zeminy u všech zkoumaných sklovin příznivě ovlivnil stupeň vyčeření a povrchové napětí. Na ostatní parametry působí různě, přičemž záleží na typu skloviny, do které byl vnášen. Cílem současné mé práce je optimalizovat skla na čeření a poté provést opět měření jednotlivých parametrů, aby se prokázal vliv vnášeného oxidu ve skle.

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Vitrifikace radioaktivního odpadu

Autor: Denisa Trypešová
Ročník: B3
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Dr. Ing. Martin Míka

Na celém světě neustále stoupá spotřeba elektrické energie. Provoz a realizace elektráren využívajících obnovitelné zdroje je finančně technicky, ale i kapacitně omezen, stejně tak jako provoz finančně náročných plynových elektráren. Zásoby neobnovitelných zdrojů se ztenčují a nelze opomenout ekologické zatížení emisemi CO₂. Všechny tyto zdroje lze brát spíše jako doplňkové. Se vzrůstajícím využitím jaderné energetiky, ale také vzrůstá množství radioaktivního odpadu, který je třeba bezpečně uložit. Ve své práci se věnuji jedné z možností – vitrifikaci radioaktivního odpadu do skla. Jako matrice jsou používána fosforečná skla. Pro tato skla je typická nízká teplota tavení, nízká viskozita, krátká tavicí doba a vysoký koeficient teplotní roztažnosti. Jejich odolnost se zvyšuje přidáváním některých kovů. My jsme jako aditivum použili Fe₂O₃ v poměru P₂O₅ : Fe₂O₃ - 3 : 2. V takovéto skelné matrici byla studována rozpustnost chromu, který je často se vyskytujícím prvkem v radioaktivních odpadech. Utavené sklo (směs P₂O₅, Fe₂O₃) bylo rozdrceno, rozemleto a následně, po důkladné homogenizaci s různými hmotnostními přídávky Cr₂O₃ (množství 2, 2.5, 3, 3.5, 4, 5 a 7 hm.%), znovu taveno. U výsledného materiálu je zkoumána přítomnost nežádoucí krystalické fáze Cr₂O₃.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Vznik silikátů při reakci křemene s uhličitánem sodným a jejich vliv na tavení sklářského kmene

Autor: Zbyněk Burian
Ročník: M1
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 Na₂O-SiO₂ může vést ke vzniku řady meziproductů ve formě xNa₂O.ySiO₂, kde konečné molární koeficienty x a y nejsou jednoznačně určeny. Takto vzniklé silikáty mohou zásadním způsobem ovlivňovat tavicí proces svými fyzikálními vlastnostmi, především bodem tání a viskozitou.

Prvotně vzniká na styku zrn při reakci sody a písku křemičitan sodný (metasilikát), který taje až při 1089°C na relativně nízkoviskozní taveninu. Metasilikát však na rozhraní s pískem dále reaguje za tvorby dikřemičitanu sodného (disilikátu), který taje při 874°C na vysoceviskozní taveninu.

Cílem této práce bylo připravit definovanou vrstvu metasilikátu na povrchu křemene. Následně pak sledovat průběh a kvantifikovat reakci mezi křemenem a metasilikátem při teplotní expozici v žárovém mikroskopu, kdy metasilikát postupně proreagoval na disilikát.

Z experimentálních dat byl sestaven graf doby reakce metasilikátu na disilikát v závislosti na teplotě, při které reakce probíhala. Dále je popsáno chování písku při zahřátí s přebytkem a naopak s malým množstvím sody.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Geopolymerní keramické materiály na bázi popílku

Autor: Lenka Vinšová
Ročník: B3
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Doc. RNDr. František Škvára, DrSc

Práce byla zaměřena na geopolymerní materiály připravené reakcí sodného a draselného aktivátoru (NaOH resp. KOH, sodné resp. draselné vodní sklo) s popílkem. Jako surovina byl použit český odpadní elektrárenský popílek ze spalování hnědého uhlí. Byly sledovány mechanické vlastnosti a vlastnosti po výpalu na teploty 200 - 1000°C. Záměnou alkalických kationtů (Na vs. K) dochází ke změně vlastností geopolymerních materiálů na bázi popílku (pevnosti, pórovitosti, vlastnosti po výpalu). Je nutno poznamenat, z hlediska dostupné literatury je tato změna iontů v aktivátoru málo prozkoumána. Tato práce si kladla za cíl tyto informace doplnit.

Z hlediska žárových vlastností je optimální složení aktivátoru KOH + K vodní sklo. Směsné alkalické aktivátory pro přípravu geopolymerních materiálů představují další perspektivu ve výzkumu geopolymérů.

Geopolymerní materiály podrobené tepelnému zpracování (do 1000 °C) představují možný další typ keramických materiálů.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Korundová keramika s gradientem pórovitosti

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

Práce je zaměřena na přípravu pórzní korundové keramiky s gradientem pórovitosti v rozmezí cca 20 - 50 % metodou tradičního (TSC) a škrobového (SCC) lití. Gradient pórovitosti je vytvořen pomocí vrstev lišících se obsahem pórotvorného činidla, v tomto případě kukuřičného škrobu s mediánem velikosti $D_{50} = 14 \mu\text{m}$. Vlastnosti jednotlivých vrstev (objemová hmotnost, skutečná a zdánlivá pórovitost a smrštění) jsou stanoveny na odděleně připravených vzorcích ze shodných suspenzí Archimédovou metodou dvojího vážení. Jsou diskutovány rozdíly vzniklé použitými způsoby přípravy. Odlišné smrštění jednotlivých vrstev v případě SCC způsobené různým obsahem pórotvorné přísady je korigováno koncentrací Al_2O_3 ve vodné suspenzi. Byly nalezeny koncentrace suspenzí pro přípravu vrstev metodou SCC s obsahem škrobu 20, 30 a 50 obj.% mající přibližně shodné smrštění. Z porézni vypálených vrstev byly vytvořeny leštěné nábrusy, zhotoveny snímky na optickém mikroskopu a provedena charakterizace pomocí obrazové analýzy. V závěru práce je diskutováno použití obrazové analýzy pro charakterizaci porézni keramiky.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Charakterizace systému glazura-střep

Autor: Jiří Královecí
Ročník: M1
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Alexandra Kloužková CSc.

Předmětem této práce bylo hodnocení systému glazura - střep. Prvním krokem bylo provedení analýz ke stanovení chemického a mineralogického složení tří různých glazur a testovaného střepu pálené střešní krytiny. U obou složek (glazur i střepové hmoty) byl hodnocen především součinitel teplotní roztažnosti, který je určujícím faktorem výběru vhodné glazury pro určitý keramický materiál. Na základě naměřených hodnot teplotních koeficientů roztažnosti bylo stanoveno, zda se ve třech systémech glazura- střep vytváří tahové pnutí nebo tlakové předpětí. Po aplikaci Harkortovy zkoušky – testu zaměřeného na odolnost proti náhlým změnám teploty byla provedena prognóza stability systémů glazura střep s ohledem na jejich případné použití jako glazovaná pálená střešní krytina. Bylo prokázáno, že systém, ve kterém se v průběhu chlazení z teploty výpalu vytvořilo tlakové předpětí je z hlediska dlouhodobé stability nejvýhodnější.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Fotosenzitivní skla pro fotoniku

Autor: Jan Krupička
Ročník: B3
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Dr. Ing. Martin Míka

V současné době je sklo velmi důležitým materiálem pro moderní optické technologie. Použití optických zařízení je např. klíčové pro rychlý přenos a zpracování signálu v telekomunikacích. Významné postavení v této oblasti zaujímají fotosenzitivní skla, ve kterých lze vytvořit miniaturní vlnovodné struktury přímým zápisem laserovým paprskem. Podstatou fotosenzitivity je vyvolání dlouhotrvající změny indexu lomu působením záření o specifické vlnové délce. Změna indexu lomu fotosenzitivních skel na bázi GeO_2 je přímo úměrná koncentraci paramagnetických center $E'(Ge)$ ve skle. Tavicím postupem se nám podařilo připravit fotosenzitivní sodno-germanicitokřemičitá skla. V těchto sklech byla $\text{Ag}^+ \leftrightarrow \text{Na}^+$ iontovou výměnou vytvořeny optické planární vlnovody s několika vidy. U vlnovodů byl vidovou spektroskopií určen hloubkový profil indexu lomu a indexy lomu jednotlivých vidů. Pak byla skla ozařována Hg výbojkou o $\lambda = 360$ nm. Po ozaření jsme znovu změřili profil indexu lomu a určili změnu indexu lomu způsobenou ozařením tímto UV zdrojem.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Vliv vlhkostní roztažnosti na vlastnosti pórovitého keramického materiálu

Autor: Michal Kuneš
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Kloužková Alexandra, CSc., Konzultant: Doc. Vladimír Hanykýř, DrSc.

Práce je zaměřena na stanovení nevratné vlhkostní roztažnosti pórovitého keramického materiálu v závislosti na teplotě výpalu. Jejím cílem je shrnout a ověřit metody, které se ke stanovení vlhkostní roztažnosti materiálu již používají, popř. které jsou v současné době vyvíjeny.

Stanovení charakteristických parametrů střeptu bylo provedeno na střešní krytině dodané předním výrobcem. Další testovací vzorky byly připraveny laboratorně ze stejné surovinové směsi. Jejich následné vysokoteplotní zpracování na různé konečné teploty výpalu zajistilo proměnlivý podíl nekystalické nestabilní fáze, která se vytváří v průběhu výpalu z jílových surovin a je zdrojem stárnutí keramického střeptu tohoto typu. K urychlení procesu stárnutí byly použity jak autoklávová metoda, tak 24 hodinový var. Stanovení vlhkostní roztažnosti bylo provedeno měřením rozměrů vzorků a dilatometrickou metodou. Dalším krokem bylo měření mechanických vlastností připravených vzorků před procesem stárnutí a po jeho „umělém“ vyvolání. Z naměřených výsledků pomocí výše uvedených metod lze navrhnout vhodnou teplotu výpalu výrobku, který pak bude podléhat procesu stárnutí nejpomaleji.

Práce byla podpořena grantem GAČR 103/07/0182

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Příprava bioaktivní vrstvy na Ti substrátu metodou sol-gel

Autor: Renata Oplíštilová
Ročník: M1
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Dr. Ing. Dana Rohanová, Konzultant: Ing. Diana Horkavcová

Implantáty Ti a jeho slitin se chovají v organizmu interně. Pro vytvoření pevné vazby s kostní tkání je nutné jejich povrch upravit. Pomocí metody sol-gel (základem je suspenze SiO_2) je možné připravit bioaktivní vrstvu na kovovém podkladu. Výhoda metody sol-gel je její jednoduchost a příprava tenké a rovnoměrné vrstvy s dobrou adhezí. Byl připraven sol SiO_2 (z tetraethoxysilanu TEOS) se směsí fosforečnanu vápenatého. Precipitáty fosforečnanů (RTG difrakční analýza potvrdila, že se jedná o směs 95% monetitu (CaHPO_4) a 5% brushitu ($\text{CaHPO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$)) byly připravené srážením z roztoků $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ a $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$. Po smíchání základní koloidní suspenze s monetitovým práškem (v poměru 11ml solu a 2 g prášku) byly Ti vzorky potaženy metodou dip-coating a následně vysušeny a vypáleny (350°C po dobu 1 hodiny). Povrch vzorků byl po výpalu hodnocen vizuálně pomocí optické mikroskopie a také podroben testu adheze tzv. „tape - testem“. Bioaktivita takto připravených povlaků byla testována testem in vitro v roztoku SBF (Simulated Body Fluid) za statických podmínek. Připravená vrstva SiO_2 s monetitovou fází měla výbornou adhezi k substrátu a test in vitro naznačil i její bioaktivní chování.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Nevratná vlhkostní roztažnost keramických obkladových prvků

Autor: Tomáš Rienesl

Ročník: M2

Ústav: Skla a keramiky

Školitel: Ing. Jana Andertová, CSc, Konzultant: Ing. Andrea Pešová

Působením atmosférické vlhkosti na keramický materiál dochází k jeho objemovým změnám, obecně definovaným jako nevratná vlhkostní roztažnost. Jedním z hlavních projevů nevratné vlhkostní roztažnosti keramických obkladových prvků je jejich stárnutí spojené s následnou degradací a poškozením výrobku. Podmínky ataku přírodních vlivů na keramický materiál a jejich důsledek lze simulovat pomocí hydrotermální expozice (působení vlhkosti a teploty).

Práce se zabývá studiem vlivu hydrotermální degradace na keramické materiály a hledáním relací mezi podmínkami hydrotermální expozice a následnými fyzikálními a strukturními změnami keramického materiálu (objemové změny vyjádřené hodnotou nevratné vlhkostní roztažnosti a vazebné změny detekované vybranými analytickými metodami).

Experimenty byly provedeny na keramickém materiálu připraveném z přírodních surovin (jílových minerálů). Připravené (vylišované a vysokoteplotně zpracované) vzorky byly podrobeny hydrotermální expozici za definovaných podmínek v autoklávu. Byl vyhodnocen vliv hydrotermální expozice na fyzikální a chemické změny testovaných materiálů a nalezena vzájemná korelace mezi nevratnými délkovými a strukturními změnami testovaného materiálu

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Očkování prekursoru pro syntézu tetragonálního leucitu

Autor: Petra Šantorová

Ročník: M2

Ústav: Skla a keramiky

Školitel: Ing. Kloužková Alexandra, CSc., Konzultant: Ing. Martina Mrázová

Očkování prekursoru je efektivní cesta ke snížení krystalizační teploty a aktivační energie krystalizace. Dosud publikované studie popisují možnost očkování při syntéze zeolitů, avšak tento způsob urychlení krystalizace při syntéze leucitu dosud nebyl popsán. Cílem práce bylo navrhnout a provést očkování amorfního prekursoru, který byl hydrotermálně syntetizován při různých reakčních časech a následně kalcinován při teplotě 850, 900 a 950 °C. Z difraktogramů byly vypočteny stupně přeměny amorfního prekursoru v krystalický leucit. Pomocí programu Era a Excel byly vypočteny kinetické parametry krystalizace n a K . Z difraktogramů je zřejmé, že při použití očkování prekursoru došlo k úplné přeměně v krystalický leucit do teploty 950 °C už po 2 hodinách, kdežto u neočkování prekursoru až po 24 hod.

Práce byla podpořena grantem MPO 2A-1TP/063

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Tepelná vodivost porézní keramiky

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

Tepelná vodivost je jedná z klíčových vlastností. Cílem práce bylo připravit za použití metod škrobového lití (SCC) a tradičního lití (TSC) vzorky porézní korundové keramiky pro stanovení tepelné vodivosti. Pro přípravu těchto vzorků bylo nejprve třeba navrhnout a zhotovit formy ve tvaru tablet. Pro tradiční lití byly vytvořeny formy sádrové a pro škrobové lití kovové - mosazné. Pro vlastní lití byly použity vodné suspenze s koncentrací 70 – 78 hm.% Al_2O_3 a s obsahem 5 – 50 obj.% pórovatného činidla (bramborový, pšeničný, kukuřičný a rýžový škrob). Po výpalu na teplotu 1570 °C byly vzorky charakterizovány z hlediska objemové hmotnosti, zdánlivé pórovitosti a skutečné pórovitosti. Na takto zhotovených vzorcích byla metodou laser flash měřena tepelná vodivost. Stanovené hodnoty tepelné vodivosti v závislosti na pórovitosti byly proloženy a porovnány s hodnotami publikovanými v literatuře.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Ultrazvuková preklacifikace dentálních implantátů z titanové slitiny

Autor: Milan Touš
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Dr. Ing. Dana Rohanová

Dnes již v klinické praxi používané dentální implantáty se upravují na povrchu jak tryskáním a broušením, tak leptáním kyselinami a zásadami (STi-BioC, Lasak, s.r.o.). Na povrchu Ti nebo Ti6Al4V se po těchto úpravách vytváří gelová vrstva TiO_2 s porézní strukturou (a obsahem Na^+ iontů). Porézní mezivrstva je již připravena pro inkorporaci kalcifikačních iontů a kostních buněk během prekalifikace, respektive osseoindukce. K dosažení rychlé indukce kostního apatitu (HAp) a tvorby pevného spoje kost – implantát je třeba dodat do okolí implantátu dostatek stavebních jednotek (Ca^{2+} a $(\text{PO}_4)^{3-}$) v co nejkratší době. Pro zkrácení této periody byly vyvinuty postupy prekalifikace, tj. srážení tenké vrstvy fosforečnanu vápenatého (Ca/P) z přesyceného roztoku SCS (Supersaturated calcification Solution).

Inkorporace iontů Ca^{2+} a $(\text{PO}_4)^{3-}$ z roztoku SCS pomocí ultrazvuku zkrátí čas přípravy bioaktivní vrstvy a navíc se získá dobře rozpustná amorfnní vrstva fosforečnanu vápenatého. In vitro testy za statických podmínek bylo zjištěno, že takto připravený povrch má bioaktivní schopnosti a dynamické testy in vitro naznačily, že by se mohl urychlit proces vhojení implantátu.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Vyhořívání organických látek z nanokompozitní oxidové keramiky

Autor: Milka Tusinovski
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Jana Andertová, CSc., Konzultant: Ing. Tomáš Štícha

Keramické materiály jsou perspektivní oblastí na poli výzkumu nanokompozitních materiálů. Pro přípravu bezdefektních keramických nanokompozitů je klíčovým problémem zvládnutí jak procesu tvarování, tak procesu tepelného zpracování. Dílčí kroky procesu přípravy keramických materiálů vyžadují modifikaci tvarovacích směsí pomocí různých typů organických sloučenin (rozpouštědel, deflokulantů, pojiv, plastifikátorů, pórotvorných činidel, atd.). Při tepelné expozici těchto látek dochází k jejich rozkladu za vývinu plyných produktů. Z tohoto důvodu je nutná volba nezávadného režimu výpalu s ohledem na možnost dokonalého vyhoření organických složek pro zabránění vzniku defektů keramického materiálu spojených s příliš rychlým vývojem spalin.

Práce se zabývá studiem tepelné degradace pórotvorného činidla sloužícího k řízení pórovitosti keramického materiálu na bázi ZrO_2 připravovaného metodou lití vodné suspenze na pórovitý blok. Vyhořívání je studováno s cílem nalezení optimálních podmínek nezávadného výpalu volbou nárůstu teploty, tzn. je studována závislost rychlosti vyhořívání organických aditiv na rychlosti ohřevu. Pomocí termogravimetrické analýzy jsou studovány hmotnostní úbytky pórotvorného činidla v průběhu jeho tepelné expozice s odlišnými režimy vyhořívání.

Sekce : Aplikována mineralogie

Nanoplniva pro přípravu nanokompozitních polymerů: Podvojně vrstevnaté hydroxidy interkalované organickými anionty s vinylovou skupinou

Autor: Eva Jindová
Ročník: M2
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: Doc. Ing. František Kovanda, CSc.

Práce je zaměřena na přípravu podvojných vrstevnatých hydroxidů typu Mg-Al a Zn-Al interkalovaných organickými anionty, konkrétně anionty kyseliny akrylové, methakrylové, vinylbenzoové a 2-akrylamido-2-methyl-1-propansulfonové (AMPS), které lze využít jako komonomery při přípravě nanokompozitních polyakrylátů, a dále anionty kyseliny 4,4'-azobis(4-kyanopentatoové) (ACPA, iniciátor polymerace) a dodecylsírové (hydrofobizační činidlo). Uvedené anionty byly do hostitelské struktury podvojných vrstevnatých hydroxidů interkalovány během aniontově-výměnné reakce s využitím prekurzorů v dusičnanové formě. Uvedené interkaláty se podařilo připravit také přímo koprecipitační reakcí s výjimkou vzorků interkalovaných anionty AMPS a ACPA. Polybutylmethakrylátové latexy s přídavkem modifikovaných podvojných vrstevnatých hydroxidů byly připraveny in situ emulzní polymerací. Provedené analýzy potvrdily vytvoření disperze anorganických (nano)částic v polymerní matici. Nanokompozitní polymer vznikl také po přidání podvojně vrstevnatého hydroxidu v dodecylsulfátové formě, v němž byla část interkalovaných aniontů nahrazena anionty AMPS. Pokud byl použit produkt interkalovaný dodecylsulfátovými anionty bez následné modifikace anioty AMPS, nedošlo během polymerace k exfoliaci hydroxidových vrstev.

Sekce : Aplikovaná mineralogie

Antimon ve stavu Sb (V) a jeho sorpce na modifikované jílové minerály

Autor: Ondřej Pařízek
Ročník: B3
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: Ing. Barbora Doušová, CSc.

Antimon (latinsky Stibium) patří mezi kovy, které jsou lidstvu známy již od starověku. Obzvláště v poslední době se antimon začal používat jako levná nehořlavá přísada při výrobě polyethylentetraftalátu (PET) a v automobilovém průmyslu (akumulátory, brzdové destičky). Vzhledem k rozmachu obou uvedených odvětví se antimon stává nebezpečným pro životní prostředí. Antimon se v životním prostředí vyskytuje především ve formě oxoaniontů Sb(III) a Sb(V), čímž se velmi podobá arsenu. Antimon je blízký arsenu také svou toxicitou a chemismem, mezi které lze zařadit i sorpční vlastnosti. Tématem této práce je sorpce Sb(V) na upravené a neupravené jílové minerály a porovnání výsledků s hodnotami získanými pro arsen. Jako sorbenty byly použity čisté kaoliny ze Sedlece a Horní Břízy (Západní Čechy) upravené Fe(2+), Fe(3+), Al(3+).

Sekce : Aplikovaná mineralogie

Složení geopolymérů a jejich stabilita

Autor: Martin Koiš
Ročník: M2
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: Ing. David Koloušek, CSc.

Geopolymery jsou anorganické nekovové materiály vznikající studenými chemickými reakcemi mezi alkalickým aktivátorem a pevnou komponentou, kterou bývá nejčastěji metakaolin nebo elektrárenský popílek. Tyto látky vznikají při laboratorní syntéze za normální teploty a tlaku. V současné době jsou považovány za amorfni ekvivalenty zeolitů a jsou zjišťovány podmínky, za kterých dochází k jejich vzniku.

Cílem mé práce byla syntéza tělísek na bázi metakaolinu, vodního skla a roztoku hydroxidu sodného. K přípravě tělísek byl používán kalcinovaný kaolin při různých teplotách a granulometrii, ke kterému bylo přidáváno konstantní množství vodního skla a po jednodenním odstání vypočtené množství roztoku hydroxidu sodného. Následně byly měřeny pevnosti v tlaku tělísek, vodné výluhy tří hlavních prvků a u vybraných tělísek byly zjišťovány sekundární fáze pomocí RTG difrakční fázové analýzy.

Sekce : Aplikovaná mineralogie

Geochemie selenu v CHKO Český kras

Autor: Stanislava Krejčová
Ročník: M2
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: Ing. Barbora Doušová, CSc.

Selen je prvek běžně přítomný v životním prostředí. Přestože je pro lidský organismus esenciální, ve vyšších koncentracích má toxické účinky a může způsobovat závažná onemocnění. Proto je třeba přítomnost selenu v životním prostředí sledovat.

V obci Suchomasty na Berounsku se v posledních letech objevily zvýšené koncentrace selenu v nově vybudovaném obecním vodovodu. Cílem této práce je ověřit přítomnost, obsah a formy selenu v půdách a rostlinných materiálech odebraných v blízkosti vodního zdroje a případně objasnit původ znečištění vodního zdroje selenem.

Odebrané pevné vzorky ze zavezené skládky, tří půdních profilů a rybníčního dna byly vysušeny, zhomogenizovány a roztříděny podle zrnitostních podílů do několika frakcí, které byly následně mineralizovány HNO_3 , HCl , HF a H_2O_2 v mineralizačním mikrovlnném zařízení Berghof MWS2. U půdních výluhů bylo stanoveno pH, obsah selenu v mineralizovaných vzorcích byl měřen metodami AAS a ICP-OES.

Sekce : Aplikovaná mineralogie

Směsné oxidy vznikající při kalcinaci podvojného vrstevnatého hydroxidu Co-Fe-Al

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

V předložené práci jsou sledovány změny fázového složení směsných oxidů vznikajících při kalcinaci podvojného vrstevnatého hydroxidu obsahujícího v hydroxidových vrstvách kationty Co, Fe a Al. Podvojný vrstevnatý hydroxid s molárním poměrem kationtů $\text{Co:Fe:Al} = 4:1:1$ byl připraven srážecí reakcí roztoků dusičnanů v alkalickém prostředí při teplotě $35\text{ }^\circ\text{C}$ a $\text{pH} = 10$. Vzniklý produkt pak byl kalcinován na vzduchu při teplotách $200 - 1100\text{ }^\circ\text{C}$. Připravené vzorky byly charakterizovány metodami termické analýzy, práškové rentgenové difrakční analýzy, Ramanovy spektroskopie a redoxní analýzy. Endotermní efekt na křivce DTA indikoval rozklad podvojného vrstevnatého hydroxidu při $200\text{ }^\circ\text{C}$. Tepelným rozkladem vznikl směsný oxid se strukturou spinelu, který postupně krystalizoval až do teploty $1000\text{ }^\circ\text{C}$. V Ramanových spektrech kalcinačních produktů připravených při $500 - 1000\text{ }^\circ\text{C}$ byl zjištěn pás s vlnočtem 696 cm^{-1} , který zřejmě souvisí s přítomností Al^{3+} ve struktuře spinelu. Po rozkladu podvojného vrstevnatého hydroxidu pravděpodobně vzniká jako primární fáze spinel typu Co_3O_4 s vysokým obsahem kobaltu, do kterého se s rostoucí teplotou postupně zabudovávají kationty Fe a Al z amorfních složek. Při vysokých kalcinačních teplotách ($1100\text{ }^\circ\text{C}$) byl pozorován částečný rozpad Co-Fe-Al spinelu za vzniku Co_3O_4 a CoO .

