

Seznam sekcí a složení komisí

- Sekce: **Anorganická chemie**
posluchárna A211, 9:00 hod.
- Komise:
Předseda: Doc. Dr. Ing. David Sedmidubský
Členové: Ing. David Petrádes Ph.D. (Preciosa)
Dr. RNDr. Karel Knížek (FzÚ AV ČR v.v.i.)
Ing. Jiří Domlátil
Ing. Irena Hoskovcová, CSc. (organizační tajemník)
- Sekce: **Anorganická technologie I**
budova A, místnost č.32, 9:00 hod.
- Komise:
Předseda: Doc. Dr. Ing. Josef Krýsa
Členové: Ing. Ivona Sedlářová
Ing. Roman Kodým
Ing. Vladimír Navara
Ing. Miloslav Lhotka, Ph.D. (organizační tajemník)
- Sekce: **Anorganická technologie II**
budova A, místnost č.25, 9:00 hod.
- Komise:
Předseda: Doc. Ing. Daria Schrötterová, CSc. - předseda
Ing. Petra Novotná
Ing. Martin Paidar, Ph.D.
Dr. Ing. Vlastimil Fíla
Ing. David Gabriš
- Sekce: **Kovové materiály I (plakátová)**
budova A, 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.
Doc. Ing. Luděk Joska, CSc.
Ing. Nguyen Hong Vu, Ph.D.
Ing. Jan Šerák, Ph.D. (organizační tajemník)
- Sekce: **Kovové materiály II (plakátová)**
budova A, hlavní chodba ústavu 106, 8.30 hod.
- Komise:
Předseda: Prof. Ing. Pavel Lejček, DrSc.
Členové: Doc. Dr. Ing. Dalibor Vojtěch
Ing. Pavel Novák, Ph.D.
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: Doc. Ing. Václav Hulínský, CSc.
Ing. Antonín Lisý, CSc.

Prof. Ing. Lubomír Němec, DrSc.
Ing. Eva Gregorová, CSc. (organizační tajemník)

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

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Stanislav Kasa, CSc.

Členové: Ing. Miroslav Rada, CSc.
Doc. Ing. Jaroslav Kutzendörfer, CSc.
Doc. Dr. Dipl.-Min. Willi Pabst
Ing. Alexandra Kloužková, CSc.

Sekce: **Organická chemie IA (magisterská)
budova A, místnost 250, 9:00 hod.
vyhlášení výsledků Laboratoř A (N08), 12:15 hod.**

Komise:

Předseda: Doc. Ing. František Hampl, CSc.

Členové: Prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.
Mgr. Tomáš Kraus, Ph.D. (ÚOCHB AV ČR)
Ing. Jan Budka, Ph.D. (organizační tajemník)
Ing. Miroslav Špaček, MBA (Cayman Pharma)
Ing. Hanuš Slavík (Hexion)
Dr. Ing. Markéta Čechová (Lach-Ner)

Sekce: **Organická chemie IB (magisterská)
budova A, místnost 278c, 9:00 hod.
vyhlášení výsledků Laboratoř A (N08), 12:15 hod.**

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Igor Linhart, CSc.

Členové: Prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.
Dr. Ing. Jana Hodačová
Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D. (organizační tajemník)
Ing. Rudolf Smrž, CSc. (Synthon)
Ing. Ivan Veselý, CSc. (Cayman Pharma)
Ing. Václav Šťastný, Ph.D. (Re&D VÚFB)

Sekce: **Organická chemie II (bakalářská)
budova A, místnost 278e, 9:00 hod.
vyhlášení výsledků Laboratoř A (N08), 12:15 hod.**

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Členové: Ing. Václav Kozmík, CSc.
Ing. Tomáš Martinů, Ph.D.
Ing. Bc. Michal Himl (organizační tajemník)
Ing. Martin Káš (Synthon)
Mgr. Vojtěch Balšánek, Ph.D. (Re&D VÚFB)
Ing. Václav Kříž (Atotech)

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

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Bohumír Dvořák, CSc.

Členové: Ing. Pavel Čapek, CSc.
Ing. Ladislav Kurc, CSc.

Ing. Martin Drobek
Ing. Eliška Leitmannová, Ph.D. (organizační tajemník)

Sekce: **Organická technologie II**
posluchárna A081a, 9:00 hod.

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Vratislav Tukač, CSc.