Sekce : Aplikovaná mineralogie

Vlastnosti modifikovaných aluminosilikátů

Autor: Tereza Mrázová
Ročník: B3
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: Ing. Barbora Dousova, CSc.

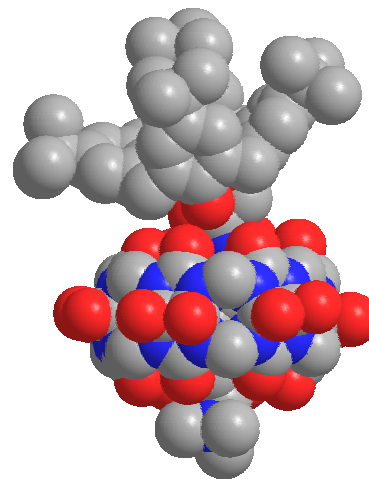
Bentonit je zbytková, nepřemístěná jílovitá hornina s mohutnou sorpční schopností, vysokou kationtově výměnnou kapacitou, bobtnáním a plastičností. Bentonity vznikly mechanickým a chemickým zvětráváním matečné horniny (v alkalickém prostředí), především sopečných tufů a tufitů, v menší míře i andezitů, ryolitů, čedičů a jiných převážně třetihorních hornin. Je to levný a snadno dostupný materiál, který má mnoho využití jako např. plastifikátor v keramických hmotách, protipožární ochrana v hasicích zásypech, sorbent atd. Má práce se zaměřuje na možnost využití bentonitů k sorpcím toxických oxoaniontů As(V) a Se(IV) z vodných systémů. K práci byly využity dva české bentonity - kvalitní surovina z Černého vrchu (kraj Ústecký) a méně kvalitní z Maršova (kraj Jihočeský), které byly modifikovány ionty $\text{Fe}(2+)$, $\text{Fe}(3+)$ a $\text{Al}(3+)$.

Sekce : Organická chemie B1

Studium interakcí derivátů cucurbiturilu s calixareny

Autor: Markéta Zajícová
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Jan Budka, Ph.D.

Cucurbiturily jsou makrocyclické sloučeniny vyznačující se velmi nízkou rozpustností ve známých rozpouštědlech. V kyselém prostředí vytvářejí velmi ochotně komplexy s aminy. Cílem této práce je modifikovat skelet cucurbiturilu tak, aby byl lépe rozpustný v běžných rozpouštědlech a následně připravit derivát calixarenu, který by mohl vytvářet komplex s cucurbiturilem. Na obrázku je přepokládaná struktura komplexu derivátu cucurbiturilu s calixarenem. Vodíky nejsou pro vyšší přehlednost zobrazeny.



Sekce : Organická chemie B1

Příprava konjugátů flavinu a cyklodextrinu

Autor: Vladimír Herzig

Ročník: B3

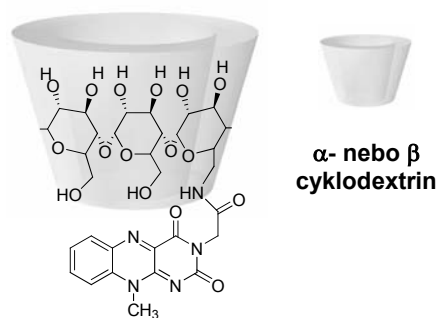
Ústav: Ústav organické chemie, ÚOCHB AV ČR

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

Cílem práce bylo připravit konjugáty

3-(karboxymethyl)flavinů s α - a β -cyklodextrinem (obr. 1) jako prekursory organokatalyzátorů pro enantioselektivní oxidace sulfidů. Nejprve byly připraveny 6-amino-6-deoxy- α - a β -cyklodextriny. Pro přípravu monoamínu α -cyklodextrinu byla vyvinuta nová metoda syntézy výchozího 6-bromo-6-deoxy- α -cyklodextrinu. Aminoderiváty byly následně spojeny amidickou vazbou s 3-(karboxymethyl)flavinem. K tomu se ukázala nejvhodnější aktivace činidly BOP nebo PyBOP za přítomnosti diisopropylethylaminu.

V současné době jsou zkoumány postupy vedoucí k přípravě kvartérních amoniových solí těchto konjugátů, které jsou aktivními katalytickými species.



Obr. 1

Sekce : Organická chemie B1

Polyfluoralkylované imidazoliové soli s aromatickými spojkami

Autor: Vendula Kelbichová

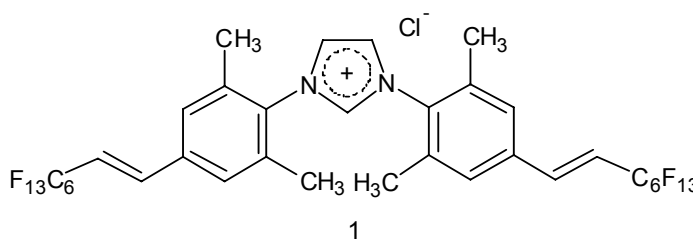
Ročník: B3

Ústav: Organická chemie

Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

V naší laboratoři se zabýváme přípravou NHC (N-heterocyklických karbenů) s polyfluorovanými řetězci, které jsou perspektivními ligandy pro přípravu fluorových variant Grubbsova nebo Grubbsova-Hoveydova katalyzátoru. Klíčovými intermediáty pro jejich přípravu jsou polyfluoralkylované imidazoliové soli.

Ve své práci jsem se věnovala imidazolovým solím s fluorovanými řetězci oddělenými od centrálního heterocyklu nefluorovanými aromatickými spojkami. První cílovou molekulou, 1,3-bis{2,6-dimethyl-4-[(2-(perfluorhexyl)ethenyl)]fenyl}imidazolium-chlorid (**1**), jsem získala čtyřstupňovou syntézou. Nejprve jsem z 2,6-dimethylanilinu přímou jodací připravila 4-jod-2,6-dimethylanilin a následně reakcí s glyoxalem v kyselém prostředí N,N'-bis[(4-jod-2,6-dimethyl)fenyl]ethandiyldendiamin. Klíčový krok, Heckova reakce tohoto diiminu s (perfluorhexyl)ethenem vedla k N,N'-bis[2,6-dimethyl-4-(2-perfluorhexyl)vinyl]fenylethandiyldendiaminu, který následnou reakcí s (chlormethyl)ethyletherem poskytl imidazoliovou sůl **1**.

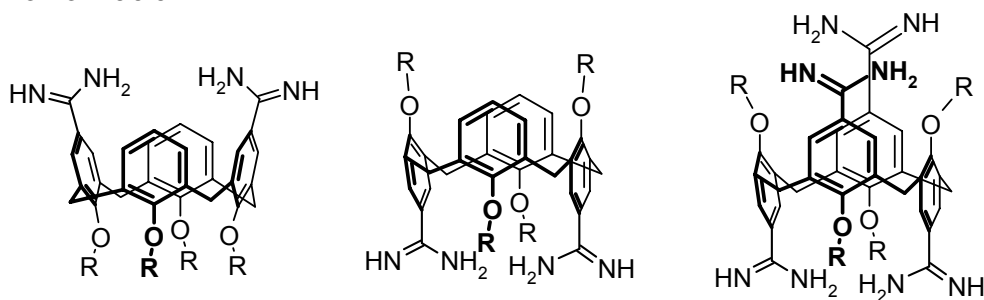


Sekce : Organická chemie B1

Využití trimethylhliníku pro přípravu amidinů

Autor: Tereza Loužilová
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.

Trimethylhliník lze v kombinaci s chloridem amonným použít pro přípravu amidinů z nitrilů. Cílem práce je vypracovat syntetický postup pro převedení různých nitrilů na amidiny. Především se jedná o přípravu amidiny na bázi calix[4]arenů s různým stupněm substituce a v různých konformacích.



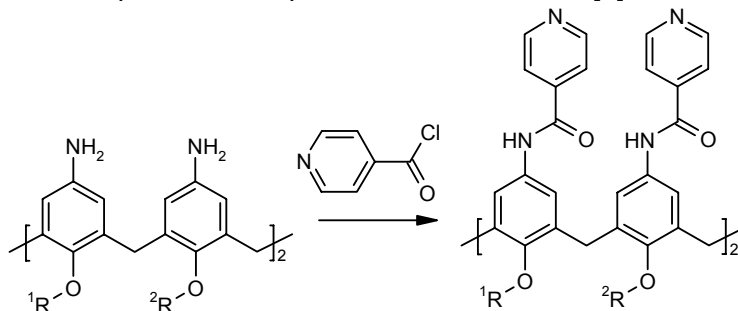
Výchozí nitrily byly připraveny bromací a následnou substitucí za nitrilovou skupinu. Vhodné podmínky reakce byly testovány na modelovém substrátu – dinitrilu kyseliny tereftalové.

Sekce : Organická chemie B1

Syntéza a vlastnosti nových derivátů calix[4]arenů

Autor: Oldřich Hudeček
Ročník: B2
Ústav: Organické chemie
Školitel: Prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc., Ing. Ondřej Kundrát

Deriváty calix[4]arenů v *konické* konformaci obsahující čtyři isonikotinoylamino skupiny na horním okraji jsou schopny tvorby vzájemných asociátů. Způsob, jakým ke tvorbě těchto supramolekulárních struktur dochází, není zatím zcela známý. Z tohoto důvodu byly navrženy isonikotinoylamino deriváty s nesymetricky substituovanými spodními okraji, u kterých by měl být způsob tvorby asociátů rozpoznatelný pomocí ^1H -NMR spektroskopie. Tato práce se zabývá derivatizací spodního okraje calix[4]arenu, vedoucí k distálně nesymetricky substituovaným derivátům. Byla zkoumána syntéza a vlastnosti těchto látek a rovněž jejich použití pro přípravu základního nesymetrického prekursoru v podobě tetraaminocalix[4]arenu.



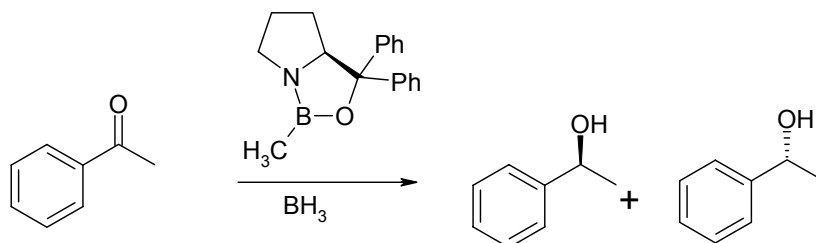
Sekce : Organická chemie B 2

Enantioselektivní redukce karbonylové skupiny

Autor: Jiří Veselý
Ročník: B3
Ústav: Organická chemie
Školitel: Ing. Václav Kozmík, CSc.

V rámci spolupráce se společností Cayman Pharma s.r.o. byly hledány optimální podmínky pro redukci oxoskupiny na uhlíku C15 v prostaglandinovém skeletu. V této práci byla provedena série pokusů s cílem nalézt optimální podmínky pro redukci karbonylové skupiny v přítomnosti opticky aktivního oxazaborolidinu (teplota, poměr substrát : činidlo), jako substrát pro tuto studii byl zvolen acetofenon.

Za zjištěných optimálních podmínek bude prováděno testování účinnosti dalších oxazaborolidinových činidel.

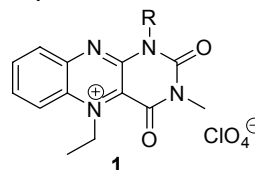


Sekce : Organická chemie B1

1-Alkylalloxaziniové soli jako katalyzátory oxidace sulfidů v dvoufázových systémech

Autor: Kateřina Klímová
Ročník: B3
Ústav: Organická chemie
Školitel: Ing. Radek Cibulka, Ph.D.

Selektivní oxidace sulfidů na sulfoxidy pomocí postupů šetrných k životnímu prostředí je v posledních desetiletích v popředí zájmu chemiků. Jednu z perspektivních metod představuje sulfoxidace peroxidem vodíku katalyzovaná alloxaziniovými solemi (např. látkou **1a**). Tato metoda by v případě aplikace chirálních alloxaziniových solí mohla být využívána i pro stereoselektivní sulfoxidace. Překážkou pro toto využití je však relativně rychlá nekatalyzovaná oxidace probíhající vedle katalyzované reakce. Pro účely stereoselektivní oxidace je tedy nezbytné nekatalyzovanou reakci co nejvíce potlačit. Jednou z možností by mohlo být provedení reakce v heterogenním systému voda-organické rozpouštědlo, kde by flavinová sůl působila jako přenašeč peroxidu vodíku z vodné vrstvy do organické fáze obsahující lipofilní substrát. Cílem práce je příprava série různě lipofilních 1-alkylalloxaziniových solí, které budou testovány jako katalyzátory oxidace sulfidů peroxidem vodíku v heterogenních systémech voda-organická fáze.



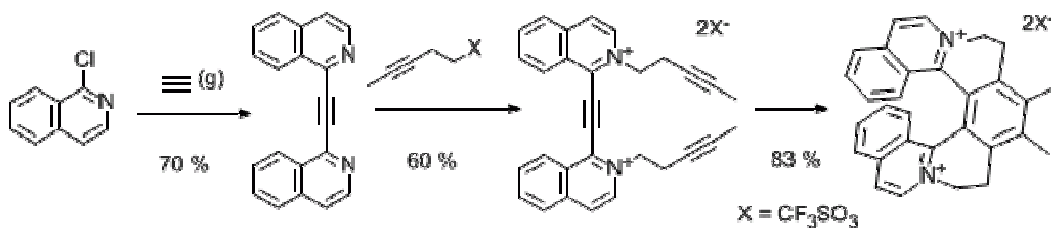
- a: R = CH_3
- b: R = C_2H_5
- c: R = C_4H_9
- d: R = C_6H_{13}

Sekce : Organická chemie B1

[7]HELQUAT: Robustní třístupňová syntéza vysoce helikálních dikationtů

Autor: Lukáš Severa
Ročník: B3
Ústav: UOCHB
Školitel: Mgr. Filip Teplý, Ph.D.

Byl vyvinut syntetický přístup k nové skupině vodorozpustných dikationických helikálních struktur se sedmi kondenzovanými kruhy – [7]helquatům. Syntetickou cestu tvoří pouze tři kroky: Sonogashirův coupling chloroisochinolinu s plyným acetylenem, biskvarternizace takto vzniklého produktu pomocí příslušného triflátu a klíčová [2+2+2] cyklotrimerizace dikationického triynu. Na purifikaci dikationtů není třeba chromatografie – stačí promytí vhodnými rozpouštědly či extrakce. Dle provedených DFT výpočtů (B3LYP/6-31G*) by jeden z připravených helikálních dikationtů měl být konfiguračně stabilní, tedy rozštěpitelný na helikální enantiomery. Dikationty plánujeme testovat jako organokatalyzátory. Díky podobnosti s viologeny lze očekávat herbicidní aktivitu. Na základě příbuznosti s ethidiem by látky též mohly interagovat s DNA a vykazovat fluorescenci.



Sekce : Organická chemie B1

Nová syntéza (S)-propargylglycinu, účinné antibakteriální látky

Autor: Tomáš Mašek
Ročník: B3
Ústav: UOCHB
Školitel: Ilya Lyapkalo, Ph.D.

(S)-Propargylglycin (1), izolovaný z blíže neurčeného druhu Streptomycet, je nekódovanou aminokyselinou vykazující antibakteriální aktivitu. Byla vyvinuta nová efektivní syntéza cílové látky 1, zahrnující eliminaci vody z aldehydové skupiny vedoucí k v přírodě neobvyklé terminální trojně vazbě. P1-báze, t-Butylimino-tris(1-pyrrolidiny)-phosphoran (2), sloužící jako činidlo v klíčovém kroku syntézy byla připravena novou zjednodušenou metodou dovolující obejít se bez formace a následného uvolnění soli P1-báze.

Aby bylo dosaženo maximální enantiomerní čistoty, byl navržen plán syntézy vycházející z hydrochloridu dimethyl esteru přírodní (s)-glutamové kyseliny. Po zavedení dvou Boc chránících skupin následovala vysoce selektivní redukce esterové skupiny na postranním řetězci za vzniku aldehydu. Výsledný monoaldehyd byl převeden na terminální alkyn za pomoci $\text{CF}_3(\text{CF}_2)_3\text{SO}_2\text{F}$ v kombinaci s P1-bází. Po uvolnění aminoskupiny byl reakcí s chráněným valinem připraven dipeptid, aby byla prokázána enantiomerní čistota produktu pomocí techniky NMR.

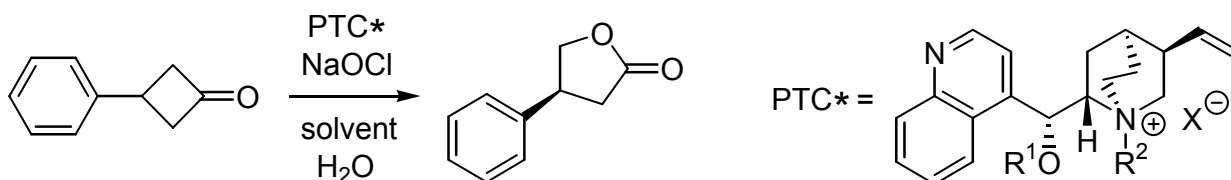
Fosfazenová báze 2 byla připravena z pyrrolidinu, PCl_3 a t-Bu azidu ve dvou krocích pomocí Staudingerovy reakce. Vzniklý triazenový meziprodukt byl poprvé izolován a jeho struktura byla určena metodou rentgenové krystalografie. Báze 2 byla pak získána jeho termolýzou velmi čistá a v neutrální formě. Použitý t-Bu azid je snadno připravitelné a bezpečné činidlo.

Sekce : Organická chemie B2

Oxidace Baeyerova-Villigerova typu katalyzované fázovým přenosem

Autor: Eva Hanzlová
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Tomáš Martinů, Ph.D.

Stereoselektivní oxidace Baeyerova-Villigerova typu (BVO) byly dosud realizovány především biokatalyticky nebo pomocí komplexů přechodných kovů. Cílem naší práce je vyvinout alternativní metodu pro stereoselektivní BVO založenou na chirální katalýze fázovým přenosem. Modelový prochirální substrát, 3-fenylcyklobutanon, je desymetrizován oxidací chlornanem sodným na příslušný lakton v systému voda-organické rozpouštědlo za přítomnosti chirálních katalyzátorů fázového přenosu (PTC) odvozených od chininových bází. Práce rovněž přináší základní poznatky o možnostech použití chlornanů při BVO.



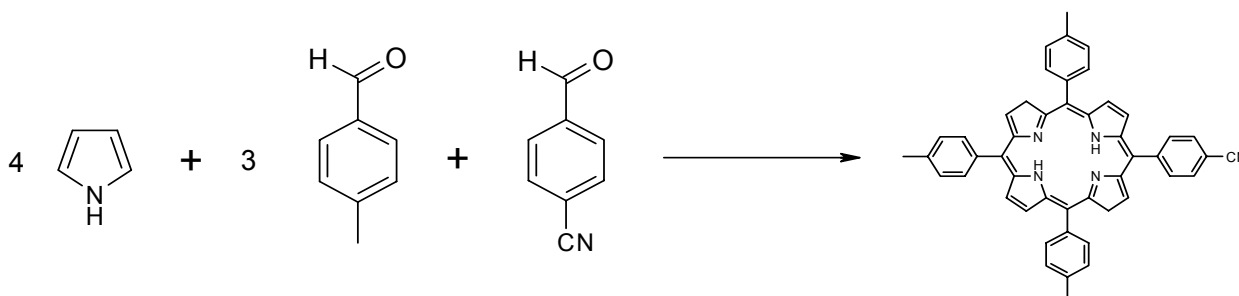
Sekce : Organická chemie B2

Syntéza porfyrinů a jejich amidinů

Autor: Jiří Mikšátko
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.

Porfyriny mají nezastupitelnou úlohu v mnoha metabolických procesech, protože jsou schopny tvořit komplexy s kovovými ionty.

Cílem práce je syntéza a prověření vlastností tris(paratolyl)-4-kyanofenylporfyrinu a jeho amidinu. Pro přípravu tris(paratolyl)-4-kyanofenylporfyrinu byly použity dvě různé syntézy a porovnána jejich výtěžnost a snadnost provedení.



Před převedením na amidin budou prozkoumány schopnosti nitrilové skupiny tvořit komplexy se stříbrem. Převedení nitrilové skupiny na amidinovou otevírá další možnosti přípravy zajímavých krystalových struktur.

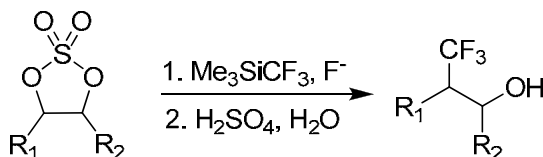
Sekce : Organická chemie B2

Nukleofilní trifluormethylace za použití trimethyl(trifluormethyl)silanu

Autor: Pavel Weber
Ročník: B3
Ústav: Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.; Ing. Petr Beier, Ph.D.

Zavedení trifluormethylové skupiny do organické molekuly může přinést významné změny v jejích fyzikálních, chemických a biologických vlastnostech, jako je třeba zvýšení lipofility u biologicky aktivních látek. Trimethyl(trifluormethyl)silan (Me_3SiCF_3) je známé trifluormethylační činidlo pro zavádění CF_3 skupiny do molekul aldehydů a ketonů.

Cílem mé práce bylo najít nové trifluormethylační postupy na bázi tohoto činidla pro další typy substrátů. Studoval jsem zejména nukleofilní substituce na aromatickém jádře nebo cyklických sulfátech za vzniku trifluoromethylovaných aromátů nebo trifluormethylovaných alkoholů jako perspektivních fluorovaných stavebních bloků pro další syntézy.



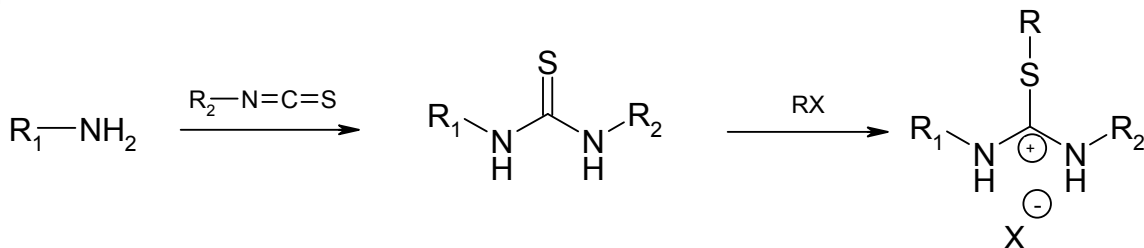
Sekce : Organická chemie B2

Isothiouroniové soli jako ligandy pro interakci s anionty

Autor: Eva Konečková
Ročník: B3
Ústav: Organická chemie
Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.

Isothiouroniové soli byly v poslední době využívány jako ligandy pro komplexaci aniontů. Vzhledem k jejich vysoké afinitě k oxoaniontům jsou vhodnými kandidáty pro rozpoznávání těchto aniontů a jejich derivátů za fyziologických podmínek. Významnou úlohu mezi anionty hrají karboxyláty, které jsou ve většině případů chirální.

Proto je cílem práce připravit chirální ligandy na bázi isothiouroniových solí pro enantioselektivní rozpoznávání aniontů.



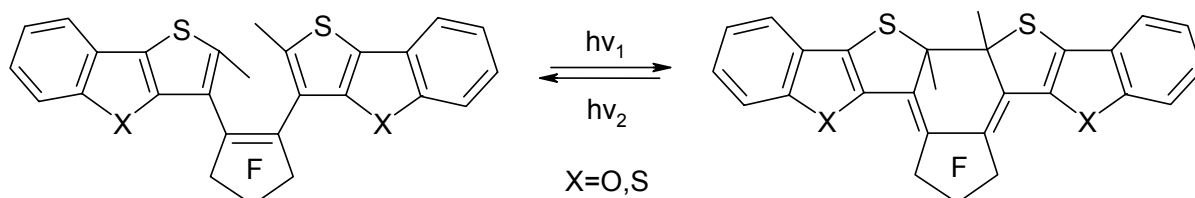
Byly připraveny prekurzory těchto ligandů, které se budou dále alkylovat.

Sekce : Organická chemie B2

Syntéza nových 1,2-diaryleténov - potenciálních molekulových prepínačov

Autor: Michal Májek
Ročník: B3
Ústav: Organická chemie
Školitel: Prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

1,2-Diaryletény podliehajú vratnej fotocyklizácii, čo ich predurčuje na použitie ako molekulové prepínače a pamäte. Prekážkou praktickej aplikácie takýchto derivátov býva nestabilita ich uzavretej formy. Cieľom mojej práce je syntéza prepínačov na báze thieno[3,2-*b*][1]benzofuránu a thieno[3,2-*b*][1]benzotiofenu. Ako etylénový mostík som zvolil perfluórcyklopentén. Predpokladám, že takéto prepínače budú stabilné v oboch formách. V ďalšej fázi svojej práce budem derivatizovať aromatický skelet tak, aby vznikol molekulový prepínač, ktorý bude navyš vykazovať kvapalné kryštallické vlastnosti.

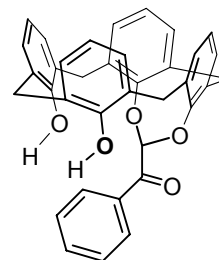


Sekce : Organická chemie B2

Syntetická studie neobvykle přemostěných derivátů calix[4]arenu

Autor: Romana Pálková
Ročník: B2
Ústav: Organická chemie
Školitel: Ing. Jan Budka, Ph.D.

Prvotním záměrem projektu bylo alkylování calix[4]arenu jodacetofenonem připravit derivát v 1,3-alternující konformaci, který měl být využit pro intramolekulární McMurryho reakci. Alkylování vedlo k překvapivému produktu – calix[4]arenu přemostěnému krátkou jednouhlíkatou spojkou. Syntéza byla optimalizována a navržen mechanismus vzniku neobvyklého produktu. Získané poznatky byly využity při alkylování dalších derivátů calix[4]arenu a rovněž vedly k zajímavým výsledkům, které budou v prezentaci diskutovány.



Sekce : Organická chemie B2

Fotooxidace sulfidů senzibilizovaná deriváty flavinu

Autor: Jitka Daďová
Ročník: B3
Ústav: Organická chemie
Školitel: Ing. Radek Cibulka, Ph.D.

Flaviny představují fotoaktivní látky, které se účinkem viditelného světla snadno excitují. Díky tomu jsou potenciálně využitelné jako senzibilizátory oxidačních reakcí. V naší laboratoři byla objevena selektivní fotooxidace sulfidů na sulfoxidy kyslíkem senzibilizovaná deriváty flavinů (schéma 1). V této práci bylo pro účely studia fotooxidací v přítomnosti flavinů otestováno zařízení s monochromatickým zdrojem světla vhodným pro jejich excitaci ($\lambda = 455 \text{ nm}$). Poté byl s využitím NMR a HPLC studován vliv rozpouštědla a koncentrace substrátu na průběh fotooxidace sulfidů v přítomnosti tetraacetylriboflavinu.

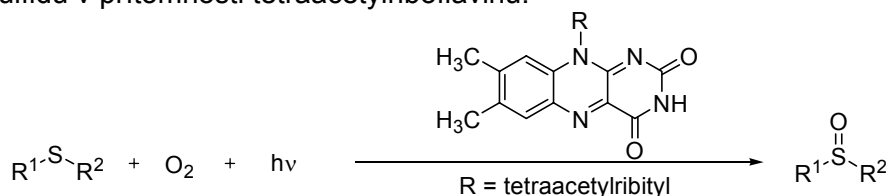


Schéma 1

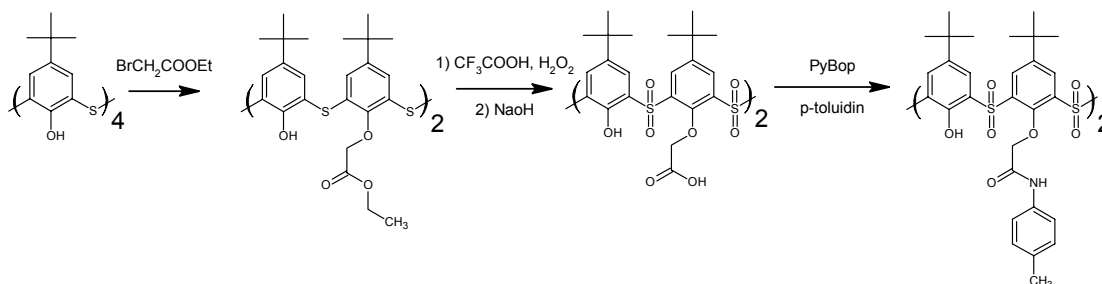
Sekce : Organická chemie B2

Syntéza amidů na spodním okraji sulfonylcalix[4]arenu: cesta k novým molekulárním pinzetám

Autor: František Stejskal
Ročník: B3
Ústav: Organická chemie
Školitel: Ing. Miroslav Dudič, Ph.D.

Zavedením porfyrinových kruhů do skeletu calixarenu lze získat tzv. *molekulární pinzetu* použitelnou pro selektivní rozpoznání fullerénů.

Cílem tohoto projektu je vyvinout metodiku přípravy amidů na spodním okraji sulfonyl a sulfonylcalix[4]arenu. Vzhledem k tomu, že doposud nebyly publikovány žádné způsoby této derivatizace a prvotní experimenty ukázaly, že klasické metody (např. přes acylchlorid) selhávají, zaměřili jsme se na použití moderních amidačních činidel (PyBop, PyBrop, HATU, HBTU a TBTU). Schéma vyjadřuje postup přípravy výchozí látky a způsob modifikace spodního okraje sulfonylcalix[4]arenu.

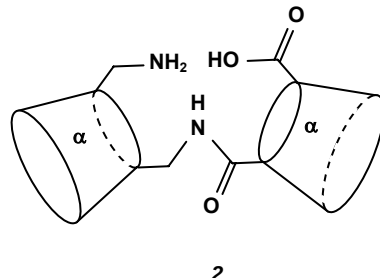
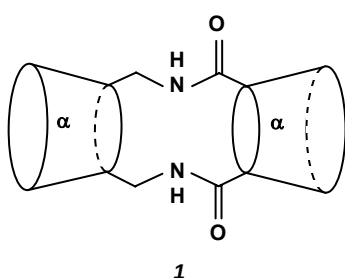


Sekce: Organická chemie B2

Syntéza a studium komplexačních vlastností dimerů α-cyklohextrinu spojených amidovými vazbami

Autor: Petr Koutník
Ročník: B3
Ústav: Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v. v. i.
Školitel: Mgr. Tomáš Kraus, Ph.D. (Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v. v. i.)

Cílem práce je syntéza dimerů α-cyklohextrinu spojených jednou (**1**) a dvěma (**2**) amidovými vazbami a dále studium schopností těchto dimerů tvořit inkluzní komplexy s modelovými látkami. Při syntéze se vychází z nativního α-cyklohextrinu. Ten je v několika reakčních krocích převeden na symetricky disubstituované prekurzory dimerů: α-cyklohextrin-6^A,6^D-diovou kyselinu a α-cyklohextrin-6^A,6^D-diamin. Vznik amidové vazby mezi oběma výchozími komponentami byl studován při vysokém zředění (HDS) a na pevné fázi (SPS) s použitím aktivačních činidel (HATU, pyBOP, HBTU). V reakční směsi byl identifikován (ESI-MS) dimer spojený jednou amidovou vazbou. Probíhá optimalizace reakčních podmínek, která by umožnila snadnou izolaci požadovaných dimerů.

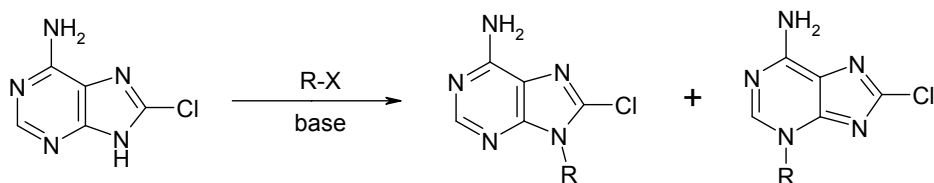


Sekce : Organická chemie B2

Syntéza 8-chloradeninu, její optimalizace a alkylace produktu

Autor: Kateřina Zacharovová
Ročník: B3
Ústav: Organické chemie
Školitel: Doc. Ing. Igor Linhart, CSc

8-Chloradenin je potenciálně vhodnou výchozí látkou pro syntézu alkyl- a arylderivátů adeninu. Cílem práce bylo prostudovat možnosti jeho aplikace pro přípravu 3-alkyladeninů, které jsou významnými DNA adukty vylučujícími se v moči. 8-Chloradenin byl připraven chlorací adeninu tetrabutylamonium tetrachlorojodidem, (C₄H₉)N⁺Cl₄I⁻, nebo chlorací adenosinu stejným činidlem s následnou deribosylací. Byla studována selektivita jeho alkylace allylbromidem a butylbromidem jako modelovými alkylačními činidly.

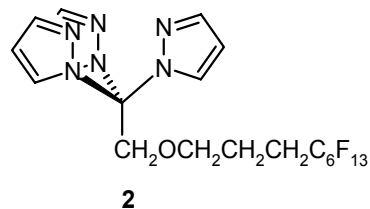
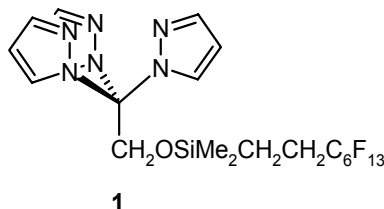


Sekce : Organická chemie M1

Příprava fluorových derivátů 2,2,2-tripirazolyethan-1-olu

Autor: Veronika Fraňková
Ročník: M1
Ústav: Organické chemie
Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Tripirazolylmethany jsou nové typy ligandů isoelektronické s cyklopentadienidovým aniontem, které tvoří komplexy s většinou kationtů kovů a nabízejí různé polohy pro možnou substituci. Cílem mé práce bylo zavedení perfluorovaného řetězce na centrální methinový uhlík tripirazolylmethanu přes vhodnou nefluorovanou spojku. Jako klíčovou výchozí látku jsem připravila 2,2,2-tripirazolyethan-1-ol, na kterém jsem studovala Mitsunobuovu reakci se sérií fluorovaných alkoholů. Průběh reakcí jsem sledovala měřením ^{19}F a ^{31}P NMR spekter reakční směsi. I přes použití nejrozumnějších modifikací reakce nevedly k požadovaným produktům. Jako další možný způsob polyfluoralkylace jsem se pokusila využít nukleofilní substituce polyfluoralkylovaných triflátů nebo silanů odpovídajícím alkohólem. Pozitivní výsledky přinesla pouze druhá metoda (produkt **1**). Nejvýhodnější se ukázala reakční cesta zahrnující radikálovou adici perfluorhexyljodidu na allylether, získaný reakcí 2,2,2-tripirazolyethan-1-olu s allylbromidem, a následnou redukci na cílovou fluorovanou molekulu **2**.

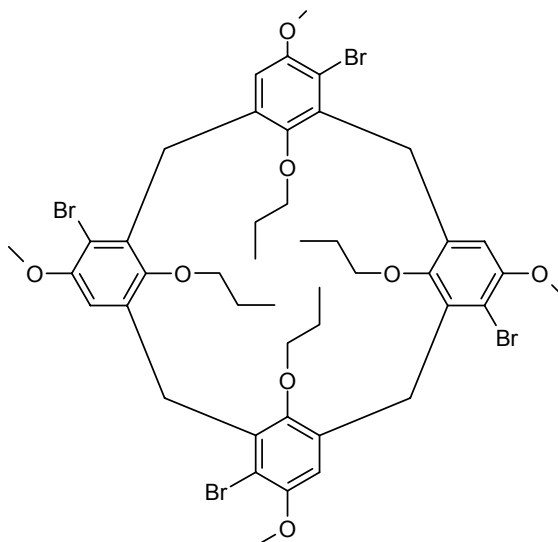


Sekce : Organická chemie M1

Aktivace m-poloh calix[4]arenu

Autor: Jan Motyčka
Ročník: M1
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Jan Budka, Ph.D.

Calixareny jsou obvykle modifikovány na svém horním a spodním okraji. Nejméně prozkoumanou oblastí chemie calix[4]arenů jsou jejich *meta*-substituované deriváty. Pro přípravu těchto látek bylo nutné do *para*-poloh zavést substituenty s kladným mesomerním efektem, které by podporovaly následné substituce do *meta*-poloh skeletu. Jako tyto substituenty byly použity skupiny hydroxy, methoxy a amino. U methoxyderivátu se podařilo připravit i *p*-tetramethoxy-*m*-tetrabromcalix[4]aren. Struktura tohoto derivátu byla potvrzena pomocí rentgenostrukturní analýzy. Jednotlivé atomy bromu postupně vstupují na vedlejší benzenové jádro skeletu vždy v jednom směru (tzv. zip efekt), takže vzniká inherentně chirální produkt.



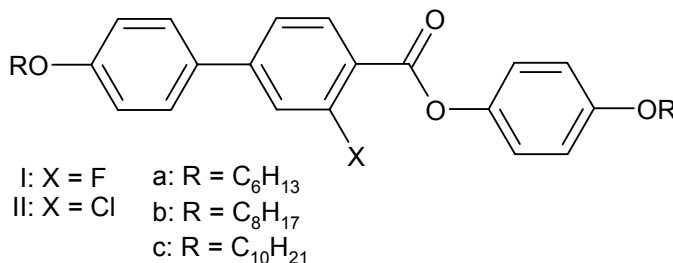
Sekce : Organická chemie M1

Nové kapalně krystalové s laterální substitucí jádra

Autor: Martin Cigl
Ročník: M1
Ústav: Organická chemie
Školitel: Doc. Ing. František Hampl, CSc.

Nedávno byly publikovány práce popisující vznik chirálních domén ve smektické C fázi tvořené achirálním 4-(oktyloxy)fenyl-4-(oktyloxy)benzoátem. Autoři tento jev vysvětlují existencí bariéry rotace okolo vazeb rovnoběžných s podélnou osou mesogenu v kapalně-krystalickém stavu; domény jsou pak tvořeny dvěma chirálními konformery.

Naším cílem byla syntéza analogických mesogenů s laterální substitucí v *ortho* polohách ke konformačně flexibilní esterové spojovací skupině. Substituce měla zvýšit rotační bariéru přechodu jednoho konformeru na druhý. Zvolenými analogy jsou 4-(alkoxy)fenyl-4'-alkoxy-1,1'-bifenyl-4-karboxyláty substituované atomy fluoru a chloru v poloze 3 4'-alkoxybifenyl-4-karboxylové kyseliny.

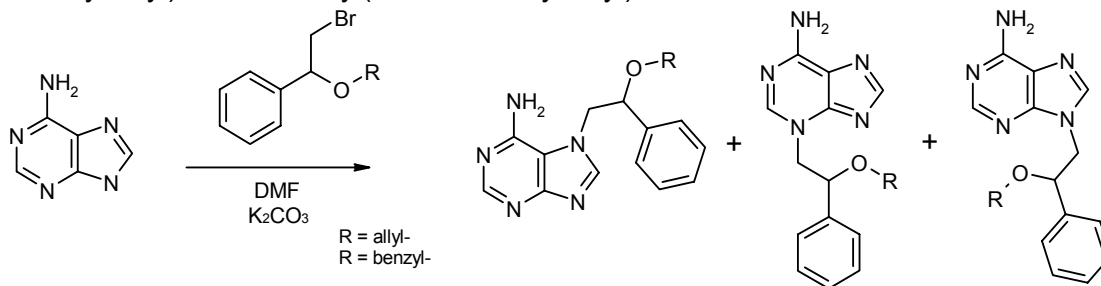


Sekce : Organická chemie M1

Studium alkylatione adeninu 2-brom-1-fenylethanolem

Autor: Alena Moulisová
Ročník: M1
Ústav: Organická chemie
Školitel: Doc. Ing. Igor Linhart, CSc.

Cílem práce bylo studium vlivu reakční teploty na regioselektivitu alkylatione adeninu pomocí 2-brom-1-fenylethanolu. Použité alkylatione činidlo je reaktivnějším analogem styren-7,8-oxidu, jenž je významným metabolitem styrenu. Vzniklé „adukty“ mohou sloužit jako analytické standardy pro detekci a stanovení rozsahu poškození DNA či jako potenciálně biologicky aktivní látky. Pro alkylatione byly využity deriváty 2-brom-1-fenylethanolu s chráněným hydroxylem, allyl(2-brom-1-fenylethyl)ether a benzyl(2-brom-1-fenylethyl)ether.

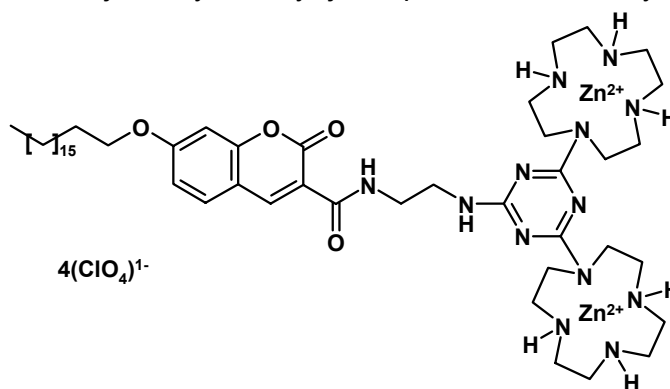


Sekce : Organická chemie M1

Fluorescenční deriváty Zn-cyklenů a jejich potenciální využití

Autor: Filip Šembera
Ročník: M2
Ústav: Organická chemie, Institut für Organische Chemie - Universität Regensburg
Školitel: Dipl.-Chem. Stefan Stadelbauer, Dipl.-Chem. Benjamin Gruber

Supramolekulární chemie je velmi silně se rozvíjejícím vědním oborem. Jedním z často využívaných stavebních prvků supramolekulární chemie je právě cyklen. Využití a potenciál jeho derivátů jsou široké. Jedná se například o rozpoznávání nukleobází thiaminu a uracilu, využití při self assembly párových nukleobází, nebo katalýze hydrolýzy esterů. Deriváty cykленu mají také význam z farmaceutického hlediska, jsou využívány jako přenašeče některých antivirotik při léčbě nemoci AIDS, objevila se i možnost jejich využití k inhibici HIV proteázy. Dalším možností je jejich uplatnění při selektivním rozpoznávání sekvece aminokyselin Asp4. Tato vlastnost byla hlavním cílem výzkumu z důvodu možného použití při separacích syntetických peptidů, značených touto sekvencí. Díky fluorescence je navíc možné pozorovat interakce pomocí změn fluorescence.

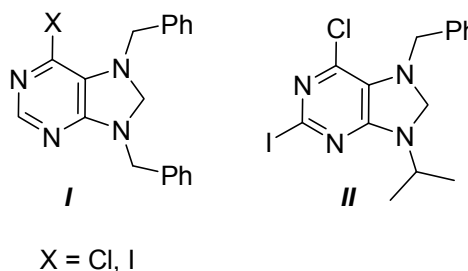


Sekce : Organická chemie M1

Studium přípravy a reaktivity 2- a 6-halogen-7,8-dihydropurinů v palladiem katalyzovaných reakcích

Autor: Markéta Šmídková
Ročník: M2
Ústav: Organická chemie
Školitel: Prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.

Redukce 9-benzyl-2-halogenpurinu a 6-chlor-9-isopropyl-2-jodpurinu pomocí diisobutylaluminiumhydridu poskytuje odpovídající 7,8-dihydropuriny. Jejich následnou benzylací v poloze 7 byly získány 7,9-dibenzyl-2-halogen-7,8-dihydropurin a 7-benzyl-6-chlor-9-isopropyl-2-jod-7,8-dihydropurin. Takto připravené 7,8-dihydropuriny **I**, **II** byly využity jako výchozí látky pro studium reaktivity v poloze 2 respektive 6 v některých palladiem katalyzovaných reakcích např. Heckova reakce, Suzukiho nebo Sonogashirův coupling. Byl sledován vliv použitého palladiového katalyzátoru, ligandu, kokatalyzátoru, rozpouštědla a reakční teploty. U připravených purinových derivátů bude testována biologická aktivita.



Sekce : Organická chemie M1

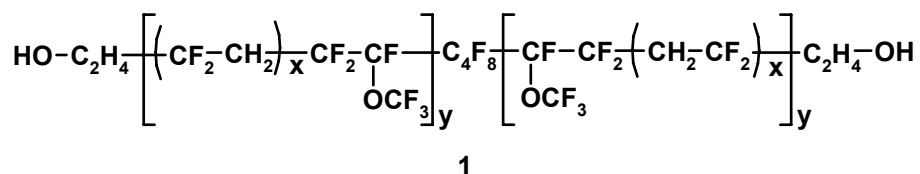
Fluoroelastomery na bázi VDF/PMVE

Autor: Martin Holan
Ročník: M2
Ústav: Organická chemie
Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Fluoropolymery našly uplatnění v mnoha oborech (chemický a automobilový průmysl, letectví a kosmonautika, elektronika). Jsou odolné vůči mnoha rozpouštědlům, uhlovodíkům, silným kyselinám a alkáliím.

Cílem mé práce byla syntéza nových síťovatelných fluoropolymerů. V první části projektu jsem radikálovou adicí telechelického α,ω -dijodpoly(VDF-co-PMVE)kopolymeru na ethylen připravil makromolekulární sloučeninu s terminálními jodethylovými skupinami, kterou jsem následně hydrolýzou směsí DMF/voda a kyselou reesterifikací methanolem převedl na diol **1**.

V druhé části projektu jsem radikálovou adicí výchozího kopolymeru na allylalkohol připravil bis(jodhydrin), který jsem následně redukoval Bu_3SnH na fluorovaný diol s tříuhlíkatou spojkou. Oba typy syntetizovaných diolů jsem reakcí s akryloylchloridem převedl na cílové síťovatelné fluorakryláty.



Sekce : Organická chemie M2

Studium katalytických systémů obsahujících 2,2,6,6-tetramethylpiperidinyloxyl (TEMPO) pro selektivní oxidaci primárních alkoholů vzdušným kyslíkem

Autor: Kateřina Míčová
Ročník: M1
Ústav: Organická chemie
Školitel: Doc. Ing. Igor Linhart, CSc.

Relativně stabilní nitroxylový radikál 2,2,6,6-tetramethylpiperidinyloxyl (TEMPO) je využíván v mnoha katalytických systémech jako vynikající katalyzátor oxidace primárních a sekundárních alkoholů na příslušné aldehydy a ketony.

Cílem práce bylo prostudování katalytického systému Mn-Co-TEMPO, který dovoluje selektivní oxidaci alkoholů pomocí vzdušného kyslíku za velmi mírných podmínek.

Katalytický systém Mn-Co-TEMPO byl testován pro několik primárních alkoholů, sekundární alkohol a směs primárního a sekundárního alkoholu. Nejlépe reagoval benzylalkohol (výtěžek 98%, konverze 100%), podobný průběh reakce (výtěžek 88%, konverze 100%) byl pozorován u cyklopentylmethanolu.

Daleko pomaleji reagoval hexan-1-ol a cyklohexanol (shodně výtěžek nad 50%, konverze 70-80%). Selektivní oxidace primárního alkoholu nebyla pozorována ani v případě souběžné oxidace cyklopentylmethanolu a cyklohexanolu ve směsi.

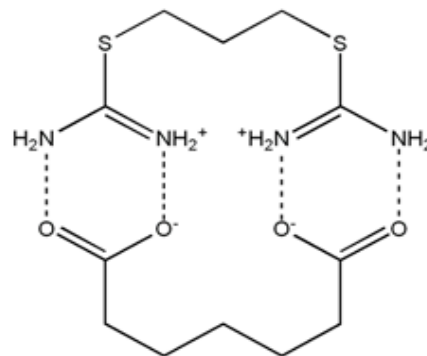
Stejné reakční podmínky byly použity i pro chráněný Coreyho lakton. Oxidace na příslušný aldehyd v tomto případě neproběhla.

Sekce : Organická chemie M2

Rentgenostrukturní analýza isothiuroniových solí

Autor: Václav Eigner
Ročník: M1
Ústav: Organická chemie
Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.

Diisothiuroniové soli jsou zkoumány v mnoha oblastech moderní chemie, od komplexační chemie až po farmaceutická využití. Pro velikou rozmanitost možné substituce byly popsány soli s značně odlišnými vlastnostmi, ať už fyzikálními nebo chemickými. V této práci byly isothiuroniové soli zkoumány pomocí metod rentgenostrukturní analýzy. Jejím cílem je příprava a analýza některých S-substituovaných isothiuroníí. Práce se na vhodném souboru diisothiuroníí a aniontů pokouší ukázat některé principy v jejich vaznosti. Cílem této práce je vytvoření diisothiuroniové soli tvořící cyklus poutaný vodíkovými vazbami, který by při vhodné substituci byl schopen vázat některé složitější anionty nebo kationty.



Sekce : Organická chemie M2

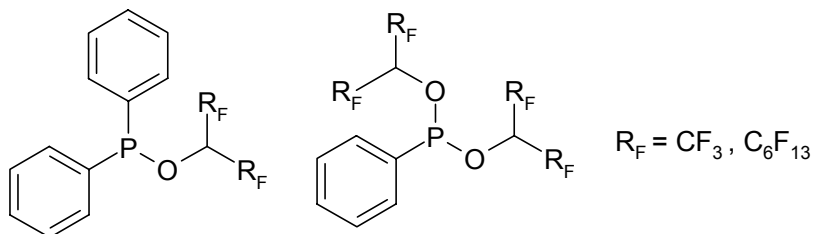
Fluorované fosfinitové a fosfonitové ligandy

Autor: Mario Babuněk
Ročník: M2
Ústav: Organická chemie
Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Komplexy fosfinitových ligandů s rutheniem slouží jako katalyzátory pro některé stereoselektivní syntézy, např. hydroborace nebo hydroformylace. Fluorofilní ligandy jsou využívány pro FBC (fluorovou dvoufázovou katalýzu).

Cílem mé práce byla příprava ligandů na bázi esterů kys. fosfinité nebo fosfonité s polyfluorovanými větvenými alkoholy. Klíčovými intermediáty pro přípravu větvených alkoholů jsou polyfluorované ketony. Nižší polyfluorované ketony ((C₆F₁₃)₂CO, (C₈F₁₇)₂CO) jsem úspěšně připravil, ale vyšší ketony ((C₁₀F₂₁)₂CO, (C₁₂F₂₅)₂CO) se mi nepodařilo izolovat v čistém stavu.

Na základě literárních údajů jsem nejdříve provedl modelové reakce chlorfosfinů s 1,1,1,3,3,3-hexafluorpropan-2-olem. Následně jsem s využitím sekundárních polyfluoralkylovaných alkoholů připravil cílové ligandy.

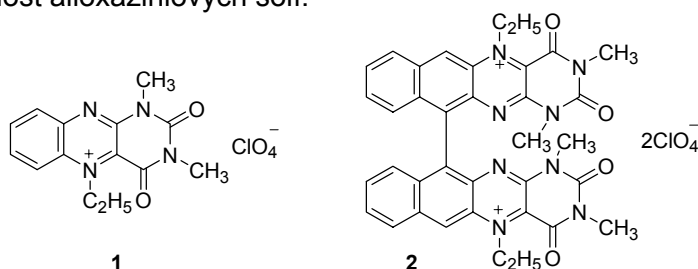


Sekce : Organická chemie M2

Oxidace sulfidů a aminů peroxidem vodíku katalyzovaná alloxaziniiovými solemi

Autor: Petra Ménová
Ročník: M1
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Radek Cibulka, Ph.D.