Členové: Doc. Dr. Ing. Petr Klusůň

Ing. Jiří Trejbal, Ph.D.

Ing. Lucie Potucká

Ing. Miroslav Petrisko, CSc. (organizační tajemník)

Sekce: **Chemie a technologie polymerů (plakátová)**
budova B, posluchárna B06, 9:00 hod.

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Petr Hron, CSc.

Členové: Doc. Ing. Irena Prokopová, CSc.

Doc. Ing. Jiří Brožek, CSc.

Doc. Ing. Antonín Kuta, CSc.

Ing. Zdeněk Hrdlička, Ph.D. (organizační tajemník)

Sekce: **Materiálové inženýrství**
budova B, studovna Ústavu inženýrství pevných látek
(č. B360), 9:00 hod.

Komise:

Předseda: Prof. Ing. Jindřich Leitner, DrSc.

Členové: Doc. Ing. Petr Macháček, CSc.

Ing. Barbora Doušová, CSc.

Doc. Ing. František Kovanda, CSc.

Ing. Petr Slepíčka (organizační tajemník)

Sekce: **Konzervování a restaurování památek**
budova A, 2. patro u schodiště k „Miláčkovi“
(mezi dveřmi č. A226 – A228), 12:30 hod.

Sekce: **Chemická technologie restaurování památek**
budova A, 2. patro u schodiště k „Miláčkovi“
(mezi dveřmi č. A226 – A228), 15:00 hod.

Komise:

Předseda: Prof. Ing. Pavel Novák, CSc.

Místopředseda:

Doc. Ing. Petr Kotlík, CSc.

Členové: Dr. Ing. Michal Ďurovič (Národní archiv v Praze)

Ing. Šárka Msallamová

Ivan Houska (restaurátor)

Ing. Alexandra Kloužková

Ing. Kateřina Doubravová, Ph.D.

Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.

Ing. Petra Vávrová (organizační tajemník)

Sekce: **Informatika a chemie**
budova B, místnost BS2, 9:00 hod.

Komise:

Předseda: Doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

Členové: PhDr. Anna Součková
Ing. Miloslav Nič, Ph.D.
Mgr. Daniel Svozil, Ph.D.
Ing. Jiří Jirát, Ph.D. (organizační tajemník)

Sekce: **Výroba, analýza a využití léčiv**
posluchárna A31, 9.00 hod.

Komise:

Předseda: Prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc.

Členové: Doc. Ing. Josef Hájíček, CSc. (ZENTIVA a.s.)
Dr. Ing. Michal Hušák
Ing. Petr Kačer, Ph.D.
Doc. Ing. Petr Zámotný, Ph.D. (organizační tajemník)

Sekce: Anorganická chemie

Experimentální a teoretické studium vlastností aminokarbenových komplexů Cr a Fe

Autor: Radka Zvěřinová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav anorganické chemie
Školitel: Ing. Irena Hoskovicová, CSc., Ing. Stanislav Zális, CSc. (ÚFCH-JH AV ČR)

Byly studovány skupiny komplexů železa a chromu v oxidačních stavech 0, nesoucích různě substituované aminokarbenové ligandy, z nichž některé mají na postranním řetězci dvojnou vazbu schopnou tvorby chelátu, zbývající místa jsou vždy obsazena karbonylovými ligandy.

Cílem bylo srovnat vlastnosti komplexů zjištěné experimentálně (potenciály oxidace a redukce, spektra UV-VIS a IČ) s vlastnostmi teoreticky určenými (symetrií a energií hraničních molekulových orbitalů, UV-VIS a IČ spektry). Právě symetrie a energie hraničních molekulových orbitalů významně ovlivňuje reaktivitu molekul.

Výpočty elektronové struktury, vibračních frekvencí a UV-VIS spekter studovaných komplexů byly provedeny pomocí DFT (density - functional theory) metod s využitím programů Gaussian 03. Pro atomy H, C, Fe a Cr byl použit hybridní funkcionál B3LYP.

Trend, který vykazují hodnoty oxidačních a redukčních potenciálů změřených elektrochemicky, souhlasí s trendem vypočtených hodnot energií hraničních molekulových orbitalů. IČ spektra vypočtená i změřená mají v rámci téže skupiny komplexů velmi malé odlišnosti, větší rozdíly byly nalezeny při srovnání skupin chelatovaných a nechelatovaných komplexů. Změřená i vypočtená UV-VIS spektra jednotlivých komplexů vykazují srovnatelné trendy.