Alloxaziniiová sůl **1** katalyzuje oxidaci sulfidů a aminů peroxidem vodíku. V práci byla připravena bisflaviniová sůl **2**, která je odvozená od 1,1'-binaftalen-2,2'-diaminu. Sůl **2** je axiálně chirální a v enantiomerně čisté podobě by mohla být využitelná jako katalyzátor enantioselektivních oxidací. Při studiu katalytické účinnosti soli **2** bylo zjištěno, že tato bisalloxaziniiová sůl je účinnější pro oxidace sulfidů v porovnání s jednoduchou solí **1**. Látka **2** je však překvapivě neúčinná při katalýze oxidace terciárních aminů. Navíc přítomnost terciárních aminů deaktivuje sůl **2** při katalýze oxidace sulfidů. Druhá část práce se věnuje studiu vlivu terciárních aminů na katalytickou účinnost alloxaziniiových solí.

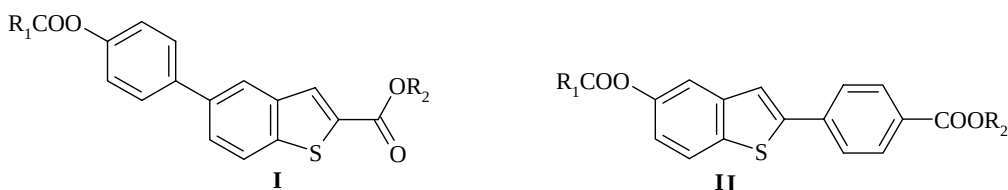


Sekce : Organická chemie M2

Kapalné krystaly odvozené od 2,5-disubstituovaného benzo[b]thiofenu

Autor: Lucie Řehová
Ročník: M1
Ústav: Organické chemie
Školitel: Prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

V rámci systematického studia kapalných krystalů byl v naší pracovní skupině zaveden benzo[b]thiofen jako nový typ centrálního jádra. Jeho 2,6-disubstituované deriváty vykazovaly vznik smectické, nematické a u chirálních sloučenin vznik ferroelektrické fáze. 2,5-Disubstituované deriváty vykazovaly také velmi zajímavé mesomorfní vlastnosti. Rozhodli jsme se proto rozšířit sérii 2,5-disubstituovaných derivátů benzothiofenu a připravit nové kapalně krystalické látky obsahující chirální prvek. V příspěvku budou diskutovány syntézy vedoucí k nesymetrickým lomeným kapalným krystalům na bázi 5-fenylbenzo[b]thiofen-2-karboxylové kyseliny (**I**) a 2-fenyl-5-hydroxybenzo[b]thiofenu (**II**).

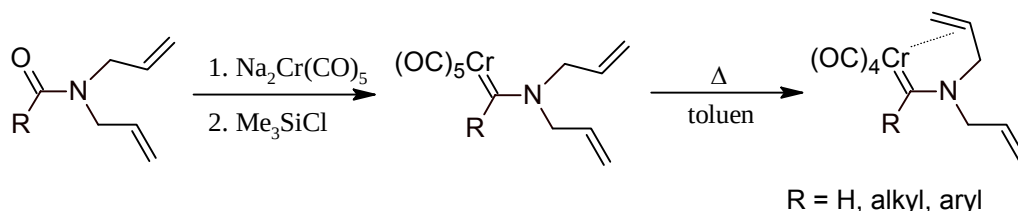


Sekce : Organická chemie M2

Příprava nových aminokarbenových komplexů chromu a železa pro elektrochemické studie

Autor: Petra Slavíková
Ročník: M2
Ústav: Organické chemie
Školitel: Prof. Dalimil Dvořák, CSc.

Aminokarbenové komplexy jsou v popředí zájmu díky svým zajímavým elektrochemickým vlastnostem. Ve spolupráci s Ústavem anorganické chemie VŠCHT jsou prováděny studie elektrochemických potenciálů na redoxních centrech těchto komplexů. Byly připraveny aminokarbenové komplexy chromu a železa odvozené od *N,N*-dimethyl- a *N,N*-diallylamidů vhodných karboxylových kyselin jejich reakcí s $\text{Na}_2\text{Cr}(\text{CO})_5$, resp. $\text{Na}_2\text{Fe}(\text{CO})_4$ a trimethylchlorosilanem. V případě allylových komplexů je možná koordinace dvojné vazby ke kovu a vznik chelatovaného komplexu. Tyto komplexy byly též připraveny a studovány.

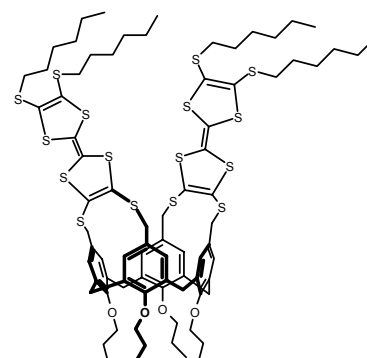


Sekce : Organická chemie M2

Syntéza a vlastnosti bis-TTF-calix[4]arenu

Autor: Karolína Flídrová
Ročník: M1
Ústav: Organické chemie
Školitel: Ing. Michal Himl

Tetrathiafulvalen (TTF) je známý svou schopností být selektivně oxidován na radikál-kation a dikation a je široce využíván nejen v supramolekulární chemii, ale i například při přípravě syntetických kovů. Chování TTF jednotky lze velmi dobře sledovat pomocí UV/Vis spektroskopie nebo cyklické voltametrie a toho bylo využito při syntéze několika málo dosud publikovaných TTF-calixarenových konjugátů. Cílem této práce byla syntéza takového TTF-calixarenového konjugátu, kde by TTF jednotka plnila nejen funkci spektroskopického markeru, ale i komplexačně aktivního místa, ať již v neutrálním nebo nabitým stavu.

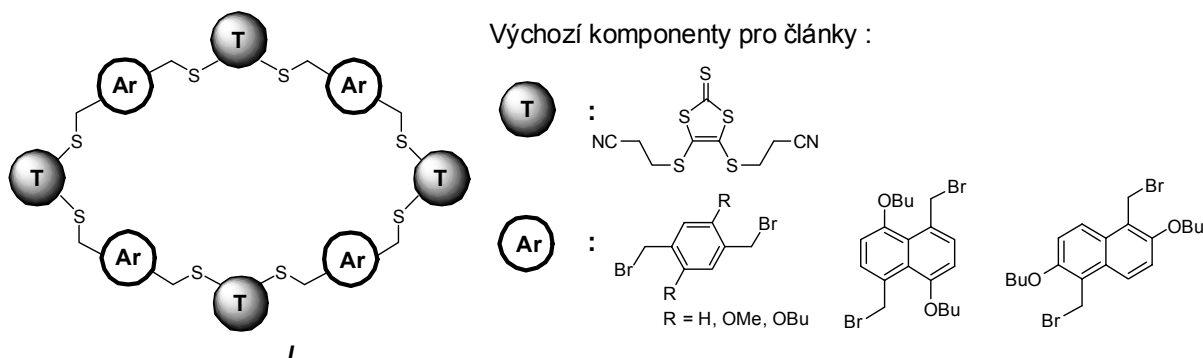


Sekce : Organická chemie M2

Syntéza thiamakrocyklů pro komplexaci fullerenu II

Autor: Michal Buchta
Ročník: M2
Ústav: Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Školitel: Ing. Petr Holý, CSc.

Práce navazuje na minulé sdělení o vypracování obecné syntetické strategie přípravy osmijaderných makrocyklů (obecný vzorec **I**), jejichž dutina je schopna pojmout například molekulu fullerenu C₆₀, při použití 4,5-bis(2-kyanoethylthio)-1,3-dithiol-2-thionu a komerčního 1,4-bis(brommethyl)benzenu jako výchozích stavebních prvků. Pro posílení elektron-donorového charakteru cílových makrocyklů, pro zlepšení rozpustnosti a pro ladění velikosti dutiny jsme připravili řadu alkoxylovaných bis(brommethyl)aromátů, které nyní využíváme jako aromatických komponent v postupné výstavbě modifikovaných makrocyklů typu **I**.



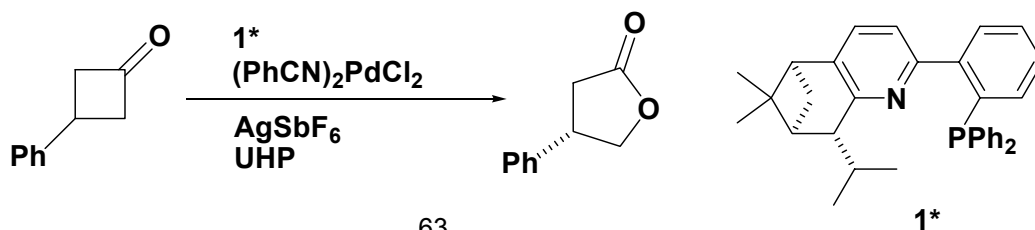
Sekce : Organická chemie M3

Syntéza P, N-ligandů pro asymetrickou Baeyer-Villigerovu oxidaci

Autor: Martin Schindler
Ročník: M1
Ústav: Organická chemie
Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.; Prof. Pavel Kočovský

Chirální *P,N*-ligandy jsou perspektivními organokatalyzátory pro enantioselektivní reakce, např. pro asymetrickou hydrogenaci, azylovou substituci nebo Baeyer-Villigerovu.

B-V oxidací prochirálních 3-substituovaných cyklobutan-1-onů komplexem peroxidu vodíku s močovinou (UHP) katalyzovanou komplexem palladia(II) s *P,N*-ligandem **1*** byly získány odpovídající chirální laktony s enantiomerním přebytkem až 81%. Cílem mé práce bylo dále zvýšit enantioselektivitu B-V oxidace modifikací stávajícího ligandu, a to buď změnou isopropylového substituentu v terpenové části nebo nahrazením fenylových substituentů fosfinové části za stericky náročnější *o*-tolylové. Všechny provedené modifikace vedly ke snížení enantioselektivity reakce a maximální dosaženy enantiomerní přebytek při B-V oxidaci činil 38%.

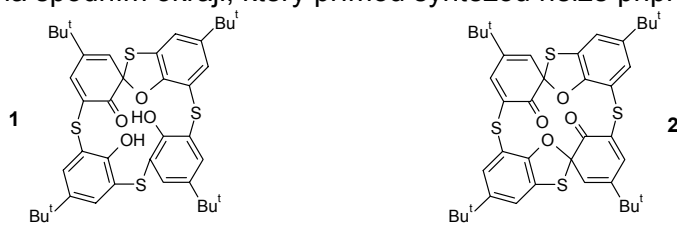


Sekce : Organická chemie M3

Spiroderiváty jako intermediáty transformací thiacalixarenového skeletu

Autor: Kateřina Polívková
Ročník: M2
Ústav: Organická chemie
Školitel: Ing. Markéta Šimánová

Přítomnost karbonylové skupiny a porušení aromatického skeletu u mono (**1**) a bis(spiro)derivátů (**2**) nabízí nové možnosti derivatizace dolního i horního okraje calix[4]arenu. Nejinak je tomu u thiacalix[4]arenů. Díky přítomnosti síry je ale třeba počítat s odlišnou reaktivitou i obtížnější identifikací vzniklých izomerů. Například snaha nahradit *tert*-butylovou skupinu halogenem vedla ke vzniku nesymetrického produktu, který halogen vůbec neobsahuje. Naopak adicí organokovových činidel a následnou rearomatizací a alkyací volných hydroxylových skupin vzniká, podobně jako u klasických calix[4]arenů, derivát s jednou alkylovou skupinou na spodním okraji, který přímou syntézou nelze připravit.

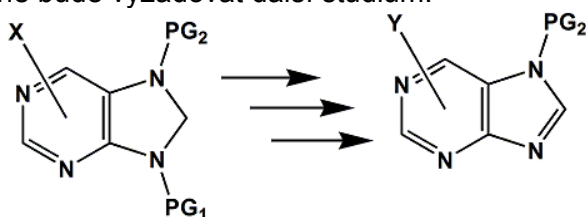


Sekce : Organická chemie M3

Studium reaktivity 7,8-dihydropurinů

Autor: Vladislav Kotek
Ročník: M1
Ústav: Organická chemie
Školitel: Prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.

Mnoho purinových derivátů vykazuje biologickou aktivitu. Jejich příprava však není jednoduchá. Některé reakce (např. metalace, Heckova reakce) však na purinu překvapivě selhávají. Proto bylo naším záměrem využít reaktivity 7,8-dihydropurinů, u kterých by bylo možno provést problematické reakce. Získané deriváty je pak možno snadno oxidovat zpět na puriny. Další využití dihydropurinů spočívá v selektivní přípravě N-7 derivátů, které přímou alkyací vznikají minoritně. Cílem práce bylo tedy připravit vhodné chráněné dihydropuriny, pokusit se o provedení uvedených problematických reakcí a najít cestu k selektivní přípravě N-7 derivátů. Předběžné výsledky ukázaly, že Heckova reakce v poloze 6 probíhá ještě hůře než u klasických purinů, nicméně se podařilo najít vhodnou cestu k N-7 derivátům. Metalace v poloze 6 přinesla pozitivní výsledky, nicméně bude vyžadovat další studium.

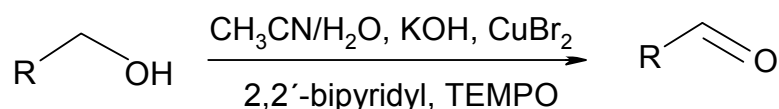


Sekce : Organická chemie M3

2,2,6,6-Tetramethylpiperidinyloxyl (TEMPO) jako oxidant pro ekologicky šetrnou selektivní katalytickou oxidaci

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

2,2,6,6-Tetramethylpiperidinyloxyl (TEMPO) je stabilní volný radikál poskytující s komplexy kovů účinný katalytický systém pro selektivní oxidaci primárních alkoholů na aldehydy za mírných podmínek (pokožová teplota, normální tlak).



Nejprve byla reprodukována oxidace benzylalkoholu systémem Cu^{II} -TEMPO s 2,2'-bipyridylem jako ligandem. O této reakci je známo, že probíhá snadno a selektivně. Za podmínek, uváděných v literatuře, bylo dosaženo pouze nízké konverze. Zkoumaly se tedy vhodnější podmínky pro reakci. Konverze byla stanovena plynově chromatograficky metodou vnitřního standardu. Následně byly oxidovány i další alkoholy, cyklohexylmethanol, cyklopentylmethanol, hexanol a cyklohexanol. Byla také studována reakce primárního alkoholu vedle sekundárního. Bylo dosaženo nízkých výtěžků, proto předmětem dalšího zkoumání bude identifikace vedlejších produktů oxidace primárních i sekundárních alkoholů. Byly též zkoumány reakce za přítomnosti jiných ligandů, např. TMEDA či fenanthrolin.

Sekce : Organická chemie M3

Amidiny jako struktury pro supramolekulární chemii, metody jejich řízené krystalizace

Autor: Petr Kovaříček
Ročník: M1
Ústav: Organické chemie
Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.

Amidiny jsou v supramolekulární chemii oblíbenými organickými molekulami díky svým příhodným vlastnostem: disponují značně polárními N-H vazbami, jež ochotně propůjčují k tvorbě vodíkových vazeb, např. s karboxylovými kyselinami; obsahují dusíkové atomy schopné donor-akceptorních vazeb a tím tvorby komplexů s kovy; amidinická skupina na aromátu umožňuje orthometalaci a v neposlední řadě: příprava amidinické skupiny je dobře propracována z širokého množství výchozích látek.

Po předcházejícím studiu přípravy byla práce zaměřena na přípravu široké variety amidinů, jejich komplexů s kovy a nadmolekulárních sítí. Byly připraveny komplexy s Pt, Pd, Cd a ozkoušena řada dalších. Supramolekulární sítě byly testovány na bifunkčních amidinech s dikarboxylovými kyselinami.

Samostatnou kapitolou je řízená krystalizace pro získání žádaných struktur. V mnoha případech je postup odpařování z roztoku nedostačující či nemožný a je nutno volit jiný přístup. Mezi takové patří dvoufázová krystalizace, krystalizace difuzí srážedla nebo krystalizace v upraveném krystalizačním médiu.

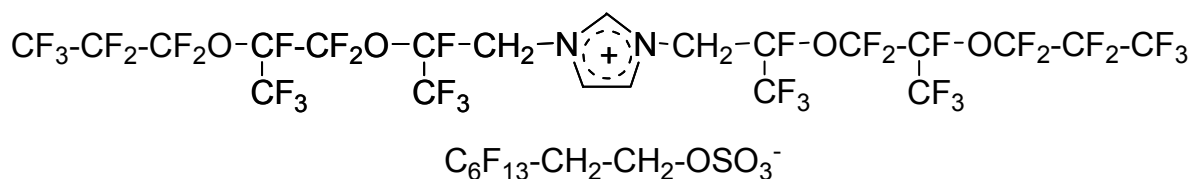
Sekce : Organická chemie M3

Iontové kapaliny s polyfluorovaným kationtem i aniontem

Autor: Jana Paterová
Ročník: M1
Ústav: Organické chemie
Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Doposud známé fluorované iontové kapaliny vykazují nízkou fluorofilicitu, vysoce fluorované analogické látky mají příliš vysoký bod tání a jsou tedy za laboratorních podmínek krystalické. V naší laboratoři jsme syntetizovali nový typ polyfluorovaných iontových kapalin na bázi imidazoliových solí s polyfluoretherovými řetězci.

Cílem mé práce byla příprava iontových kapalin s polyfluorovanými kationty i anionty. V případě imidazoliových solí s polyfluoretherovými řetězci jsem modifikovala postup aplikací nonaflátů. Těžištěm mé práce byla syntéza polyfluorovaných organických aniontů pro iontové kapaliny. Reakcí 1,3,2-dioxathiolan-2,2-dioxidu s perfluorovanými Grignardovými činidly a následnou metatezí jsem připravila sérii kalium-2-(perfluoralkyl)ethyl-sulfátů ($C_nF_{2n+1}CH_2CH_2OSO_3^-K^+$ pro $n = 4, 6, 8, 10, 12$). Modelovou reakcí kalium-2-(perfluorhexyl)-ethyl-sulfátu s imidazoliovou solí jsem získala iontovou kapalinu s polyfluorovaným kationtem i aniontem

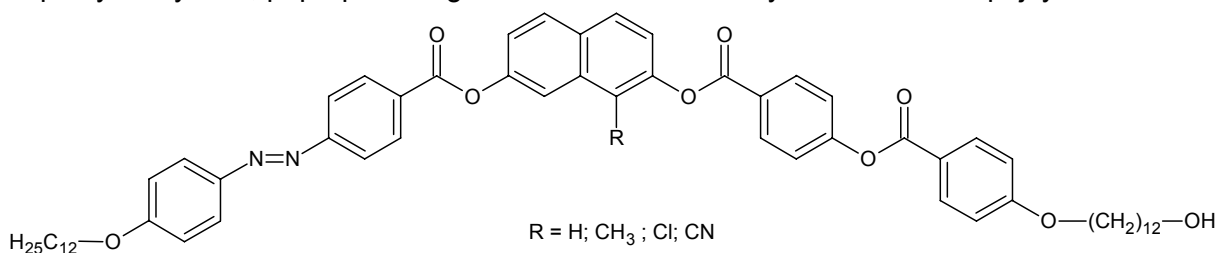


Sekce : Organická chemie M3

Syntéza kapalných krystalů lomeného tvaru s terminálním hydroxyalkylovým řetězcem

Autor: Arnošt Seidler
Ročník: M2
Ústav: Organické chemie
Školitel: Prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

Práce pojednává o syntéze kapalných krystalů lomeného tvaru s 1-substituovaným naftalen-2,7-diolovým centrálním jádrem. Specifický význam těchto kapalných krystalů spočívá ve využití hydroxylové skupiny na konci alkylového řetězce, která bude využita pro tvorbu polymerních kapalných krystalů, popř. pro design dimerních struktur s využitím lomené spojky.



Sekce : Syntéza, výroba a využití léčiv

Modelování vlivu hydrodynamických faktorů na disoluci dezintegrující lékové formy

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

Cílem práce bylo studovat a modelovat vliv hydrodynamických faktorů na disoluci účinné látky. Výsledky tohoto studia lze aplikovat na predikci vlivu stavu gastrointestinálního traktu (např. plný nebo prázdný žaludek) na uvolňování léčivé látky z lékové formy.

Hydrodynamické podmínky jsou určeny mimo jiné vlastnostmi a objemem média, způsobem a intenzitou míchání, a také charakterem částic vzniklých dezintegrací tablety. V první fázi studie byly provedeny testy dezintegrace tablet v závislosti na hydrodynamických podmínkách v disolučním přístroji – různých frekvencích otáček míchadla a různých objemech disolučního média. Hydrodynamické podmínky experimentů byly charakterizovány bezrozměrnými kritérii a byl analyzován jejich vliv na desintegraci tablet. Celý disoluční profil byl měřen za obdobných podmínek jako testy dezintegrace. Simulace disoluce byla provedena matematickým modelem, jehož parametry byly určeny na základě experimentálních dat.

Sekce : Syntéza, výroba a využití léčiv

Určení struktury trospium chloridu

Autor: Michaela Hájková
Ročník: M2
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: Prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc.

Trospium chlorid je kvartérní amoniová sůl odvozená od struktury atropinu. Patří do skupiny spasmolytik a v současné době se používá k léčbě inkontinence. Tento lék byl uveden do klinické praxe již v 60. letech 20. století, přesto je předepisován dodnes a to hlavně díky dobré snášenlivosti ze strany pacientů.

V České republice jsou zaregistrovány 2 léky, jejichž účinnou látkou je trospium chlorid, a to Spasmed (Promed) a Uraplex (Madaus).

Přestože se trospium chlorid vyrábí téměř 50 let, nebyla zatím publikována žádná jeho vyřešená krystalová struktura. Cílem mé práce je připravit monokrystaly trospium chloridu z různých rozpouštědel, vyřešit jeho strukturu pomocí RTG strukturní analýzy a zjistit, zda se daná látka vyskytuje v podobě různých polymorfů.

Sekce : Syntéza, výroby a využití léčiv

Vliv úpravy složky na homogenitu směsi prach-granulát

Autor: Pavla Hrušková
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Prof. Ing. Zdeněk Bělohav, CSc..

V současné době jsou ve farmaceutickém průmyslu nejrozšířenějšími produkty pevné lékové formy, především z hlediska relativně snadné výroby, možnosti přesného dávkování a jednoduchosti aplikace. Cílem práce bylo analyzovat průběh mísení v závislosti na vlivu úpravy forem účinných látek před homogenizací. V předkládané práci byl studován preparát, který kromě primární účinné látky obsahuje ještě jinou, synergicky působící aktivní složku. Primární účinná látka byla ve směsi zastoupena z 81 % a zpracována ve formě granulátu. Sekundární složka představovala 9,5 % směsi a byla připravena v podobě prášku, granulátu a briketáže. Při jednotlivých měřeních byla kombinována hlavní účinná látka vždy s jednou z forem vedlejší účinné látky. Experimenty probíhaly v homogenizačním zařízení Hotic při stejných otáčkách i stejném objemu vsádky. Výhodou procesu homogenizace preparátů obsahujících více účinných látek je poměrně rychlý průběh mísení a možnost vzniku uspořádané směsi. Nevýhodou představuje značné riziko segregace, které vyplývá z rozdílných distribucí částic směsí. Jednotlivé směsi byly proto porovnávány z hlediska rychlosti a lability homogenizace.

Sekce : Syntéza, výroba a využití léčiv

Měření homogenity směsí prach-granulát určených pro výrobu tablet přímým lisováním

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

Směs lze označit za homogenní, má-li jakýkoliv odebraný vzorek stejné vlastnosti jako celek. Homogenita je tedy sledována prostřednictvím informací z odebíraných vzorků, a proto je závislá na jejich velikosti.

Tato práce se zabývá studiem vlivu různých parametrů odběru a úpravy vzorků na hodnocení homogenity směsí. Byly analyzovány tři modelové směsi paracetamolového granulátu s práškovým kofeinem s různou úrovní homogenity. Na těchto analýzách byly porovnány tři metody úpravy vzorků. Při první metodě se odebíralo několik gramů tabletoviny - ekvivalent hmotnosti několika tablet, následovala superhomogenizace a odběr analytického vzorku. U druhé metody odpovídal primární vzorek velikosti tablety a u třetí se odebíral přímo analytický vzorek. Vzorkovací tyčí bylo vždy odebíráno devět vzorků z různých částí lože, ve kterých byl stanoven obsah účinných látek pomocí HPLC. Homogenita byla posuzována na základě relativní směrodatné odchylky obsahu účinné látky ve vzorcích. Obecně byla zjištěna větší nehomogenita rozložení pro kofein, proto byla nehomogenita hodnocena podle nejméně zastoupené složky. Bylo pozorováno, že metoda úpravy vzorku může mít významný vliv na stanovenou homogenitu.

Sekce : Syntéza, výroba a využití léčiv

Interkalace risedronátu do struktury hydrotalcitu

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

Sloučeniny typu hydrotalcitu představují skupinu převážně syntetických materiálů obecného chemického složení $[M^{II}_{1-x}M^{III}_x(OH)_2]^{x+}[A^{n-}_{x/n}yH_2O]^{x-}$, kde M^{II} a M^{III} značí dvojmocný a trojmocný kovový kation a A^{n-} n-mocný anion. Jejich krystalová struktura umožňuje interkalaci různých aniontů do prostoru mezi hydroxidovými vrstvami, a proto mohou být tyto sloučeniny využity také jako nosiče léčiv. V práci byla studována interkalace risedronátu (léčiva ze skupiny bisfosfonátů) do struktury Mg-Al hydrotalcitu aniontovou výměnou. Jako prekurzor byl použit Mg-Al hydrotalcit s molárním poměrem Mg/Al = 2 v chloridové, stearanové a benzoanové formě. U prekurzoru v chloridové a stearanové formě došlo pouze k částečné interkalaci risedronátu (15 – 20 % vzhledem k aniontově-výměnné kapacitě), výrazně vyšší stupeň aniontové výměny (< 75 %) byl pozorován u benzoanového prekurzoru. Disoluční testy připravených produktů v destilované vodě prokázaly pomalejší uvolňování risedronátu ve srovnání s referenční tabletou obsahující risedronát sodný. Ve zředěném roztoku HCl (pH = 1) byl risedronát ze všech sledovaných vzorků uvolněn během 15 minut. Byla také ověřena možnost hydrofobizace hydrotalcitu interkalovaného risedronátem v roztocích stearanu a dodecylsulfátu sodného.

Sekce : Syntéza, výroba a využití léčiv

Metoda dynamické sorpce par

Autor: Barbora Kotlanová
Ročník: B3
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: Ing. Hana Brusová, Ph.D.

Prezentovaná práce představuje nový analytický systém pro studium hygroskopicity pevných vzorků. Interakce práškového vzorku se vzdušnou vlhkostí je důležitým aspektem chování farmaceutických látek. Například vývoj nové technologie zpracování či obalového materiálu bude závislý na schopnosti dané látky poutat či naopak uvolňovat vodu.

Sorpce vody může významně ovlivňovat fyzikální i chemické vlastnosti vzorku. Voda, resp. vzdušná vlhkost může interagovat s pevným vzorkem buď pouze na jeho povrchu, nebo se voda zabudovává dovnitř (zapojuje se do jeho krystalové struktury a tvoří hydráty; do defektů krystalové struktury nebo se může voda zachycovat v amorfních oblastech).

Jedním ze způsobů, jak studovat hygroskopicitu pevných vzorků, je metoda dynamické sorpce par, kdy je vzorek umístěn na mikrováhách v prostředí o definované relativní vlhkosti a teplotě a je sledována závislost hmotnosti vzorku na relativní vlhkosti.

V práci bude představen přístroj DVS Advantage 1 a dosavadní výsledky získané na tomto přístroji.

Sekce : Syntéza, výroba a využití léčiv

Časová náročnost algoritmu charge-flipping v paralelní formě

Autor: Bc. Vojtěch Šádek
Ročník: M2
Ústav: Chemie pevných látek
Školitel: Dr. Ing. Michal Hušák

RTG strukturní analýza je technika, která využívá difrakci rentgenových paprsků na periodické struktuře monokrystalu k určování jeho absolutní struktury. Z experimentálně určených intenzit paprsků se určí strukturní faktory. A z nich lze vypočítat polohy (vzdálenosti, délky a úhly vazeb) atomů, jejich tepelné kmity, okupance a další parametry. Z experimentu získáme pouze absolutní hodnoty strukturních faktorů a ne jejich komplexní tvar, tzv. dochází k fázovému problému. Jedním způsobem řešení je použití algoritmu charge-flipping (CF), který iterativně dojde ke správným fázím (znaménkům) jednotlivých strukturních faktorů. CF kromě mřížkových parametrů a strukturních faktorů nepotřebuje žádné další vstupní parametry. Jedinou nevýhodou je velká paměťová a časová náročnost běhu algoritmu.

Algoritmus byl implementován pomocí knihoven FFTW3 a CUDA. Pro názornější ukázkou běhu algoritmu byl vytvořen program pro vizualizaci běhu algoritmu ve dvojrozměrném a třírozměrném případě. Dále byl algoritmus použit pro počítání s modelovými daty a srovnávání jejich časové náročnosti vzhledem k hustotě vzorkování počítané elektronové hustoty.

Sekce : Syntéza, výroba a využití léčiv

Strukturní analýza taxcultinu

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

Rakovina je jednou z nečastějších příčin úmrtí nejen u nás v Evropě, ale i jinde ve světě. Proto je věnována stále větší pozornost výzkumu chemoterapeutických léčiv. Mezi ně patří také taxany. Nejvýznamnějším zástupcem je paclitaxel, ale pozornost je věnována také minoritním složkám vznikajícím při jeho syntéze. Jednou z nich je taxcultin. Mapování možných forem taxcultinu, včetně vyřešení jejich struktur, je nutné pro charakterizaci nečistoty, a nabízí se možnost nalezení stabilní formy potencionální aktivní substance.

V rámci experimentu byly připraveny monokrystaly taxcultinu z různých organických rozpouštědel. U získaných fází taxcultinu z dioxanu a ethylmethyleketonu byla provedena rentgenová fázová analýza. Z výsledků je zřejmé, že připravené krystaly mají odlišnou strukturu, jedná se tedy o polymorfy nebo solvatomorfy.

V současné době probíhají přípravy monokrystalů taxcultinu z dalších organických rozpouštědel, cílem je provést také rentgenovou strukturní analýzu vzniklých monokrystalů. Zatím všechny připravené monokrystaly nebyly dostatečně kvalitní pro vyřešení struktury.

Sekce : Syntéza, výroba a využití léčiv

Validace čistících procesů

Autor: Bc. Gabriela Štípková
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Jan Patera

Validaci čistících procesů je ve farmaceutickém průmyslu přikládán stále větší význam, protože je to kritický stupeň při zajišťování kvality produktu. Zařízení nebo předměty jsou umyty podle příslušného standardního postupu a po umytí je zvolenou metodou odebrán vzorek. Vzorky jsou analyticky zhodnoceny a porovnány se stanovenými kritérii přijatelnosti.

Typicky je mycí proces zahájen bezprostředně po ukončení výroby dané šarže. Jeho odložení v řádu několika dnů však může zefektivnit využití pracovní doby a vést ke snížení nákladů, zbytky zpracovávaného materiálu se ale během prodlevy mohou stát obtížněji odstranitelnými. Cílem této práce proto bylo porovnat efektivitu mycího procesu v závislosti na době uplynulé mezi ukončením zpracování šarže a jeho zahájením.

Jako modelový přípravek byl v této práci použit Lozap H, modelovými zařízeními byla fluidní sušárna a granulátor. Kvalita mycího procesu byla hodnocena na základě stanovených obsahů účinné látky losartanu potassium ve stěrech ze stěn modelových zařízení. Jako analytická metoda byla použita HPLC. Všechny analyzované vzorky stěrů byly v mezích kritéria přijatelnosti. Vliv prodlevy na kvalitu mycího procesu byl hodnocen nástroji statistické analýzy.

Sekce : Analýza, syntéza a použití léčiv

Charakterizace velikosti a tvaru farmaceutických látek

Autor: Lucie Vaněrková
Ročník: M2
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Eva Gregorová, CSc.

Práce se zabývá charakterizací farmaceutických látek metodami laserové difrakce a obrazové analýzy. Vedle velikosti částic hraje jejich tvar důležitou roli při zpracování farmaceutických látek (např. lisování do tablet), popř. i při jejich aplikaci. Obecně lze částice rozdělit na isometrické a anisometrické. Velikost se často vyjadřuje hodnotou tzv. ekvivalentního průměru, která je vždy závislá na způsobu měření. V případě anisometrických částic jsou tyto ekvivalentní průměry pouze relativní hodnoty a dodatečná informace o tvaru je bezpodmínečně nutná. Měření pomocí laserové difrakce (charakterizace velikosti) bylo prováděno na přístrojích Mastersizer 2000 (Malvern Instruments, UK) a Analysette 22 Nanotec (Fritsch, Germany). Druhý způsob hodnocení používal metodu analýzy obrazu snímků částic látek zhotovených na optickém mikroskopu. Byly vyjádřeny frekvenční a kumulativní křivky distribuce velikosti částic a odečteny hodnoty charakteristických kvantilů D_{10} , D_{50} a D_{90} . Aby mohlo být provedeno vzájemné srovnání výsledků dvou zcela odlišných metod, byl proveden přepočet počtově váženého rozdělení získaného z obrazové analýzy na objemově vážené rozdělení, které bývá klasickým výstupem laserových metod. Pomocí analýzy obrazu byla provedena i tvarová charakterizace a stanoveny hodnoty „aspect ratio“ jednotlivých velikostních tříd sledovaných látek.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Imobilizace na alumosilikátové materiály

Autor: Dana Irglová
Ročník: B3
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Eliška Leitmannová, Ph.D.

Tato práce je zaměřena na využití alumosilikátových materiálů k imobilizaci léčiv. Byl použit nosič SBA – 15 a jako příklad léčivé látky byla použita kyselina acetylsalicylová. Sorpce na nosič proběhla úspěšně – bylo navázáno 56,84 mg ASA / 100 mg nosiče. Dále byl povrch nosiče modifikován aminopropyl-triethoxysilanem (APTES) a zkoumán vliv této modifikace na vlastní sorpci léčiva – zde bylo navázáno 60,38 mg ASA / 100 mg nosiče. Obě varianty imobilizace kyseliny acetylsalicylové na nosič byly prováděny v různých rozpouštědlech (chloroform, diethylether, metyl-terc-butylether) a byla zkoumána závislost sorpce léčiva na typu použitého rozpouštědla. K vyhodnocení všech experimentů byl využit UV spektrometr LAMBDA 35.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Stanovení aldehydů v kondenzátu vydechovaného vzduchu

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

Kondenzát vydechovaného vzduchu (KVV) je komplexní matrice, jejíž složení koresponduje s ději probíhajícími v plicích a dýchacích cestách. Látky obsažené v KVV, jejichž koncentrační hladina je v důsledku probíhajícími patologickými ději zvýšena oproti fyziologickému stavu tzv. „biomarkery“, bývají spolehlivými ukazateli závažných plicních onemocnění, jako je *Asthma Bronchiale*, Silikóza nebo Azbestóza. Stanovením biomarkerů lze nahradit klasické diagnostické metody, které jsou často invazivní a pacienta zatěžující. Cílem předkládané práce byl vývoj metody pro stanovení bioaktivních aldehydů podílejících se na patologických dějích indukovaných oxidativním stresem: malondialdehydu a 4-hydroxynonenalu. Vyvinutá metoda spočívá v derivatizaci uvedených aldehydů a následné HPLC-MS/MS analýze. Metodu lze charakterizovat velmi dobrou spolehlivostí a vysokou citlivostí, která byla ověřena na klinické studii.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Aquatace ammin-tri(chlorido)platnatanu draselného

Autor: Eliška Žižková
Ročník: B3
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Lucie Potucká

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, $K[Pt(NH_3)Cl_3]$. Tato práce byla zaměřena na studium aquatace $K[Pt(NH_3)Cl_3]$. Jedná se o následnou reakci při syntéze $K[Pt(NH_3)Cl_3]$, kdy produkt aquatace, $[Pt(NH_3)(H_2O)Cl_2]$, velmi rychle reaguje s molekulou amoniaku za vzniku nežádoucího biologicky aktivního cis- $[Pt(NH_3)_2Cl_2]$. Byl sledován průběh aquatace $K[Pt(NH_3)Cl_3]$ 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

Multimarkerový screening v tělních tekutinách pacientů s expozicí dioxinů

Autor: Hana Lupoměská
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Petr Kačer Ph.D.

Předkládaná práce si kladla za cíl postihnout a kvantifikovat biomarkery oxidativního stresu, zánětlivých a alergických reakcí ve vybraných tělních tekutinách – kondenzát vydechovaného vzduchu, krevní plazma, moč a zjistit případnou korelaci mezi působením dioxinů na lidský organismus a hladinou těchto biomarkerů. Vybranými biomarkery tj. molekulami jejichž koncentrační hladina je v důsledku probíhajících patologických procesů zvýšena oproti hladině fyziologické (stavu zdravého organismu) byly následující molekuly: biomarker zánětlivé reakce – leukotrien B_4 (LTB_4), biomarkery alergické reakce – cysteinylované leukotrieny C_4 , D_4 , E_4 (LTC_4 , LTD_4 , LTE_4) a biomarkery oxidativního stresu – malondialdehydu (MDA), 4-hydroxynonenalu (4-HNE) a 8-isoprostanu (8-iso- $PG_{2\alpha}$). Pro stanovení uvedených biomarkerů byla použita kombinace metod spojujících separační část – extrakci na pevné fázi s vysoce citlivou a selektivní detekční metodou LC-MS/MS pracující v MRM (multiple reaction monitoring) modu. Biomarkery byly stanovovány u pacientů, kteří byli v minulosti vystaveni dlouhodobým účinkům dioxinů a snahou bylo proskanovat úroveň výše uvedených látek, případně tyto hladiny korelovat s jejich zdravotním stavem a výsledky dalších diagnostických metod.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Imobilizace ibuprofenu na silikátové nosiče

Autor: Iva Štibingerová
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Eliška Leitmannová, Ph.D.

Tato práce pojednává o imobilizaci ibuprofenu na silikátové materiály. Jako nosiče byly zvoleny materiály MCM-41 a SBA-15. Sorpce ibuprofenu na oba nosiče proběhla úspěšně. Na nosič MCM-41 se nasorbovalo 20 mg / 100 mg nosiče, na SBA-15 to bylo 19,5 mg / 100 mg nosiče. Dále byl zkoumán vliv modifikace povrchu pomocí APTES na vlastní sorpci ibuprofenu, v tomto případě by mělo docházet k imobilizaci jiným způsobem než na nosiče bez modifikace. Na modifikovaný nosič MCM-41 se nasorbovalo 20 mg / 100 mg a na modifikovaný SBA-15 to bylo 30 mg / 100 mg. Dále byla zkoumána závislost sorpce ibuprofenu na typu rozpouštědla (hexan, methanol, ethanol a toluen). Bylo zjištěno, že tento vliv je zanedbatelný a jako nejlépe využitelný v praxi byl zvolen hexan. Všechny získané vzorky byly podrobeny disolučním testům.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Asymetrická redukce substituovaných dihydroisochinolinů na chirálních Ru katalyzátorech Noyoriho typu

Autor: Jan Bednář
Ročník: B3
Ústav: Organické technologie
Školitel: Doc. Ing. Petr Kačer, PhD., Ing. Václav Matoušek

Velký význam chirálních aminů v celé škále průmyslových odvětví, zejména ve farmaceutickém průmyslu si vyžaduje vývoj efektivních strategií jejich přípravy v opticky čisté podobě. Předkládaná práce se zabývá studiem mechanismu hydrogenace C=N dvojné vazby přítomné ve strukturním skeletu substituovaných dihydroisochinolinů na homogením Noyoriho katalytického systému [Ru(Ts-DPEN)(p-cymen)Cl]. V práci je prezentována jak optimalizace přípravy katalytického systému, tak uspořádání vlastní asymetrické transfer hydrogenace. Cílem řady experimentů na kinetické úrovni je posouzení vlivu jednotlivých reakčních parametrů na průběh vlastní hydrogenační reakce. Pozornost je věnována vlivu typu donoru vodíku, vlivu teploty, typu použitého rozpouštědla, typu báze ad. na průběh reakce a to s ohledem na rychlost reakce a její enantioselektivní průběh. Značná pozornost je věnována i vlivu molekulární struktury hydrogenovaného substrátu a možnosti predikce jeho chování v závislosti na typu a poloze substituentů na základním isochinolinovém skeletu. V předkládané práci je prezentována řada výsledků, které lze považovat za důležitý příspěvek k popsání zatím neznámého reakčního mechanismu asymetrických hydrogenací na rutheniových komplexech „Noyoriho“ typu.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Vývoj technologického postupu přípravy 6-deoxyglukózy

Autor: Jan Přech
Ročník: B2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Předkládaná práce se zabývá vývojem a optimalizací uceleného syntetického postupu výroby 6-deoxyglukózy. Cílem bylo nalezení patentově volné a technologicky schůdné přípravy 6-deoxyglukózy jako cenného prekursoru nových virostatik. Vyvinutá několikastupňová syntetická cesta vychází z glukózy jako suroviny a kombinuje silylové chránění OH skupin se selektivní bromací/parciální desilylací C6 atomu a jeho následnou hydrogenolýzou, která je ekonomicky výhodnější, než v současné době používaný výrobní postup. Závěrečným krokem výrobního postupu je pak desilylace zbylých OH skupin v polohách C1-C4. Vyvinutý technologický postup se vyznačuje jednoduchou separací meziproductů, absencí použití tlakové aparatury a absencí použití drahých katalyzátorů, případně těžkých kovů. V současné době jsou v laboratorním měřítku experimentálně ověřovány další syntetické postupy, přičemž výše zmíněný postup je používán v provozním měřítku a zpracováván do formy patentové přihlášky.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Studie vlivu par peroxidu vodíku na degradaci derivátů benzaldehydu

Autor: Jiří Kovářík
Ročník: B3
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Jiří Švrček, Doc. Ing. Petr Kačer Ph.D.

Práce je orientována do oblasti studia dekontaminačního procesu využívajícího jako účinné agens páry peroxidu vodíku (VPHP - Vapor Phase Hydrogen Peroxide). Užití VPHP jako dekontaminačního činidla je relativně novou metodou, zaměřující se především na bio-dekontaminaci prostorů a materiálů z oblasti farmacie, zdravotnictví a potravinářství. Přestože atmosféra o vysoké koncentraci par H_2O_2 , tedy silné oxidační prostředí, vytváří solidní předpoklad pro možnou aplikaci tohoto činidla k degradaci chemických kontaminantů. Za účelem zobecnění mechanismů spojených s dekontaminací chemických látek pomocí VPHP byla navržena a experimentálně testována série strukturně podobných modelových substrátů (substituční a funkční deriváty benzaldehydu) lišících se přítomností funkčních skupin na základním skeletu a studována citlivost a mechanismus jednotlivých strukturních fragmentů k oxidaci VPHP. Poznatky získané z degradačních experimentů modelových substancí by měly být využity k vytvoření modelu pro predikci chování jednotlivých funkčních skupin v atmosféře par peroxidu vodíku, která by poté měla být aplikována pro případy degradací složitějších chemických kontaminantů jako jsou farmaceutické substance, popř. jiné biologicky aktivní látky.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Degradační studie K[Pt(NH₃)Cl₃], prekursoru platnatých cytostatik

Autor: Jitka Housková
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Lucie Potucká, Doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Ammin-tri(chlorido)platnatan draselný, K[Pt(NH₃)Cl₃], je v současné době mimo jiné využíván jako jeden z možných prekursorů při výrobě platnatých komplexů s cytostatickou aktivitou. Jako součást přípravy registračního řízení nového přípravku byla provedena degradační stabilitní studie K[Pt(NH₃)Cl₃] s cílem stanovit základní vlastnosti tohoto komplexu v modelových zátěžových situacích. Během degradační studie byl K[Pt(NH₃)Cl₃] vystaven extrémní fyzikální a chemické zátěži, tzn. kyselé, alkalické a oxidační prostředí, osvětlování předepsaným zdrojem záření, zvýšená teplota a zátěž vlhkým teplem. Pro kvalifikaci a kvantifikaci rozkladných produktů byla použita nově vyvinutá analytická metoda vysokoúčinné kapalinové chromatografie s UV/Vis detekcí. K separaci jednotlivých komplexů byla použita kolona s iontoměničovou stacionární fází. Součástí projektu byla optimalizace zmíněné analytické metody vhodným výběrem mobilní fáze. Nově vyvinutá metoda byla následně validována dle obecně platných předpisů. Ze získaných dat této studie vyplynulo, že degradace K[Pt(NH₃)Cl₃] probíhá velmi snadno ve vodných roztocích, kde je doprovázena vznikem aquakomplexů. Pevné vzorky vykazují vyšší stabilitu, ovšem dochází zde ke tvorbě monohydrátu.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

Separace K[Pt(NH₃)Cl₃] ze surového produktu preparativní kapalinovou chromatografií

Autor: Lucie Abelová
Ročník: B3
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Lucie Potucká

Ammin-tri(chlorido)platnatan draselný, K[Pt(NH₃)Cl₃], je prekurzorem protinádorových léčiv na bázi platiny. K[Pt(NH₃)Cl₃] může být připraven reakcí tetra(ammin)platnatanu draselného, K₂PtCl₄, s NH₄Cl za přítomnosti K₂CO₃ či Na₂CO₃. Produktem této reakce není čistý K[Pt(NH₃)Cl₃], ale směs komplexů K[Pt(NH₃)Cl₃], K₂PtCl₄, cis-Pt(NH₃)₂Cl₂ a chloridů NH₄Cl a KCl. Cílem této práce je separace žádaného komplexu ze surového produktu. Separace K[Pt(NH₃)Cl₃] byla na základě předchozích zkušeností provedena pomocí iontoměničové preparativní chromatografie na silně bazické stacionární fázi Dowex X8. Pro eluci platinových komplexů byla použita 4 M HCl a pro získání draselné formy komplexu [Pt(NH₃)Cl₃]⁻ ekvimolární množství KCl. Stanovení obsahu platinových komplexů v jednotlivých frakcích bylo provedeno pomocí HPLC analytické metody s UV/Vis detekcí. Je známo, že K[Pt(NH₃)Cl₃] je možné získat ze surového produktu preparativní iontoměničovou chromatografií na silně bazické stacionární fázi. Doposud bylo provedeno pouze několik základních pokusů a postup nebyl optimalizován. Společně s optimalizací separace komplexu budou testovány i některé modifikace procesu jako jsou změna stacionární fáze nebo použití jiného než draselného chloridu, např. NaCl, NH₄Cl, aj.

Sekce : Syntéza a výroba léčiv

In vivo monitoring neurochemických změn v mozku potkanů

Autor: Lukáš Rambousek
Ročník: B3
Ústav: Organické technologie
Školitel: Doc. Ing. Petr Kačer, Ph.D., Ing. Kamila Syslová, RNDr. Karel Valeš, Ph.D.

Předkládaná práce si kladla za cíl kvantifikovat změny v hladinách dopaminu a jeho metabolitů ze vzorků odebraných *in vivo* z mozkového centra slasti a závislosti *nc.accumbens* (NA) u mláďat potkanů po akutní s.c. injekci metamfetaminu (MA) 1mg/kg. Vzorky byly odebírány *in vivo* z NA perfuzní mikrodialyzační technikou. Pro bioanalytické stanovení dopaminu a metabolitů – 4-hydroxyvanilové kyseliny (HVA) a 2-(3,4-dihydroxyfenyl)octové kyseliny (DOPAC) z mikrodialyzátů, byla použita vysoce citlivá a selektivní metoda HPLC-MS/MS. Odebrané mikrodialyzáty byly před analýzou stabilizovány kyselinou chlorovodíkovou a lyofylizovány. Výsledky ukázaly, že mláďata, jejichž matky byly vystaveny během březího období chronickému aplikování MA (5 mg/kg/den), měla zvýšené základní hladiny dopaminu i jeho metabolitů ve srovnání s kontrolní skupinou. Akutní podání MA vedla ke zvýšení hladiny dopaminu, HVA a snížení hladiny DOPAC. Kombinace těchto technik má své nezastupitelné místo v biomedicinském 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 : Syntéza a výroba léčiv

Technologie Mayolu

Autor: Martina Štekrová
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Eliška Leitmannová, Ph.D.

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. Cílem práce bylo nalézt vhodné katalyzátory pro první z těchto reakcí, kterou je katalytické štěpení β -pinenoxidu na perillový alkohol a jeho izomery. Samotný výzkum byl pak zaměřen především na hledání kyselých homogenních katalyzátorů. Testovány byly vybrané organické a anorganické kyseliny. Další náplní práce bylo nalezení vhodného rozpouštědla (tetrahydrofuran, dimethylformamid a různé ethery) a nastavení ostatních optimálních reakčních podmínek (především teploty). Jako optimální se ukázaly pokusy prováděné v katalytickém systému amonných solí- $\text{NH}_4\text{OAc} : \text{NH}_4\text{NO}_3$ (v hmotnostním poměru 1:1,5), zde bylo dosaženo až 53 % výtěžku při 100 % konverzi. Dosažené výsledky poskytují možnost budoucího využití této technologie v průmyslové výrobě ve firmě Aroma a.s.

Sekce : Organická technologie

Možnost zpracování hydrorafinovaných rostlinných olejů ethylenovou pyrolýzou

Autor: Bc. Jan Horáček
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Prof. Ing. Zdeněk Bělohav, CSc., Ing. David Kubička, Ph.D. (VÚAnCh)

Práce je zaměřena na hydrorafinaci rostlinných olejů s využitím běžně používaných sulfidických katalyzátorů při teplotách 290-310 °C a tlaku vodíku 1,1-7,1 MPa. Jako suroviny byly použity slunečnicový a řepkový olej (rafinovaný a surový). Složení hydrorafinátů bylo sledováno plynovou chromatografií. Vybrané vzorky byly podrobeny analýze pyrolýzní plynovou chromatografií, při které byly sledovány výtěžky ethylenu, propylenu a dalších pyrolýzních produktů v závislosti na hmotnostním poměru C_{18}/C_{17} n-alkanů v surovině. U všech pyrolýzovaných vzorků byl oproti běžným uhlovodíkovým surovinám pozorován velmi vysoký výtěžek ethylenu i propylenu. Naopak v produktech pyrolýzy byl zaznamenán výrazně nižší podíl olejových frakcí.

Sekce : Organická technologie

Automatické generování systému pyrolýzních reakcí

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

Jednou z největších překážek při tvorbě mechanistických modelů pyrolýzy uhlovodíků je extrémní počet chemických reakcí podílejících se i na reakčním systému pyrolýzy jediné látky. Přitom jsou tyto reakce řízeny omezeným počtem nepříliš složitých pravidel. Práce se proto zaměřuje na vývoj počítačového programu, který bude schopen plně automaticky generovat kompletní síť reakcí, které mohou probíhat při pyrolýze zadané chemické látky, a dále na výběr reakcí, jejichž průběh se na chování modelu významně projeví.