Sekce: Anorganická chemie

Vliv substituce Ba za Sr na vlastnosti supravodivého systému Bi – Sr – Ca – Cu – O

Autor: Tomáš Gruber
Ročník: 5.
Ústav: Ústav anorganické chemie
Školitel: Doc. Ing. Dagmar Sýkorová CSc., Ing. Vít Jakeš

Vlastnosti supravodičů závisí jak na složení, tak na struktuře. V této práci je studován vliv změny složení na vlastnosti supravodiče. Předpokladem byla hypotéza, že náhrada některých atomů ve struktuře za atomy větší ze stejné podskupiny povede ke zvýšení pnutí v mřížce, čímž by měly být ovlivněny transportní vlastnosti supravodiče.

Cílem práce bylo zjistit, jak se změní kritická teplota, kritická proudová hustota a poměr množství jednotlivých fází v supravodivém systému Bi – Sr – Ca – Cu – O, pokud v něm provedeme částečnou substituci stroncia baryem. Vzorky supravodičů o stechiometrickém složení $\text{Bi}_{1,6}\text{Pb}_{0,4}\text{Sr}_{2-x}\text{Ca}_{2,5}\text{Ba}_x\text{Cu}_{3,5}\text{O}_8$, kde $x = 0; 0,1; 0,2; 0,3; 0,4; 0,5; 0,6$ byly připraveny standardní reakcí v pevné fázi (technologický postup – mletí 10 min, kalcinace při teplotě 800°C po dobu 24 hodin, mletí 10 min, kalcinace při teplotě 800°C po dobu 24 hodin, mletí 10 min, lisování tablet 30 sekund při tlaku 800 MPa a slinování tablet při 840°C po dobu 168 hodin). U takto připravených vzorků byla naměřena teplotní závislost elektrického odporu a kritická proudová hustota. Fázové složení vzorků bylo určeno RTG fázovou analýzou, z níž bylo zjištěno, že množství Ba do hodnoty $x=0,4$ podporuje vznik supravodivé fáze Bi-2223 na úkor fáze Bi-2212. Při hodnotě $x = 0,1$ také došlo k nárůstu kritické proudové hustoty.

Sekce: Anorganická chemie

Vliv přítomnosti oxidů molybdenu a wolframu na světelnou a tepelnou degradaci stabilizovaných směsí PVC

Jméno: Štěpán Huber
Ročník: 5.
Ústav: Ústav anorganické chemie
Školitel: Ing. Libor Mastný, CSc.

PVC je jedním z nejpoužívanějších polymerů nejen v průmyslu. Tento polymer se často modifikuje různými aditivy. Ty mají vliv na užité vlastnosti polymeru nebo při jeho zpracování, mohou však mít i negativní vliv na stabilitu polymerní matrice.

V práci byl sledován vliv přísadky některých oxidů na tepelnou a světelnou degradaci stabilizovaných směsí PVC. Do stabilizované směsi PVC byly přidány MoO_3 , užívaný jako retardátor hoření, WO_3 užívaný jako pigment a jejich směs. Jako standardy byly použity vzorky stabilizované směsi PVC obsahující titanovou bělobu v modifikaci anatas a vzorek stabilizované směsi PVC bez přísadky dalšího aditiva.

Světelné namáhání bylo simulováno umělým povětrnostním stárnutím Florida testem na přístroji Q-Sun. Na statické tepelné namáhání při 180°C byl použit přístroj Tester.

Zbytková tepelná stabilita byla zjišťována množstvím uvolněného HCl při dehydrochloraci jak původních vzorků stabilizovaného PVC, tak i vzorků světelně exponovaných. Světelná stabilita byla zjišťována měřením změn optických parametrů na přístroji ColorQuest XE.

Z výsledků vyplývá, že přísadky oxidů ovlivňují tepelnou i světelnou stabilitu směsí PVC.

Sekce: Anorganická chemie

Spektroskopické sledování reakce Fe(III) s chelatujícími ligandy

Autor: Hana Kvapilová, Radka Metelková
Ročník: 2.
Ústav: Ústav anorganické chemie
Školitel: Ing. Irena Hoskocová, CSc.