Vývoj programu je veden v obecné rovině, aby byla zajištěna možnost jeho dalšího zdokonalování, a také aby bylo možné vytvořené moduly použít jako interaktivní součásti jiného softwaru (např. modelu pyrolýzní pece PYROL). Práce se systematicky věnuje implementaci algoritmů, které představují související a obslužný aparát nutný pro generování mechanismu. K reprezentaci struktur molekul a radikálů i k práci s nimi byly použity nástroje, jež poskytuje teorie grafů. K práci s grafy bylo využito objektově orientované programování.

Sekce : Organická technologie

Technologie "Fructose"

Autor: Petr Jansa
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Prof. Ing. Libor Červený, DrSc., Ing. Eliška Leitmannová, Ph.D.

Fructose je komerční název pro ethyl-(2-methyl-1,3-dioxolan-2-yl)-acetát – vonnou látku, jejíž výrobní postup byl v rámci předkládané práce zpracováván. Fructose vzniká kondenzační reakcí ethyl-acetoacetátu s ethylenglykolem v přítomnosti kyselého katalyzátoru. Jedná se o rovnovážnou reakci, při níž vzniká jako vedlejší produkt voda, jejímž vhodným odstraňováním lze získat produkt ve vysokém výtěžku.

V rámci vývoje této technologie byla provedena literární rešerše, získané poznatky experimentálně ověřeny v laboratorním měřítku, optimalizovány a použity jako podklad pro uskutečnění provozní zkoušky v a. s. Aroma – Židovice. Výsledky provozní zkoušky jsou impulsem pro další optimalizaci vedoucí k průmyslové výrobě této žádané vonné látky.

Sekce : Organická technologie

Hydrogenace aromatických sloučenin na cykloparafinické deriváty

Autor: Bc. Július Maščeník
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Eliška Leitmannová, Ph.D.

Předkládaná práce se zabývá optimalizací procesu hydrogenace 2-fenylethanolu na 2-cyklohexylethanol, který se používá v průmyslu látek vonných a chuťových.

Byly vypracovány analytické metody pro pozorování průběhu reakce a studovány základní parametry reakce, ovlivňující její průběh. Byl sledován vliv teploty reakce, tlaku vodíku v autoklávu, množství katalyzátoru ($\text{Ni}/\text{Al}_2\text{O}_3$) a vliv přísadky Adkinsova katalyzátoru na selektivitu tvorby žádaného 2-cyklohexylethanolu. Nejlepší selektivity 52,4 % bylo dosaženo při teplotě 180°C, tlaku 10 MPa a množství katalyzátoru 2 hm. % na navážku substrátu bez přísadky Adkinsova katalyzátoru. Při použití jiných podmínek dochází k výraznému snížení selektivity vlivem probíhajících nežádoucích štěpných reakcí.

Sekce : Organická technologie

Oxidace odpadních glycerolových vod ve zkrápěném reaktoru

Autor: Roman Snop
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Doc. Ing. Vratislav Tukač, CSc.

Trvale udržitelný rozvoj chemického průmyslu, využívání obnovitelných zdrojů a výroba biopaliv, klade nové nároky na čištění odpadních vod a jejich recyklaci. Přetížené biologické čistírny odpadních vod zavedávají důvod pro hledání nových způsobů zpracování.

Předmětem práce bylo srovnávací studium dvou způsobů oxidací glycerolu ve vodě.

1. Fentonovy oxidace glycerolu peroxidem vodíku ve zkrápěném reaktoru v přítomnosti homogenního a heterogenního katalyzátoru za atmosférického tlaku.
2. Katalytické mokré oxidace za zvýšeného tlaku (5 MPa) a teploty (100°C).

Míra oxidace ve zkrápěných reaktorech byla sledována při kontinuálním i periodicky modulovaném nástřiku kapaliny a za konstantního průtoku plynu v závislosti na době prodlení a parametrech modulační.

Za určitých podmínek se při periodickém režimu podařilo dosáhnout vyšší konverze oxidace glycerolu ve vodě, jak při Fentonově, tak při katalytické mokré oxidaci.

Sekce : Organická technologie

MOF - Metal organic framework

Autor: Bc. Sarah Becharová
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Eliška Leitmannová, Ph.D.

Tato práce se zabývá přípravou "Metal organic frameworks" a jejich využitím v katalýze. MOF je nová třída materiálů používaná především pro skladování plynů, tyto materiály se vyznačují nízkou hustotou a vysokým specifickým povrchem. Pórovité materiály s velkými, pravidelnými kavitami a tunely jsou stále více vyhledávány pro aplikaci v katalýze, separaci a skladování plynů. V závislosti na struktuře a velikosti pórů je umožněno vniknout do těchto materiálů pouze některým molekulám. Tyto materiály obsahují gigantické póry, přičemž ty největší mohou sloužit dokonce jako nanoreaktory. Z hlediska aplikace v katalýze byla studována jejich kyselé centra. Získané poznatky budou dále využity pro štěpení beta-pinenoxidu na perilový alkohol.

Sekce : Organická technologie

Hydrogenace skořicového aldehydu

Autor: Bc. Jan Krygel
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Eliška Leitmannová, Ph.D.

V rámci dlouhodobé spolupráce mezi Aroma a.s. byla řešena problematika hydrogenace 3-fenylprop-2-enalu na 3-fenylpropan-1-ol. Daná práce se zabývá studii hydrogenačních vlastností komerčních katalyzátorů na bázi mědi a optimalizaci podmínek pro selektivní hydrogenaci 3-fenylprop-2-enalu.

Byla řešena vlastní selektivní hydrogenace 3-fenylprop-2-enalu, kde bylo cílem vést reakci tak, aby docházelo pouze k hydrogenaci aldehydické skupiny a dvojně vazby, aniž by docházelo k dalším hydrogenačním nebo hydrogenolytickým reakcím.

Pro tento typ reakci se využívají katalyzátory Adkinsova typu. Pro danou hydrogenaci byly testovány katalyzátory od dvou výrobců. Prvním byla firma KataLeuna, která dodala katalyzátory KL 1970-P20, tj. katalyzátor původní, který přestala vyrábět a o jeho nahrazení se jednalo, KL 1962-T a KL 1945O-T3, druhým byla Süd-Chemie AG, která poskytla katalyzátory T4419-PLV, T4466 a G-99 B-0 PLV.

Tyto katalyzátory byly testovány za reakčních podmínek, používaných v a.s. Aroma.

Nejlépeších výsledků (selektivita 98 %, výtěžek 86 % 3-fenylpropan-1-olu) bylo dosaženo s katalyzátorem G99 B-0 PLV od výrobce Süd-Chemie AG.

Sekce : Organická technologie

Vliv velikosti částic palladiových nosičových katalyzátorů na průběh hydrogenace CC trojné vazby

Autor: Van Phuong Quynh
Ročník: B3
Ústav: Organické technologie
Školitel: Doc. Ing. Petr Kačer Ph.D.

Katalytická reakce, interakce katalyzátor – substrát, je ovlivněna řadou faktorů, mezi něž 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 alkynických substrátů – vzájemně se lišících polohou CC trojné vazby v molekule reagujícího substrátu. Hlavním cílem práce bylo poukázat jednak na vliv molekulární struktury těchto substrátů a také na vliv 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 v individuálním a konkurenčním uspořádání. Získané výsledky umožnily nejen interpretovat uvedený molekulární strukturní vliv, ale především navrhnout cestu vývoje nových palladiových katalyzátorů s ohledem na parametr velikosti částic aktivního kovu.

Sekce : Organická technologie

Katalytické vlastnosti vybraných ftalocyaninů při rozkladu chlorfenolických látek za přítomnosti oxidačního činidla

Autor: Zuzana Tomešová
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Doc. Dr. Ing. Petr Kluson

Akumulace chlorovaných aromátů v životním prostředí je výsledkem jejich pomalé biodegradace na neškodné nebo lépe odbouratelné chemikálie. Tyto biologické způsoby jsou velmi zdoluhavé, proto je potřeba aktivnějších chemických katalyzátorů pro oxidativní degradaci halogenovaných fenolů.

Cílem této práce bylo využití syntetických porfyrinů – ftalocyaninů (FTC) pro katalytický rozklad modelových polutantů rozpustných ve vodě. Jako fenolické látka byl vybrán 4 - chlorfenol z důvodů jeho vysoké toxicity a jeho relativně častému výskytu v povrchových vodách. Jako oxidační činidla byly použity peroxid vodíku, peroxooctová kyselina, peroxid vodíku stabilizovaný močovinou a tercbutylhydroperoxid. Reakce byly vedeny bez přístupu světla. Studovaných oxidačních reakcí se účastní hydroxylový radikál ($\cdot\text{OH}$) z oxidačního činidla. Při jeho tvorbě působí ftalocyaniny jako katalyzátory.

Bylo zjištěno, že při reakci chlorfenolů s vybranými oxidačními činidly dochází k oxidační dechloraci za současného štěpení aromatického jádra.

Sekce : Organická technologie

Teplotně programovaná redukce NiO ve vzorcích měďnatého nosičového katalyzátoru

Autor: Daniela Strejcová
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Doc. Ing. Bohumír Dvořák, CSc.

Teplotně programovaná redukce (TPR) je vhodná metoda ke studiu redukovatelnosti oxidických složek v heterogenních katalyzátorech. Rychlost jejich redukce je kromě reakčních podmínek závislá na mnoha dalších faktorech. Identifikace jednotlivých redukovatelných složek v TPR spektrech více-složkových systémů může být proto obtížně řešitelnou úlohou.

Cílem této práce bylo užít metodu TPR k indikaci teplotního intervalu, ve kterém dochází k redukci NiO (cca 5 hm.%), který je obtížněji redukovatelnou složkou v měďnatém nosičovém katalyzátoru. V případě dostatečné citlivosti metody pokusit se o analýzu stupně redukce NiO v katalyzátoru předem redukovaného za definovaných podmínek. Nesnadnost a nejednoznačnost interpretace TPR spektra měďnatého katalyzátoru s NiO složkou si vyžádala měření celé řady spekter a podrobné studium vlivu mnoha faktorů na tvar a polohu teplotně redukčních maxim v TPR spektru.

Sekce : Organická technologie

Fentonova oxidace glycerolu v mikrozařízení

Autor: Martin Veselý
Ročník: M1
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Vladimír Jiříčný, CSc.

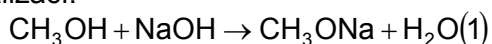
V chemickém a farmaceutickém průmyslu se poměrně často objevují procesní a odpadní vody, které jsou obtížně biologicky odbouratelné, případně jsou pro biologicky aktivní látky toxické. Jednou z cest, jak lze tyto vody dekontaminovat je použití Fentonovy oxidace. Tato práce se zabývá odbouráváním glycerolu, jehož vodný roztok vzniká při reesterifikaci vyšších mastných kyselin při výrobě bionafty. Jako metoda byla použita tzv. mokrá oxidace – oxidace peroxidem vodíku za katalýzy železnatých iontů v kyselém prostředí při mírně zvýšené teplotě a při normálním tlaku. Cílem experimentální studie bylo ověření využití mikrokapilárního reaktoru při zkoumání vlivu různých operačních podmínek (teplota, průměr kapiláry, doba zdžení) na průběh reakce a porovnání naměřených výsledků s výsledky ze zkrápěného reaktoru (průměr 100 mm). Mikroreaktory jsou potenciálně slibná zařízení k výzkumu průběhu reakcí z hlediska času, spotřeby chemikálií i bezpečnosti práce

Sekce : Organická technologie

Stanovení koncentrace složek roztoku methanolátu sodného v methanolu

Autor: Radka Zdeňková
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Ladislav Kurc, CSc.

Průmyslově významný způsob výroby methanolátu sodného je založen na vratné reakci (1), jejichž rovnovážná konstanta má hodnotu asi 0,05 pro látkový poměr voda:methanolát sodný roven 0,3-0,8. S ohledem na tuto rovnovážnou konstantu obsahuje technický methanolát sodný, který se dodává ve formě 30% roztoku v methanolu i reaktanty rovnice (1). Přičemž parametrem charakterizujícím jeho kvalitu je obsah NaOH. Jeho stanovení v takovéto směsi však není v literatuře popsáno. Vypracování postupu stanovení koncentrace všech složek v roztoku methanolátu sodného, které je také nutné ke stanovení rovnovážné konstanty reakce (1), bylo cílem této práce. Ke stanovení obsahu vody byla použita titrace dle Karla Fischera. Tato metoda však vyžaduje upravení pH roztoku do oblastí 4-8. Neutralizace NaOH je však spojena se vznikem reakční vody. Proto stanovení koncentrace vody a hydroxidu sodného bylo řešeno komplexně. Je založeno na reakci s bezvodou HCl a acetanhydridem. Stejný vzorek se zneutralizuje jednak HCl a jednak acetanhydridem. Dvojnásobek rozdílu vody odpovídá množství NaOH ve vzorku. Po odečtení vody z neutralizace NaOH se získá hodnota obsahu vody ve vzorcích před neutralizací.



Sekce : Organická technologie

Testování niklových katalyzátorů

Autor: Veronika Sedláková
Ročník: M2
Ústav: Organické technologie
Školitel: Ing. Eliška Leitmannová, Ph.D.

Cílem této práce bylo zjistit vliv teploty redukce na aktivitu katalyzátorů na bázi niklu s nosičem aluminou dodaných firmou Süd Chemie. Modelovým substrátem byl cinnamaldehyd. Aktivita dodaných katalyzátorů byla porovnávána s Raneyovými katalyzátory (Johnson Matthey a Degussa).

Protože cinnamaldehyd má dvě hydrogenovatelné funkční skupiny (dvojnou vazbu a aldehydickou skupinu), byly pro zjednodušení zvoleny dvě látky s různou hydrogenovatelnou skupinou - cyklohexen s dvojnou vazbou a acetofenon s ketonickou skupinou. Tyto substráty byly hydrogenovány s použitím všech katalyzátorů a byla porovnána jejich aktivita. Cinnamaldehyd byl hydrogenován za teploty 80 °C, cyklohexen za laboratorní teploty, acetofenon v rozmezí teplot 80 - 120 °C a tlak vodíku byl pro všechny substráty stejný - 5 MPa. Dalším pokračováním práce bude testování různých způsobů redukce.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Hodnocení přírodního kaučuku SVR 10 (Vietnam) - využití přístroje RPA

Autor: Bc. Drahomír Čadek
Ročník: M2
Ústav: Polymerů
Školitel: Doc. Ing. Antonín Kuta, CSc.

Přírodní kaučuk se vyznačuje nestejnorodostí jednotlivých dodávek, což činí výrobcům pneumatik problémy s předpovídáním jeho zpracovatelského chování. Kolísání vlastností má různé příčiny, které lze rozdělit do dvou skupin:

1. Chemické (charakter latexu daný rozdíly v klimatu, složení půdy, druh kaučukovníku, ...).
2. Technologické (způsob sběru latexu, jeho koagulace, transport a skladování kaučuku).

Mezi vlastnosti kaučuku měřené v gumárenských závodech patří viskozita Mooney, plasticita, PRI, obsah těkavých látek, obsah popela, obsah nečistot, obsah N, pach a index D. Cílem této práce bylo zhodnotit rozsah jednotlivých materiálových charakteristik kaučuků z Vietnamu (Phuoc Hoa Rubber Joint Stock Company, Baria rubber company a Dong Nai rubber company) a pokusit se nalézt provázanost s údaji naměřenými přístrojem RPA. Vztahy materiálových vlastností mohou být vhodnou nápovědou pro zpracovatele při výběru vhodnějších metod a podmínek testování. Hodnocené kaučuky jsou dodávány do firmy Mitas k výrobě mimosilničních plášťů.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Depolymerizace siloxanového kaučuku pomocí silně kyselého iontoměníče

Autor: Bc. Jiří Šopík
Ročník: M2
Ústav: Polymerů
Školitel: Doc. Ing. Petr Hron, CSc.

Cílem práce bylo zjištění podmínek průběhu heterogenní katalytické depolymerace kapalného dimethylsiloxanového kaučuku v přítomnosti iontoměníče silně kyselého charakteru. Použit byl polymer Lukopren N 1000 a iontoměníč Lewatit K 2620.

Byl studován vliv složení reakční směsi, teploty a vlhkosti na průběh depolymerace, který byl sledován jako časový úbytek hmotnosti siloxanové fáze za zvýšené teploty v sušárně, v exsíkátorech se sušidlem, případně nad vodní hladinou při laboratorní teplotě. Depolymerace byla prováděna i v laboratorním hnětiči Brabender s možností obnovování povrchu reakční směsi. Zkoumána byla také možnost opakovaného použití ionexu bez nutnosti jeho regenerace. Práce je úvodní studií k výzkumu možnosti provádění depolymerace siloxanového řetězce (s cílem regenerace silikonové pryže) ve skleněné aparatuře, umožňující zachycení kapalných nízkomolekulárních podílů, které by byly následně analyzovány pomocí plynové chromatografie.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Modifikace Polyamidu 12

Autor: Bc. Jarmila Červinková
Ročník: M1
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Jan Šimek, CSc.

Protože nízká houževnatost omezuje aplikační vlastnosti polyamidu 12, bylo cílem naší práce připravit modifikátor zvyšující vrubovou houževnatost polyamidu 12 a zároveň umožňující lepší mísitelnost polyamidu 12 s nízkohustotním polyethylenem. K přípravě modifikátoru byl použit komerční maleinizovaný polyethylen, na který byly roubovány řetězce nízkomolekulárního polybutadienu s izokyanátovými skupinami. V práci byly porovnány mechanické vlastnosti (pevnost, tažnost, houževnatost) heterogenní směsi polyamidu 12 s polyethylenem a směsi modifikované. Práce se věnovala i možnému vlivu mikrostruktury (SEM) a mísitelnosti (DMA, DSC) na mechanické vlastnosti.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Hydrofobizace povrchu skla nízkomolekulárními siloxany

Autor: Bc. Lenka Ferdová
Ročník: M1
Ústav: Polymerů
Školitel: Doc. Ing. Petr Hron, CSc.

Hydrofobizací se rozumí úprava povrchu materiálů za účelem snížení jejich smáčivosti vodou. Na hydrofobitu má vliv kromě chemického charakteru povrchu i jeho drsnost. Hydrofobita a drsnost povrchu patří mezi faktory významně ovlivňující adhezi mikroorganismů - mikroorganismy v imobilizované formě vykazují účinnější metabolismus. Ve spolupráci s Ústavem kvasné chemie a bioinženýrství VŠCHT se snažíme nalézt materiál použitelný jako nosič mikrobiální populace pro biotechnologie, konkrétně pro dekontaminaci odpadních vod. Použitý druh bakterií *Rhodococcus erythropolis* je schopen odbourávat např. organické halogenderiváty, polyaromatické uhlovodíky či polychlorované bifenyly. Ve své práci se zabývám přípravou směsí oligosiloxanů ekvilibračními reakcemi oktamethylcyclotetrasiloxanu s hexamethyldisiloxanem za katalýzy kyselinou sírovou. Připravené směsi byly použity pro hydrofobizaci skla o různé drsnosti povrchu; byla zkoumána odolnost vytvořeného filmu vůči detergentům a vyhodnocen úhel smáčení upraveného povrchu. Vybrané vzorky byly podrobeny zkouškám adheze mikrobiální populace bakterií.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Bloková polymerizace hexano-6-laktonu za iniciace netradičními komplexy

Autor: Bc. Jan Hangan
Ročník: M2
Ústav: Polymerů
Školitel: Doc. Ing. Irena Prokopová, CSc.

Polymery a kopolymery hexano-6-laktonu patří do skupiny biodegradovatelných polymerů, což je řadí mezi materiály se speciálním využitím, zejména pak v lékařství. Bylo prokázáno, že z těchto polymerů je možno připravit nanovlákná, která propůjčují materiálům z nich připraveným jedinečné vlastnosti.

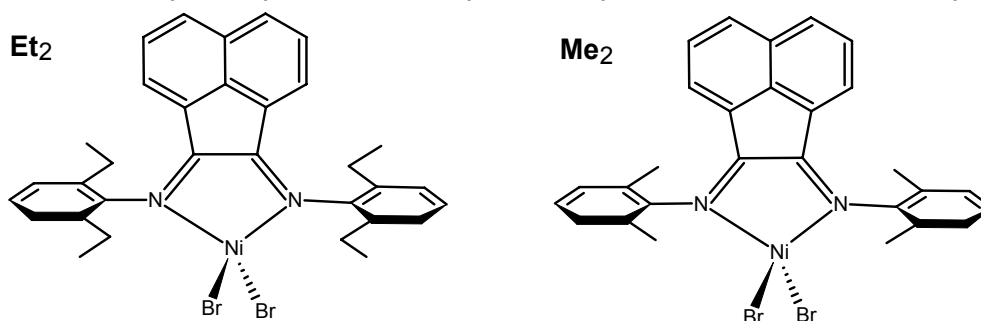
Pro blokovou polymerizaci hexano-6-laktonu (bez použití rozpouštědla) bylo použito tři iniciačních systémů, klasický 2-ethylhexanoát cínatý, v literatuře velmi často uváděný iniciátor pro polymerizaci hexano-6-laktonu a také dva iniciátory netradiční: analogický 2-ethylhexanoát hořečnatý a metalokarboranová sloučenina s dvojmocným atomem kobaltu. Účinnost iniciátorů byla porovnána na základě teplotní závislosti konverze monomeru na čas.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Možnosti řízení polymerace hex-1-enu iniciované diiminovými katalyzátory niklu a její kinetika

Autor: Bc. Zdeněk Hošťálek
Ročník: M1
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Jan Merna, Ph.D.

Cílem této práce bylo studium vlivu struktury diiminových komplexů niklu na rychlost polymerizace hex-1-enu. U komplexů s méně objemnými substituenty **Et₂** a **Me₂** byla podrobně zkoumána schopnost řízení polymerizace v závislosti na teplotě a koncentraci monomeru, přičemž byla porovnávána molární hmotnost, distribuce molekulových hmotností a mikrostruktura vzniklých polyhexenů získaných při polymerizaci s těmito komplexy.



Sekce : Chemie a technologie polymerů

Kopolymery na bázi L-laktidu a ε-kaprolaktonu

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

Polymerací cyklických monomerů L-laktidu a ε-kaprolaktonu lze připravit poly(L-laktid) a poly(ε-kaprolakton). Tyto polyestery mají vysoký obsah krystalické fáze, která negativně ovlivňuje rychlost jejich biodegradace. Obsah krystalické fáze lze efektivně snížit přípravou kopolymerů.

Cílem práce je příprava kopolymerů polymerací s otevření kruhu L-laktidu a ε-kaprolaktonu s různým zastoupením strukturních jednotek. Podmínky syntézy byly nastaveny tak, aby vznikl statistický kopolymer, jehož teplota tání, obsah krystalické fáze a teplota skelného přechodu byla závislá na struktuře kopolymeru. Zastoupení strukturních jednotek v kopolymeru bylo zjištěno z ¹H NMR a termické vlastnosti vyhodnoceny pomocí DSC. Tyto kopolymery byly použity k přípravě směsí s poly((R)-3-hydroxybutyrátem).

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Umělé stárnutí měkčených směsí PVC

Autor: Bc. Jiří Matys
Ročník: M2
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Radka Kalousková, CSc.

Práce se zabývá studiem umělého stárnutí tepelně stabilizovaných měkčených směsí PVC. K měkčení byly použity různé typy změkčovadel, lišících se strukturou, molekulovou hmotností, měkčící účinností, stabilitou i ekologickou přijatelností. Testovací cyklus v xenonové testovací komoře Q-Sun zahrnoval účinek slunečního záření, deště a zvýšené teploty. Byla sledována změna tepelné stability, mechanických a termických vlastností, vývoj optických parametrů a konjugovaných dvojných vazeb v polymerním řetězci v závislosti na době expozice. Změkčovadla, v závislosti na chemickém složení, výrazně ovlivňují odolnost měkčených směsí stárnutí a tím i jejich mechanické a termické vlastnosti.

Sekce : Chemie a technologie polymerů

Polymerizace cyklických esterů v monomerní fázi iniciovaná sloučeninami biogenních kovů

Autor: Bc. Jakub Mráček
Ročník: M1
Ústav: Polymerů
Školitel: Doc. Ing. Irena Prokopová, CSc.

Polymerace ϵ -kaprolaktonu a L-laktidu jsou tradičně iniciovány organokovovými sloučeninami, především na bázi cínu. V literatuře je detailně prostudována roztoková polymerizace obou monomerů, jen ojediněle jsou zmiňovány polymerizace v monomerní fázi. Vzhledem k tomu, že poly(ϵ -kaprolakton) i poly(L-laktid) patří mezi biodegradovatelné materiály užívané v lékařských aplikacích, nabízí se otázka vlivu cínu na organismus. Práce se proto zabývala studiem iniciační účinnosti netradičních iniciátorů na bázi biogenních kovů 2-ethylhexanoátu hořečnatého a 2-ethylhexanoátu vápenatého na polymerizaci, příp. kopolymerizaci obou zmíněných monomerů bez přítomnosti rozpouštědel, tedy v monomerní fázi.

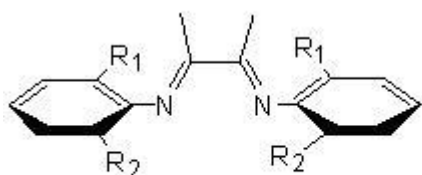
Sekce : Chemie a technologie polymerů

Polymerace hex-1-enu katalyzovaná komplexy niklu s diiminovými ligandy na bázi butan-2,3-dionu

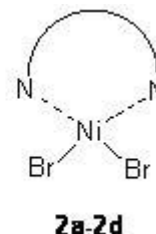
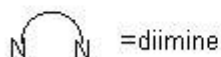
Autor: Bc. Lubomír Nový
Ročník: M2
Ústav: Polymerů
Školitel: Ing. Jan Merna, Ph.D.

Kysele katalyzovanou reakcí butan-2,3-dionu s v o-polohách substituovanými aniliny byly připraveny diiminové ligandy **a-d**. Tyto byly následně využity k syntéze komplexů niklu reakcí příslušného ligandu s (dimethoxyethan)nikldibromidem.

Jednotlivé katalyzátory **2a-2d** aktivované methylalumoxanem byly testovány při polymerizaci hex-1-enu prováděné v chlorbenzenu. Byl studován vliv teploty a koncentrace monomeru na konverzi monomeru, molární hmotnost syntetizovaných polymerů a její distribuci a na větvení polymeru.



- a** $R_1=R_2=Me$
- b** $R_1=R_2=Et$
- c** $R_1=tBu, R_2=H$
- d** $R_1=Ph, R_2=H$



Sekce : Materiálové inženýrství

Studium spojitosti Au nanovrstev na polymeru

Autor: Kateřina Bartečková
Ročník: B3
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Jakub Siegel

Cílem práce byla charakterizace ultratenkých metalických vrstev z hlediska přechodu od nespojitě do spojitě oblasti na různě modifikovaném povrchu HDPE. Tento přechod byl detekován měřením hodnot plošné rezistance, která vykazuje v oblasti tvorby spojitě vrstvy strmý pokles. Depozice probíhala na původní a modifikovaný povrch polyethylenu (plazmatem modifikovaný a Au-nanočásticemi roubovaný polymer). Vrstvy Au o proměnné tloušťce byly deponovány metodou katodového naprašování na zařízení SPUTTER COATER 050. Plošná rezistance vrstev byla v případě nespojitých vrstev (vysoké hodnoty rezistance) měřena na picoampermetru KEITHLEY 487, spojitě vrstvy pak na multimetru UNI-T typ UT83. Povrchová morfologie vzorků byla sledována metodou AFM.

Sekce : Materiálové inženýrství

Adheze buněk na roubovaném polymeru

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

Polymerní materiály se stále více používají v tkáňovém inženýrství a dále se pak aplikují v medicíně. Pro některé aplikace je nutné provést povrchové modifikace ke zvýšení biokompatibility. Pro experimenty byly použity polystyren (PS), polytetrafluoretylen (PTFE) a PS upraven pro tkáňové kultivace. PS a PTFE byly modifikovány Ar⁺ plazmou různou dobou (50, 150 a 400 s). Následně na ně byl naroubován PEG o různé molekulové hmotnosti (300, 6000, 20 000 g/mol). Adheze a proliferace fibroblastů na PS a PTFE byla studována pomocí MTT testu. Pro studium fyzikálně-chemických vlastností byla použita mikroskopie atomárních sil (AFM) a metoda goniometrického měření kontaktního úhlu. Výsledky měření ukázaly, že modifikace plazmou má pozitivní vliv na adhezi buněk. Vzorky PS modifikované plazmou a roubované PEG jsou vhodnější pro adhezi fibroblastů než PTFE modifikované a roubované PEG. Vzorky PTFE modifikované v plazmě delší dobu a roubované PEG vykazují vyšší proliferaci buněk než PTFE modifikované kratší dobu v plazmě. PS modifikován a následně roubován PEG má pozitivní vliv na proliferaci fibroblastů. Expozicí plazmou a následným roubováním vzorků dochází k výrazným změnám v povrchové morfologii a dochází ke snížení kontaktního úhlu.

Sekce : Materiálové inženýrství

Kontakty na SiC

Autor: Bc. Stanislav Cichoň
Ročník: M2
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Doc. Ing. Petr Macháček, Csc.

SiC je využíván jako polovodivý materiál pro konstrukci elektronických součástí se zajímavými vlastnostmi. Pro správnou funkci součástky je vyžadováno její kvalitní kontaktování. Kontakt musí být ohmický. Kontakty jsou vytvářeny depozicí tenkých kovových vrstev na povrch SiC ve vakuu. Na kvalitu výsledných kontaktů má vliv spousta faktorů: chemická čistota povrchu, povrchové stavy, povrchová morfologie, druh a čistota deponovaného kovu, chemické reakce na rozhraní kovu a SiC atd. V literatuře se uvádí, že pozitivní vliv má provedení hydrogenace nevysycených vazeb přítomných na čistém povrchu SiC případně vysycení těchto vazeb OH skupinami, čehož se docílí například vysokoteplotní oxidací SiC v atmosféře O₂, následným odstraněním vzniklé SiO₂ a grafitické vrstvy iontovým bombardem a nakonec vysokoteplotní reakcí s H₂. K vysycení H atomy nebo OH skupinami může také dojít povařením oleptaného SiC ve vroucí deionizované H₂O. Aplikují se různé čisticí postupy s různými výsledky. Mým úkolem je provést sadu experimentů mokrého čištění SiC v různých roztocích na bázi HF, NH₃, H₂O₂ a dalších činidel a vyšetřit vliv těchto roztoků a případné trendy. Dosavadní výsledky nevykazují výraznější ovlivnění kvality kontaktů, alespoň z hlediska hodnot jejich rezistivity. Je třeba dále uskutečnit statisticky významné množství experimentů pro zpřesnění výsledků a minimalizaci nejistot a rozptylů.

Sekce : Materiálové inženýrství

Modifikovaný polymer pro bioaplikace

Autor: Irena Kašpárková
Ročník: M2
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Kateřina Kolářová

V současné době dochází k prudkému rozvoji tkáňového inženýrství a biomateriálů. V rámci této práce byl studován materiál použitelný pro medicínské účely na bázi modifikovaného polystyrenu (PS). Vzorky byly exponovány v plazmatu (50 až 400s) a poté exponovány v destilované vodě, roztoku aminokyseliny (glycin) a roztoku poly(ethylenglykolu) (PEG). Po vysušení a "vyzrání" vzorků byly zkoumány změny povrchových vlastností (polarity a smáčivosti) pomocí stanovení kontaktního úhlu a povrchová morfologie (metoda AFM). Povrchová polarita a smáčivost přímo ovlivňují biokompatibilitu materiálu, tzn. polarita polymeru ovlivňuje interakci buňka-materiál. Z výsledků je patrné, že modifikace vzorků kontaktní úhel snižuje a proto zvyšuje polaritu. K nejpatrnějším změnám dochází během prvních dnů od modifikace, kdy dochází ke zvyšování kontaktního úhlu s časem uplynulým od doby expozice. Roubování PS v roztoku aminokyseliny vedlo po 60 dnech ke snížení kontaktního úhlu v porovnání s nemodifikovaným PS. Roubování PS v roztoku PEG způsobilo, že po 60 dnech nebyl pozorován výrazný rozdíl mezi hodnotou roubovaného, plazmovaného a původního PS.

Sekce : Materiálové inženýrství

Fyzikálně-chemické vlastnosti roubovaného PE

Autor: Zuzana Makajová
Ročník: M1
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Nikola Kasálková

V tkáňovém inženýrství, v medicíně a technických odvětvích se uplatňují polymerní materiály. Podle potřeby uplatnění se různě upravují. Povrch lze modifikovat v plazmatickém nebo laserovém výboji a následně na něj lze roubovat aminokyseliny nebo jiné sloučeniny. V této práci jsem sledovala změny fyzikálně-chemických vlastností modifikovaného polymeru. Studovaným materiálem byl rozvětvený polyethylen (LDPE), který byl modifikován v plasmě (5mA, 48V, 0,24W) ionty Ar⁺ po dobu 150s a následně roubován poly(ethylenglykol) (PEG) o třech molekulových hmotnostech (300, 6 000, 20 000 g/mol). Změnu povrchových vlastností jsem studovala pomocí goniometrie, mikroskopu atomárních sil (AFM) a optickým laserovým rastrovacím konfokálním mikroskopem (KM). Při studiu stárnutí exponovaného PE bylo zjištěno, že k ustálení hodnoty kontaktního úhlu u roubovaných vzorků dochází 25. den od modifikace. U "vyzrálých" vzorků lze konstatovat, že s rostoucí molekulovou hmotností naroubovaného PEG klesá kontaktní úhel. Z výsledků AFM a KM vyplývá, že následkem roubování PEG s různou délkou řetězce dochází na povrchu polymeru ke změnám povrchové morfologie.

Sekce : Materiálové inženýrství

Ablace a stárnutí PTFE po degradaci plazmatem

Autor: Bc. Alena Řezníčková
Ročník: M2
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Aleš Chaloupka

Polymery nacházejí významné uplatnění jako součásti biomateriálů, kompozitů, ochranných vrstev, mikroelektronických součástek a v řadě dalších aplikací. Obecně je při těchto aplikacích často kladen požadavek na „speciální“ povrchové vlastnosti. Povrch původních polymerů těmto požadavkům většinou nevyhovuje. Polymery mají pro řadu aplikací vhodné fyzikální vlastnosti, lze je relativně snadno přetvářet a jsou levné. Modifikace polymerů se stala významnou součástí jejich průmyslového využití. Jedná se o expozici povrchu polymerů např. plamenem, plazmatem, fotony, svazkem elektronů nebo iontů, gama a rentgenovým zářením. Cílem povrchové modifikace je např. zlepšení chemické odolnosti, potiskovatelnosti povrchu, změna povrchové energie, smáčivosti, vodivosti, morfologie, snížení tření povrchu. Tato práce se zabývá ablací a smáčivostí polytetrafluorethylenu (PTFE) po modifikaci Ar plazmatem. Ablace polymeru byla studována gravimetricky. Množství ablatované vrstvy narůstá s dobou modifikace a použitým výkonem plazmatu. Dále byla studována smáčivost PTFE goniometricky. Kontaktní úhel klesá s rostoucí dobou degradace a naopak roste s dobou stárnutí vzorku. Povrchová morfologie vybraných vzorků byla studována metodou AFM.

Sekce : Materiálové inženýrství

Odpor Au nanovrstev na PE modifikovaném v plazmatu

Autor: Petr Šimek
Ročník: B3
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Aleš Chaloupka

Tenké kovové vrstvy na polymerním substrátu stále nacházejí uplatnění v mikroelektronice, kde je snaha dosáhnout dvojvrstvy ideální vodič - ideální izolant. Samotný polymer ovšem není pro nanášení Au vrstev zcela vhodný, a proto se různými způsoby modifikuje jeho povrch (laserem, RTG zářením, svazkem iontů). V této práci byla studována modifikace HDPE (vysokohustotní polyethylen) plasmatickým výbojem ve vakuovém prostředí. Upravený povrch má pak zcela odlišné vlastnosti od surového polymeru. Jedná se především o drsnost a chemické složení (zkrácení uhlovodíkových řetězců, vznik radikálů). Drsnost má zásadní vliv na naprašování povrchu zlatem. Vznik spojitě vrstvy kovu je charakterizován prudkým nárůstem vodivosti. Spojitost vrstvy byla proto charakterizována měřením jejího plošného odporu. Povrchová morfologie různě upravených vzorků byla studována metodou AFM (mikroskopie atomárních sil). Změna složení povrchu by se měla projevit i na jeho rozpustnosti v polárních rozpouštědlech. Polymery byly namočený ve vodě resp. methanolu po dobu jednoho dne a po vysušení váženy.

Sekce : Materiálové inženýrství

Adheze buněk na uhlíkové vrstvě deponované na polymer

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

Práce se zabývá interakcí buněk a uhlíkové vrstvy deponované na polymerní substrát. Uhlíkové vrstvy byly napařeny na různé polymery – PTFE (polytetrafluorethylen), PS (polystyren), HDPE (vysokohustotní polyetylen), LDPE (nízkohustotní polyetylen) a PET (polyethylentereftalát). Studium adheze a proliferace buněk in vitro bylo provedeno použitím lidských embryonálních fibroblastů (LEP). Dále byly použity lidské nádorové keratinocyty (FaDu) odebrané z hltnu. Adheze lidských embryonálních plicních fibroblastů (LEP) byla studována na vzorcích PTFE, na které byla deponována uhlíková vrstva z různých vzdáleností od zdroje (2, 4 a 7 cm). Dále byla adheze studována na vzorcích PS, HDPE, LDPE a PET, na něž byla uhlíková vrstva napařena ze vzdálenosti 7 cm. K proliferaci byly použity pouze lidské embryonální plicní fibroblasty (LEP). „Dvoubodová“ proliferace byla zkoumána na vzorcích PTFE s uhlíkovou vrstvou napařenou ze vzdálenosti 2, 4 a 7 cm od zdroje. „Jednobodová“ proliferace byla provedena na vzorcích PS, HDPE, LDPE a PET s uhlíkovou vrstvou napařenou ze vzdálenosti 7 cm od zdroje. Při použití buněk LEP a FaDu vždy došlo ke zvýšení atraktivity povrchu substrátu díky přítomnosti uhlíkové vrstvy pro buňky. To se projevilo vyšším počtem adherovaných a proliferovaných buněk i vyšší hodnotou absorbance ve srovnání se vzorky bez uhlíkové vrstvy.

Sekce : Materiálové inženýrství

Charakterizace Au nanovrstev na skle a křemíku

Autor: Jiří Vojtík
Ročník: B3
Ústav: Inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Jakub Siegel

Cílem práce byla charakterizace tenkých Au vrstev naprášených na různých substrátech (sklo, křemík). Byly studovány závislosti rezistivity vrstev na tloušťce a době depozice. Byla získána závislost tloušťky vrstvy na době depozice a vypočtena hustota Au vrstvy v závislosti na její tloušťce pro oba substráty.

Tloušťky vrstev byly na skle i na Si měřeny metodou AFM (atomic force microscopy). Spojitost vrstev byla studována měřením plošné rezistance. Bylo provedeno srovnání vlastností Au vrstev při stejných podmínkách naprašování v závislosti na typu substrátu.

Metodou AFM byly naměřeny odlišné tloušťky vrstev deponovaného Au. Růst vrstev má přibližně lineární charakter v závislosti na době naprašování. Pro oba substráty bylo zjištěno, že přechod od nespojitě po spojitou Au vrstvu je doprovázen prudkým poklesem plošné rezistance. Hustota metalické vrstvy v závislosti na její tloušťce má obdobný průběh při depozici na sklo i křemík, ale absolutní hodnoty jsou vyšší u skla vzhledem k morfologii povrchu obou substrátů.

Sekce : Technologie, konzervování a restaurování - kovy

Elektrochemické odstraňování chloridů ze železných archeologických nálezů

Autor: Bc. Martina Anisová
Ročník: M1
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Prof. Ing. Pavel Novák, CSc.

Zkorodované předměty bývají v různé míře kontaminovány chloridovými ionty. Pro další ochranu a stabilizaci předmětu musí být tyto ionty stimulující korozi odstraněny. Konzervátorské postupy, které jsou většinou k těmto účelům určeny, využívají nejrůznějších technik, z nichž mnoho je založeno na difuzi chloridů do vody s přidávkou redukčních činidel.

Další možností odstraňování chloridů z korozních produktů jsou elektrochemické techniky, při kterých jsou chloridy odstraňovány migrací směrem od katody k anodě.

Cílem této práce bylo odstraňování chloridů z korozních produktů na souboru zkorodovaných zasolených železných vzorků, kdy byl tento soubor rozdělen na tři skupiny. V první skupině vzorků byl stanoven celkový obsah chloridů ve výchozím materiálu pomocí průtokové vstřikovací analýzy (FIA). Zbylé dvě skupiny vzorků byly odsolovány v pitné vodě za stejných podmínek jak elektrochemicky, tak i pouhou difúzí chloridových aniontů. Účinnost obou metod odstraňování chloridů byla porovnána a jak ukázala měření, prostá difúze byla v některých případech účinnější než elektrochemická metoda.

Sekce : Technologie, konzervování a restaurování - kovy

Cechovní paladium

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

Cílem práce je preventivní konzervace tepané sošky z mosazného postříbřeného plechu. Předmět byl datován podle dostupných informací z regionálního muzea v Kolíně, materiálové složení bylo určeno analýzou na elektronovém rastrovacím mikroskopu, následoval průzkum předmětu a jeho vyhodnocení a byl navržen postup restaurování. Po demontáži sošky byly odstraněny korozní produkty mědi a stříbra s pomocí 10 % kyseliny sírové a Chelatonu a následovala konzervace předmětu Paraloidem B72. Po kompletaci sošky byl navržen ochranný režim památky vyhovující expozici cechovního paladia v interiéru.

Sekce : Technologie, konzervování a restaurování - kovy

Restaurování mosazné mísy

Autor: Marie Bernotová
Ročník: B3
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Milan Kouřil, Ph.D

Cílem práce je preventivní konzervace s obnovou povrchové úpravy mosazné postříbřené mísy na ovoce. Složení materiálu bylo určeno analýzou na elektronovém rastrovacím mikroskopu a metalografickým výbrusem. Po řádném průzkumu předmětu a jeho vyhodnocení byl navržen postup restaurování. Následovalo odmaštění předmětu a odstranění korozních produktů za použití thiomocoviny. Povrchová úprava byla obnovena galvanickým pokovením s následnou patinací. Po kompletaci byl navržen ochranný režim památky pro uložení v interiéru.

Sekce : Technologie, konzervování a restaurování - kovy

Ciborium

Autor: Klára Čechlovská
Ročník: B3
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Alena Michalcová

Cílem práce je preventivní konzervace liturgické památky ciboria z pozlacené mosazi a pozlaceného stříbra. Dle nalezené puncovní značky a porovnání s literaturou byla výroba předmětu datována po roce 1888 v Německé provenienci. Materiálové složení bylo určeno analýzou na skenovacím elektronovém mikroskopu. Následoval průzkum předmětu pod stereo mikroskopem a vyhodnocení průzkumu. Veškeré navrhované techniky restaurování a konzervování předmětu vycházely z předchozího průzkumu materiálu a průzkumu památky. Důležitou součástí práce bylo zhotovování fotografické dokumentace před restaurováním, v určitém stupni rozpracovanosti a po restaurování. Po demontáži ciboria byly odstraněny korozní produkty stříbra v 5 % roztoku thiomocoviny a 5 % roztoku kyseliny sírové a korozní produkty mědi v 10 % roztoku kyseliny sírové a nanesením vídeňského vápna a mechanickými pohyby kartáčku s polymerními štětinami. Jako protikorozní ochrana byl aplikován organický povlak. Po kompletaci ciboria byl navržen ochranný režim památky.

Sekce : Technologie, konzervování a restaurování - kovy

Restaurování kordíku z 18. století

Autor: Bc. Adéla Dandová
Ročník: M1
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Jiří Děd, CSc.

Kordík z 2. poloviny 18. století, který sloužil jako doplněk důstojnické uniformy, byl restaurován pro výstavní účely. Součástí restaurování byla i náročná rekonstrukce poškozených či chybějících součástí kordíku. Detailním restaurátorským průzkumem s využitím optické i elektronové metalografické analýzy a elektronové mikroanalýzy byl zjištěn současný stav předmětu, jeho kompletnost, rozsah degradace a rovněž byly identifikovány materiály a výrobní technologie, použité při jeho zhotovení.

Vlastní restaurování pak představovalo odstranění korozních produktů a nečistot z původních částí kordíku mikrotryskem, jemnými smrkovými papíry a tužkou se skelnými vlákny. Současně byly odstraněny i zbytky cínové pájky z předchozích zásahů. Chybějící části záštity a záštitného listu včetně ozdobných fasetovaných nýtků a korálků byly doplněny podle zachovaných původních prvků. K obnovení zlacení leptaného dekoru bylo použito dukátové plátkové zlato, pokládané na mixtion.

Všechny železné části byly jednotlivě napuštěny lihovým roztokem taninu a po důkladném zaschnutí konzervovány voskem.



Sekce : Technologie, konzervování a restaurování - kovy

Restaurování dlouhé palné zbraně

Autor: Eva Festová
Ročník: B3
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Šárka Msallamová, Ing. Alena Michalcová

Cílem této práce bylo restaurovat a konzervovat předmět pro výstavní účely. Dále byla posouzena původnost restaurovaného předmětu a správnost jeho datace. Nejprve byl předmět detailně prozkoumán za využití metalografické analýzy a elektronové mikroanalýzy, kterými byly pozorovány odebrané vzorky kovu a také korozní produkty. Poté byla obnovena původní povrchová úprava a konzervace plastiky s ohledem na následné využití předmětu pro výstavní účely.



Sekce : Technologie, konzervování a restaurování - kovy

Restaurování litinového stolku

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

Cílem práce bylo restaurování a konzervace litinového stolku s ohledem na zachování pokovení niklem. Dle dostupných informací byl stůl datován na začátek 19. století. Složení materiálu bylo určeno na optickém emisním spektrometru, elektronovém rastrovacím mikroskopu a jeho struktura zkoumána na metalografickém výbrusu. Byl proveden průzkum celého předmětu, jeho vyhodnocení a navržen postup restaurování. Po odstranění korozních produktů byly doplněny chybějící části a odstraněny opravy provedené nekvalifikovaným způsobem. V poslední fázi byl předmět konzervován včelím voskem, zkompletován a byl navržen ochranný režim památky pro muzejní expozici.

Sekce : Technologie, konzervování a restaurování - kovy

Tříramenný lustr

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

Cílem práce bylo odstranění původní patiny, korozních produktů mědi, obnovení patiny po celém povrchu tříramenného mosazného lustru, nová elektroinstalace a konzervace. Předmět byl datován dle dostupných informací od majitele, materiálové složení a složení patiny bylo určeno analýzou na elektronovém rastrovacím mikroskopu a metalografickou analýzou, následoval průzkum předmětu a jeho vyhodnocení poté byl navržen postup restaurování. Po demontáži lustru byl odstraněn původní lak 10 % Alkonem S, k odstranění korozních produktů mědi a původní patiny byla použita 10-15 % roztok H_2SO_4 a mosazný kartáč. K obnovení patiny byl použit komerční přípravek Kolorgal 02, sjednocení patiny a její odstíny byly vytvořeny pomocí mosazného kartáče. Konzervace předmětu lakem PRIMA-RAL. Po kompletaci lustru a rozvodů nové elektroinstalace byl navržen ochranný režim památky vyhovující expozici tříramenného lustru v interiéru.

Sekce : Technologie, konzervování a restaurování - kovy

Kinetika vzniku akagenitu v korozních produktech železných vzorků

Autor: Lukáš Neufuss
Ročník: B2
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Šárka Msallamová

Byla zkoumána kinetika vzniku akagenitu. Železné vzorky byly nejprve umístěny do prostředí destilované vody po dobu jednoho týdne. Následně byly vyjmuty a vystaveny působení prostředí simulujícím mořskou a pitnou vodu. Byla připravena tři různá korozní prostředí. První reprezentující zvýšenou salinitu mořské vody 15 hm. % chloridových iontů, druhé s průměrnou mořskou salinitou 3,5 hm.% chloridových iontů. Třetí korozní prostředí simuluje sladkovodní prostředí s průměrným obsahem chloridů 0,7 hm.% chloridových iontů. Zdrojem chloridových iontů je NaCl. Prostředí pro vznik akagenitu bylo simulováno v klimatizační komoře. Výskyt akagenitu a ostatních korozních produktů byl určován disperzní Ramanovou spektroskopií.

Sekce : Technologie, konzervování a restaurování - kovy

Datování, restaurování a konzervace naběračky nalezené v oblasti Göteborgu (Švédsko)

Autor: Eliška Křečanová
Ročník: B3
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Šárka Msallamová

Cílem této práce bylo datovat, restaurovat a konzervovat postříbřenou mosaznou naběračku nalezenou u Göteborgu. Předmět byl datován pomocí katalogu vydaného UPM v Praze. Analýza korozních produktů, povrchové vrstvy a jádra kovu byla provedena elektronovým rastrovacím mikroskopem. Z hlediska rekonstrukce podoby předmětu byly provedeny tyto úkony: předmětu byl mechanicky navrácen původní tvar, korozní produkty byly odstraňovány postupně roztokem Chelatonu 3 za přispění mechanického čištění jemným kartáčkem, vodným roztokem thiomocoviny, kyseliny fosforečné a neionogenního tenzidu a nakonec expozicí v ultrazvukové pračce. Stabilizace byla provedena včelím voskem v benzínu. Byl navržen ochranný režim památky vyhovující expozici v interiéru.



Obr. 1: Stav předmětu po restaurování a konzervaci.

Sekce : Technologie, konzervování a restaurování - kovy

Restaurování a konzervování barokních cínových svícňů

Autor: Jana Munzarová
Ročník: B4
Ústav: Kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jiří Děd CSc.

Byly restaurovány dva lité cínové oltářní svícny z 18. století s různým rozsahem degradace původního materiálu. Chemické složení základního kovu a korozních produktů bylo stanoveno elektronovou mikroanalýzou. Pro zjištění, zda není druhý, silně poškozený svícen napaden cínovým morem, byly odebrané vzorky podrobeny i RTG difrakční analýze. Ta prokázala, že vysoká míra degradace podstavce svícnu je způsobena pouze korozním napadením.

U prvního, relativně zachovalého svícnu restaurování navrátilo předmětu plnou funkčnost, takže bude používán při církevních obřadech. Odstranění korozních produktů cínu bylo provedeno mechanicky a 5 % roztokem Chelatonu 3. Chybějící části byly odlity z cínu, patinovány a celý předmět byl konzervován včelím voskem rozpuštěným v benzínu.

Druhý svícen byl restaurováním připraven pro výstavní účely a použitá konzervace brání další degradaci zachovaných zbytků kovu. Prach a vosk ze svící byly z předmětu odstraňovány pomocí benzínu a mechanického čištění. Podstavec svícnu byl vakuově impregnován roztokem Paraloidu B72 v toluenu a pro zpevnění podlepen skelnou tkaninou. Roztokem Paraloidu B72 v toluenu byl konzervován i celý předmět. Lesklý povrch po lakování byl eliminován včelím voskem v benzínu. Železné části svícňů byly konzervovány tanátováním.

Sekce : Technologie, konzervování a restaurování - sklo, keramika, stavební materiály

Restaurování zásobnice z doby bronzové

Autor: Šárka Hejlová
Ročník: B4
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Alexandra Kloužková, Jana Malá (Muzeum Pardubice)

Předmětem práce bylo restaurování zásobnice ze starší doby bronzové, kultury únětické (2200 - 1600 př. n. l.). Místem nálezů bylo polokulturní naleziště v Mikulovicích (okr. Pardubice), tato lokalita byla trvale osídlena od mladší doby kamenné až po Germány v 5. století našeho letopočtu. V červnu 2008 byla lokalita zapsána do ústředního seznamu kulturních památek ČR. Zásobnice byla ve formě střepů. Střepy byly kvalitní, nelískovaly. Na střepích byly patrné čerstvé lomy. Vzhledem k mělkému uložení nádoby v zemi, byla narušena projíždějící mechanizací při stahování skřívky a k rozlomení střepů pak došlo při jejich vyjímání z terénu a mytí provádějící smluvní firmou. Po vyhledání střepů byla zásobnice slepena. Slepená zásobnice má dobrou pevnost a nehrozí, že by došlo k jejímu zborcení, proto nebyly chybějící střepy dosádrovány. Pro snížení procesu stárnutí keramického střepu této zásobnice je důležité dodržet podmínky uložení. Zásobnici se podařilo úspěšně zrestaurovat.



Obr. 1 - Stav po restaurování.

Sekce : Technologie, konzervování a restaurování - sklo, keramika, stavební materiály

Vliv solí na hydrofobizované materiály

Autor: Štěpánka Živná
Ročník: B3
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Doc. Ing. Petr Kotlík, CSc.



Vodorozpustné soli způsobují vážná poškození porézních stavebních materiálů. Vodoodpudivá úprava brání tvorbě výkvětů na povrch, ale krystalizace solí pod ošetřenou vrstvou vyvolává destrukci hmoty materiálu pod ošetřenou vrstvou. Práce porovnává, jak vybrané hydrofobní látky ovlivňují povrchovou destrukci pískovce a opuky účinkem roztoku chloridu nebo síranu sodného pronikajícího za ošetřenou vrstvou.

Obr. 1: Degradace opukového zkušebního tělíska bez povrchové úpravy vyvolaná působením síranu sodného

Sekce : Technologie, konzervování a restaurování - sklo, keramika, stavební materiály

Vlastnosti železitého tmelu pro kámen

Autor: Bc. Markéta Holubová
Ročník: M1
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Doc. Ing. Petr Kotlík, CSc.

Železitý tmel byl používán v průběhu 19. století. V literatuře byla nalezena řada receptur, které se vzájemně liší jmenovanými složkami a jejich hmotnostními poměry ve směsích železitého tmelu. U všech je samozřejmá přítomnost železného podílu, v mnoha recepturách byl zmiňován chlorid amonný, sirný květ, hlína a méně pak pálená sádra. Plastická hmota vznikala přidáním octa či vody.

Za účelem dobrat se alespoň dílčí odpovědi na otázku, proč železo tvořilo vedle těchto složek hlavní příměs tmelu aplikovaného v exteriéru historických budov, byla připravena série laboratorních vzorků lišící se svým složením a hmotnostními (příp. objemovými) poměry jmenovaných složek, ponechána stárnout a pečlivě sledována.

V centrálních laboratořích VŠCHT byly identifikovány ve vybraných vzorcích některé produkty reakcí vznikající za laboratorních podmínek a tyto byly porovnávány s výsledky stejných analýz originálních vzorků z Letohrádku královny Anny v Praze. Vzorky byly podrobeny rentgenové fluorescenční analýze (RFA) a rentgenové difrakční analýze (XRD). Při porovnání výsledků XRD analýzy historického tmelu s výsledky XRD analýzy laboratorních vzorků lze najít jistou shodu v přítomnosti některých fází.

Sekce : Technologie, konzervování a restaurování - sklo, keramika, stavební materiály

Restaurování nápojového skla z Chrudimi (15.-16. století)

Autor: Lenka Klikarová
Ročník: B4
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Dr. Ing. Dana Rohanová

V roce 2006 proběhl v Chrudimi (Hradební ulice) - na místě měšťanského domu záchranný archeologický výzkum Archeologického ústavu AV ČR pod vedením Dr. Jana Frolíka, CSc. Kromě keramiky a kovových předmětů bylo zde nalezeno cca 50 kg střepů skla. Skelné střepy se postupně zpracovávají čištěním (zbavením nánosů hlíny), tříděním, konzervací nebo - pokud to jejich stav umožňuje jejich restaurováním. V práci je představené již zrestaurované nápojové sklo z počátku 16. století. Stav skelných materiálů (stupeň jejich degradace a koroze) byl před restaurováním posouzen na tzv. neumístitelných úlomcích pomocí optické mikroskopie, RTG fluorescenční analýzy, DTA i RTG mikroanalýzy. Stav jednotlivých střepů byl velice rozdílný. V souboru se nalézalo jak sklo úplně zkorodované - na pohled matné, s oddělujícími se vrstvami nebo s tzv. důlkovou korozí tak sklo ve výborné kondici. Sklo beze známek nebo jen s velice malými stopami koroze (iridiscence povrchu) bylo po vyhledání jednotlivých střepů zrestaurováno (zmíněné nápojové sklo). Z porovnání výsledků RTG-F vidět disproporci ve složení skla - zkorodované má nízký obsah alkalických oxidů a na DTA je vidět vyšší obsah volně vázané vody. RTG mikroanalýza potvrdila, že se jedná o amorfní skelný materiál bez známek minerální fáze a tedy precipitace sekundárních korozních produktů.

Sekce : Technologie, konzervování a restaurování - sklo, keramika, stavební materiály

Vyšehradské dlaždice - stárnutí historického střepu

Autor: Petra Mírková
Ročník: B3
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Alexandra Kloužková CSc.

Práce se zabývá tzv. stárnutím historického keramického materiálu vlhkostní roztažností. Historická keramika má tendenci udržovat si rovnovážnou vlhkost, která se mění podle změny relativní vlhkosti a teploty vzduchu v prostředí, v kterém jsou uloženy. Tato vlhkost (je možné ji označit jako skladovací vlhkost), je do jisté míry závislá na mineralogickém složení střepu, především na podílu nekystalických nestabilních fází, které se vytvářejí při výpalu a jsou zdrojem stárnutí keramického střepu tohoto typu. Tato práce je zaměřena na stanovení nevratné vlhkostní roztažnosti historického pórovitého keramického materiálu. Jejím cílem je shrnout a ověřit metody, které se ke stanovení vlhkostní roztažnosti materiálu již používají a především se zaměřit na metody, které umožňují testovat i vzorky malých rozměrů.

Stanovení charakteristických parametrů historického střepu, chemického i mineralogického složení bylo provedeno na středověké vyšehradské dlaždici. Hodnocení vlhkostní roztažnosti bylo provedeno dilatometrickou metodou, která je v současné době vyvíjena ve spolupráci s Kloknerovým ústavem ČVUT.

Práce byla podpořena grantem GAČR 103/07/0182.

Sekce : Technologie, konzervování a restaurování - sklo, keramika, stavební materiály

Restaurování vápencových a mramorových sloupů

Autor: Bc. Linda Mišková
Ročník: M2
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Prof. Mariangela Vandini

V prezentaci bych ráda představila ucelený postup restaurování vápencových sloupů v ambitu kláštera sv. Františka v Ravenně, kterého jsem se zúčastnila v rámci praxe během studijního pobytu Erasmus. Sloupy jsou vystavené celoročnímu působení přímořské atmosféry a všudypřítomným holubům. Dále bylo při předchozích restaurátorských zásazích použito cementové malty a tmel. V rámci restaurování byly sloupy očištěny od korozních produktů nejprve chemicky (působením obkladu $(\text{NH}_4)_2\text{CO}_3$) a mechanicky (mikropískováním a dočištěny pneumatickými dlatky). Po doplnění chybějících částí byl proveden ochranný nátěr roztokem oraganosilikátů.

Sekce : Technologie, konzervování a restaurování - sklo, keramika, stavební materiály

Konzervace nepálených cihel

Autor: Bc. Adéla Peterová
Ročník: M1
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Kateřina Doubravová, Ph.D.

Práce je zaměřena na určení vhodného konsolidantu pro nepálenou cihlu. Vlastnosti použitých konsolidantů byly pozorovány na nedegradovaných a uměle degradovaných cihlách. Byla zjišťována odolnost proti vztlínající vodě, proti mechanickému poškození a rtuťová porozimetrie. Porovnávala jsem mezi sebou konsolidanty Porosil RZ, Porosil ZTS, PutzFestiger, CaLoSiL a vápennou vodu.

Z experimentálních dat jsem zjistila, že naprosto nevhodnými konsolidanty pro nepálené cihly jsou vápenná voda a CaLoSiL. Pro odolnost proti vodě je nejlepší použít konsolidant Porosil RZ. Poté PutzFestiger, cihly jím konsolidované odolávají vztlínající vodě, ale nejsou odolné dlouhodobým účinkům stojaté vody. Jisté zlepšení odolnosti cihel proti vodě se získá i s použitím konsolidantu Porosil ZTS. Na zvýšení odolnosti proti mechanickému poškození je vhodné použít konsolidant Porosil RZ aplikovaný vakuově, Porosil ZTS, Porosil RZ aplikovaný postřikem a nakonec PutzFestiger. Výše uvedené konsolidanty jsou seřazené podle klesající účinnosti.

Sekce : Technologie, konzervování a restaurování - sklo, keramika, stavební materiály

Vlastnosti vápenných malt s anorganickými přísadami – vliv granulometrie kameniva na pórovitost zatvrdlé malty

Autor: Bc. Zuzana Sehnoutková
Ročník: M1
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.

Práce se zaměřuje na problematiku vápenných malt jako druhu malt hojně používaných v minulosti při stavebních pracích, a tudíž preferovaný druh malt pro restaurátorskou činnost na historických objektech. Jelikož samotná vápenná malta má velmi malé pevnosti a není odolná vůči degradaci, je snaha vlastnosti těchto malt zlepšovat tak, aby vyhovovaly nárokům stavby i památkářů. Tato práce je zaměřena na modifikaci vápenné malty změnou granulometrie kameniva a zabývá se vlivy této změny na konečné vlastnosti malt, především na odolnost vůči krystalizujícím solím. Protože v reálném prostředí se mnohdy nedá zabránit vniknutí solí do omítky, zabývá se tato práce myšlenkou jak maltu co nejlépe „vybavit“, aby byla schopna odolat těmto krystalizačním a hydratačním tlakům, a tak nepoškozovala historický objekt. Základní myšlenka této práce je vytvoření větších pórů a celkově zvýšit pórovitost malty, tím vytvořit větší prostor pro krystalizaci a hydrataci solí, a tak omezit tlak na strukturu malty.

Sekce : Technologie, konzervování a restaurování - sklo, keramika, stavební materiály

Kopie sádrového odlitku

Autor: Bc. Monika Slavíková
Ročník: M2
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Kateřina Doubravová Ph.D.

Cílem práce bylo zhotovení kopie sádrového odlitku. Odlitek byl povrchově ošetřen, aby silikonová forma neulpěla. Forma byla vyrobena ze dvou typů silikonových kaučuků. Forma byla dodatečně zpevněna sádrovou skořepinou, aby se při odlévání kopie nedeformovala. Pro odlévání byla použita štukatérská sádra. Kopie byla vyztužena gázou z celulózy, aby měla vyšší pevnost. Sádrová kopie se povrchově ošetřila, aby mohla být vystavena v exteriéru.

Sekce : Technologie, konzervování a restaurování - sklo, keramika, stavební materiály

Restaurování keramického svícnu

Autor: Lucie Vágnerová
Ročník: B4
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Alexandra Kloužková, CSc., PhDr. Kateřina Klápšťová (Náprstkovo muzeum)

Předmětem práce bylo zrestaurování svícnu, který byl do Náprstkova muzea získán jako dar od mexické vlády. Svícen je spodobněn jako starozákonní motiv Adama a Evy stojících pod rajským stromem. Je malován pestrými anilinovými barvami – převládá temně fialová. Svícen se při manipulaci v depozitáři rozbil na několik kusů. Po vyhledání za pomoci fotografie z evidenční karty byl slepen a chybějící části byly dosádrovány. Cílem práce bylo, co nejvěrohodnější zrestaurování konečného tvaru svícnu. Neumístěné střepy byly využity k identifikaci chemického a mineralogického složení střepové hmoty.

Sekce : Technologie, konzervování a restaurování - sklo, keramika, stavební materiály

Restaurování tuhované mísy Bylanské kultury

Autor: Karolina Vítovcová
Ročník: B4
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Ing. Alexandra Kloužková CSc., Ljuba Svobodová (Archeologický ústav AV ČR)

Předmětem práce se stala mísa Bylanské kultury. Byla nalezena v částečně žárovém hrobu s bohatou pohřební výbavou. Nádobu byla z větší části zachována. Její povrch je z vnější stany tuhovaný. Na její rekonstrukci bylo použito lepidlo Sokrat 501 (PMMA). Nádobu byla slepena, dále byly doplněny chybějící střepy sádkou a tyto doplňky dobarveny temperovými barvami. Neumístěné střepy a zlomky odpadlého tuhování byly použity k analýzám, které vedly i identifikaci chemického a mineralogického složení střepové hmoty a povrchové vrstvy.

Sekce : Technologie, konzervování a restaurování - sklo, keramika, stavební materiály

Nepálené cihly - vlastnosti a degradace

Autor: Bc. Petra Zemenová
Ročník: M1
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Kateřina Doubravová, Ph.D.

Cílem práce bylo porovnat vlastnosti a odolnost vůči degradaci u pěti druhů nepálených cihel. Pro přípravu vzorků byla použita komerční směs pro výrobu hliněných omítek a čtyři vlastní směsi o poměru pojiva k plnivu 1:3. Byly připraveny čtyři druhy vlastních směsí, a to směs nemodifikovaná, modifikovaná vápenným hydrátem, řezankou nebo řezankou s ječmennou vodou.

U připravených vzorků nepálených cihel byla stanovena smrštitelnost, objemová hmotnost, pevnost v tlaku, rovnovážná vlhkost, odolnost proti vztlínání vody a odolnost proti krystalizaci soli.

Sekce : Technologie, konzervování a restaurování - textil, papír

Možnosti využití butoxyetanolu a lékařského benzínu pro odstraňování mastných skvrn z papíru

Autor: Bc. Lenka Bartlová
Ročník: M2
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Irena Kučerová, Ph.D., Ing. Hana Paulusová (Národní archiv)

Konzervátor papíru bývá často postaven před úkol odstranit z papírové podložky skvrny různého původu. Mezi nejproblematictější patří skvrny mastné, jejichž odstranitelnost značně závisí na jejich složení i stáří.

V této práci byla testována účinnost odstraňování olejových skvrn z papíru pomocí vybraných rozpouštědel. Byly použity oleje rostlinného původu po umělém stárnutí a to lněný olej (vysychavý), makový olej (polovysychavý) a olej olivový (nevysychavý). Extrakce olejů byla prováděna butoxyetanolem (etylenglykolmonobutyléter) a lékařským benzinem (směs hexanu a jeho izomerů). Její účinnost byla ověřována gravimetricky, stanovením opacity (neprůsvitnosti) a celkové barevné změny vzorků a pomocí infračervené spektroskopie.

Dále byl ověřován vliv butoxyetanolu a lékařského benzínu na vlastnosti papíru. Část vzorků byla ponechána bez ošetření a ostatní vzorky papíru byly ponořeny po dobu 4 hodin do lékařského benzínu resp. do butoxyetanolu. Poté byla část vzorků podrobena umělému stárnutí ve vlhké resp. v suché atmosféře a zbývající vzorky byly ponechány nestárnuty. U vzorků byly sledovány optické vlastnosti (celková barevná změna), mechanické vlastnosti (odolnost v přehýbání, tržné zatížení a tažnost) a chemické vlastnosti papíru (pH studeného výluhu).

Sekce : Technologie, konzervování a restaurování - textil, papír

Chemicko-technologický průzkum makety historického dortu

Autor: Bc. Marie Benešová
Ročník: M1
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Martina Ohlídálová, Doc. Petr Kotlík

Průzkum makety historického dortu se skládá z materiálového průzkumu, průzkumu techniky výroby makety dortu a vyhodnocení stavu jeho poškození. Analytickými metodami bylo studováno složení hlavní hmoty korpusu dortu, hmoty použité na vytvarování jednotlivých figurálních a rostlinných ozdob a složení použitých pigmentů a barviv. Na základě získaných výsledků bylo zvoleno odpovídající složení hmoty makety dortu, podle kterého byly připraveny modelové vzorky. Tyto vzorky byly podrobeny urychlenému stárnutí a poté konsolidovány různými typy konsolidačních látek. Takto zpevněné vzorky byly opět urychleně stárnuty a poté u nich byly vyhodnoceny změny barevnosti, lesku a pevnosti. Na základě těchto výsledků a průzkumu dortu byl vypracován návrh na konzervování a restaurování makety historického dortu s doporučením nejvhodnějšího konsolidantu a vhodných podmínek uložení.

Sekce : Technologie, konzervování a restaurování - textil, papír

Restaurování barokní kasule

Autor: Ing. Jindřiška Droženová
Ročník: B3
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Markéta Škrdlantová, PhD.

Restaurování barokní kasule basovitého tvaru s dvěma druhy žakárských hedvábných tkanin s rostlinnými vzory, zdobené portami, celoplošně vyztužené hrubým lněným plátnem a vypodšívkované jemným lněným plátnem. Kasule je znečištěna prachovými nečistotami a skvrnami neznámého původu. Přední díl je v podstatně horším stavu, než díl zadní. Na lícové straně hedvábných tkanin jsou patrné barevné změny. V minulosti již byly učiněny pokusy o restaurování, resp. opravu kasule. Krajní pásy předního dílu jsou z větší části lepené k výztuži, a cca na $\frac{1}{3}$ pravého pásu předního dílu je půda hedvábí podlepená bílým hedvábným papírem. Přilepené části hedvábí jsou popraskané, ztvrdlé, zkroucené a místy odstávající. Střední pás má v atlasové části množství flotujících nití a ve středu předního dílu trhliny. Vzor se ztrácí, barevné útky, které jsou dobře patrné na rubové straně jsou na lícové straně viditelné jen zcela sporadicky. V pravé části předního dílu je chybějící část porty nahrazena přilepenou papírovou páskou zelenozlaté barvy. Byla provedena dokumentace, demontáž, textilně technologický a materiálový průzkum, zkouška stálobarevnosti, praní, fixace hedvábí spodní skeletáží k novému hedvábnému materiálu, zafixování flotujících nití, překrytí krepelínou, náhrada chybějící porty, zpětná montáž všech částí a dílů, zhotovení ramínka a ušití textilního obalu.



Obr. 1: Stav před restaurováním.

Sekce : Technologie, konzervování a restaurování - textil, papír

Vliv viditelného světla na vlastnosti dřevitých papírů

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

Práce navazuje na grantový úkol Vliv světla a Ultrafialového záření na archivní dokumenty zpracovaný v Národním archivu v Praze v roce 2001. Je vypracována za účelem prohloubit poznatky o chování dřevitého papíru, který je vystaven světelnému záření, a to jak přímo po ozařování, tak i chování papíru při jeho dlouhodobém uložení ve tmě. Výzkum byl zaměřen na vliv modrého světla na vlastnosti dřevitých papírů a jejich vzájemné srovnání. Papíry vyrobené ze dvou typů buničin byly ozařovány v osvitové komoře v Národním archivu v Praze za přesně definovaných podmínek. Byly měřeny vybrané vlastnosti papírů, u kterých se předpokládaly výrazné změny a které mohou objasnit mechanismus degradačních reakcí nebo příčiny žloutnutí až hnědnutí. Z výsledků měření vyplývají rozdíly mezi jednotlivými druhy buničin, které jsou způsobeny odlišným chemickým složením ligninů v listnatém a jehličnatém dřevu a různým způsobem výroby buničin. Dochází ke změnám v barevnosti buničin a k posunu hodnoty pH do kyselější oblasti, především pak u papíru s obsahem jehličnatého dřeva.

Sekce : Technologie, konzervování a restaurování - textil, papír

Vliv vakuového balení na vlastnosti novinového papíru

Autor: Bc. Šárka Jonášová, DiS.
Ročník: M1
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Petra Vávrová, Ing. Martina Ohlídálová

Práce je zaměřena na problematiku vakuového balení jako jedné z možností ochrany papírových dokumentů před degradačními vlivy. Předměty tvořící knihovní sbírky jsou tvořeny z široké škály materiálů, kterým dominují hlavně papír, pergamen, useň, dřevo a další. Jedná se obecně o organické materiály, které podléhají degradaci, pokud nejsou dodržovány optimální podmínky jejich uložení. Doposud se noviny a periodika, moderní materiály vyrobené z dřevitých papírů ukládají do krabic z nekyselé lepenky. Tento způsob uložení dostatečně chrání archiválie před prachem, mechanickým poškozením a přímým světlem. Ale tento způsob uložení nechrání archiválie před vzdušnými polutanty a před působením mikroorganismů. Dále tento způsob uložení nebrání plynulému oxidačnímu mechanismu. Vakuové balení do speciálních fólií by mělo zabránit průniku kyslíku a vlhkosti dovnitř k uloženým archiváliím. Cílem práce je zkoumat fólie a zabalený novinový papír a vliv umělého stárnutí na tyto materiály. Závěrem by mělo být buď doporučení nebo nedoporučení do praxe.

Sekce : Technologie, konzervování a restaurování - textil, papír

Restaurování šátku s brošovanými květy

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

Předmětem této práce je restaurování šátku z vlastivědného muzea Dr. Hostaše v Klatovech. Na základě provedeného textilně-technologického průzkumu byl navržen postup restaurování. Cílem bylo šátek vyčistit, nesoudržnou tkaninu zpevnit (podložením a skeletováním) a tím zabránit jejímu dalšímu poškození.



Obr. 1: Stav šátku po restaurování.



Obr. 2: Detail šátku po restaurování.

Sekce : Technologie, konzervování a restaurování - textil, papír

Vliv modifikací procesu přípravy albuminové fotografie na stabilitu a kvalitu fotografie

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

Tato práce se zabývá vlivem modifikací procesu přípravy albuminové fotografie na její stabilitu a kvalitu. Za prvé byl sledován vliv použité receptury albuminového roztoku na výslednou barevnost fotografie a na její stabilitu a dále vliv zvolené papírové podložky na stabilitu a rovnoměrnost vzniku obrazu. Papírová podložka byla vždy potažena dvěma vrstvami albuminu. Takto zhotovené fotografie byly podrobeny umělému stárnutí suchým teplem (12 dní při teplotě 105 °C). U stárnutých fotografií byla sledována změna hodnot pH a barevná stálost obrazu. Změny barevnosti obrazu byly vyhodnoceny pomocí barevného prostoru CIE Lab.

Z proběhlého experimentu bylo zjištěno, že nejstabilnější variantou modifikace albuminového procesu je použití albuminového roztoku obsahujícího chloridové a bromidové anionty, nanášeného na hedvábný papír. Jednotlivé druhy albuminů se pak liší významně pouze v barevném odstínu.

Sekce : Technologie, konzervování a restaurování - textil, papír

Mikroskopický průzkum barokního textilu z krypty kostela sv. Mikuláše ve Znojmě

Autor: Bc. Petra Šenkyplová
Ročník: M1
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.

Při záchranných pracích v kostele sv. Mikuláše ve Znojmě, v porušené severní kapli, byly nalezeny zbytky hrobu. Z narušeného hrobu byly vyzvednuty zbytky lidských kostí, textil, useň, keramika, sklo a malta, železné hřeby, některé se zbytky dřeva, a dřevo (pravděpodobně z rakve).

Předmětem této práce je textilně-technologický průzkum nalezené textilie a na základě něho doporučení konzervace a podmínek uložení.

Sekce : Technologie, konzervování a restaurování - textil, papír

Možnosti suchého čištění historických textilií

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

Tématem práce bylo prozkoumání nového způsobu suchého čištění historických textilních materiálů a to pomocí perličkové celulózy (prostředek PERLOZA). Pro průzkum byly vybrány tři v historii výroby textilu nejčastěji používané druhy přírodních vláken, a to bavlna, vlna a přírodní hedvábí. Zkoumána byla především odstranitelnost čistícího prostředku z různých struktur tkanin, míra schopnosti čištění a případné nežádoucí účinky čistícího prostředku na textilní materiál z hlediska možné degradace.

Sekce : Technologie, konzervování a restaurování - textil, papír

Čištění papíru pomocí přírodních saponinů

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

Práce se zabývá možnostmi čištění papíru s využitím přírodních saponinů. Saponiny jsou přírodní látky, které řadíme mezi neionogenní tenzidy. Práce navazuje a vychází z diplomové práce na Ústavu chemické technologie restaurování památek VŠCHT Praha, která se zabývá využitím tenzidů v konzervátorské praxi. Jako zdroj saponinů se použil kořen z Mydlice lékařské a listy z Břečťanu popínavého.

Sekce : Technologie, konzervování a restaurování - textil, papír

Restaurování textilního sáčku s korálky

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

Cílem mé semestrální práce bylo kompletní restaurování textilního sáčku zdobeného drobnými různě barevnými skleněnými korálky. Předmět byl zapůjčen ze sbírek Vlastivědného muzea Dr. Hostaše v Klatovech, a jeho rozměry jsou 20,5 x 18 cm.

Restaurátorský zásah zahrnoval dokumentaci a chemicko-technologické rozbory (vazebný rozbor materiálu, identifikace vláken, zkouška stálobarevnosti materiálu, analýza korálků). Na základě zjištěných výsledků byl stanoven následný postup práce: demontáž sáčku; čištění jednotlivých dílů; výběr a příprava pomocných materiálů; vlastní restaurování pleteniny – podložení tylem, zajištění trhlin a uvolněných korálků, podšívky – celkové podložení a šitá skeletáž; zpětná montáž. Samozřejmě byla průběžná a závěrečná fotodokumentace a vypracování restaurátorské zprávy.



Obr. 1: Přední strana sáčku, stav před restaurováním.