Komplexní sloučeniny Fe(III) s objemnými více vaznými ligandy jsou důležitou součástí živých systémů. Při modelování těchto látek za použití jednodušších ligandů narážíme na častou tvorbu vícejaderných můstkových komplexů Fe(III) , které již jako modely přírodních látek nejsou použitelné a jejich přesná charakterizace je obtížná.

Studovaly jsme reakci Fe(III) se dvěma ligandy: N-(2-hydroxybenzyl)glycin a N-(2-hydroxybenzyl)isoleucin v methanolu. Za shodných podmínek byly již dříve syntetizovány látky, které byly oligomerní a které obsahovaly kov a ligand v proměnlivém poměru 1:1,4 až 1:2. K reakci kovu s ligandem dochází okamžitě po smíšení roztoků a vzniklý komplex je výrazně zbarvený, proto bylo možno studovat jeho stechiometrii sledováním intenzity absorpčního pásu v oblasti kolem 550 nm. Bylo zjištěno, že stechiometrie chromoforu závisí na tom, zda přidáváme zvyšující se množství ligandu do roztoku o stálé koncentraci Fe(III) , nebo do roztoku ligandu neměnné koncentrace přidáváme proměnlivé množství roztoku Fe(III) . Důvodem zjištěného chování může být proměnlivá denticita ligandu v závislosti na reakčních podmínkách.

Předložená studie byla zamýšlena jako východisko pro práci na syntéze komplexů Fe(III) s definovaným počtem kovových center.

Sekce: Anorganická chemie

Sledování vlivu fotokatalyzátoru na tepelnou a světelnou stabilitu PVC matrice

Autor: Ondřej Novotný
Ročník: 3.
Ústav: Ústav anorganické chemie
Školitel: Ing. Libor Mastný, CSc.

PVC je stále jedním z nejpoužívanějších plastů. Je široce rozšířen napříč mnoha průmyslovými odvětvími. Při vystavení světelnému záření a vysokým teplotám však podléhá degradaci, která se projevuje odštěpováním chlorovodíku. Dehydrochlorací se vytvářejí konjugované dvojné vazby, a to způsobuje změny barvy polymeru. Proto se do PVC přidávají tepelné a světelné stabilizátory, látky přímo potlačující odštěpování HCl. Odlišným způsobem se chová oxid titaničitý (TiO_2), bílý anorganický pigment. Díky své vysoké krycí schopnosti maskuje barevné změny. Na druhou stranu fotokatalytické schopnosti některých forem oxidu titaničitého při tepelném a světelném namáhání mohou napomoci k degradaci polymerní matrice.

Sledovali jsme vliv různě povrchově upraveného oxidu titaničitého v modifikaci anatas na světelnou a tepelnou stabilitu PVC. Použity byly 3 vzorky různě povrchově upraveného anatasu, dále 2 vzorky pro porovnání - anatas bez povrchové úpravy a stabilizované PVC bez TiO_2 . Anatas byl zapracován do neměkčeného stabilizovaného PVC. Následně byly PVC fólie vystaveny světelné a tepelné zátěži. Míra jejich degradace při byla sledována na základě měření optických změn v barevném prostoru $\text{CIEL}^*a^*b^*$ spektrofotometrem ColorQuest XE. Byl prokázán vliv jednotlivých povrchových úprav anatasu na světelnou a tepelnou stabilitu PVC.

Sekce: Anorganická chemie

Příprava rutilových zárodků za zvýšeného tlaku

Autor: Marek Ostrčil
Ročník: 3.
Ústav: Ústav anorganické chemie
Školitel: Ing. Zlatko Šrank, CSc.

Oxid titaničitý se v dnešní době používá především jako pigment – titanová běloba. Ta se vyrábí ve dvou krystalografických modifikacích kalcinací hydratovaného oxidu titaničitého. Při nižší teplotě vzniká anatas, při vyšší pak rutil. Vyšší teplota kalcinace však negativně ovlivňuje pigmentové vlastnosti titanových bělob rutilového typu. Proto se, za účelem snížení kalcinační teploty, přidávají rutilové zárodky.

Cílem mé práce bylo připravit rutilové zárodky za zvýšeného tlaku, které by mohly být aktivnější než dnes průmyslově vyráběné. To by umožňovalo při stávajících teplotách snížit množství přidávaných zárodků, nebo při stávajícím množství snížit kalcinační teploty.

Příprava zárodků spočívala v reakci anatasové pasty v autoklávu s NaOH a poté s HCl za různých experimentálních podmínek. Získané zárodky jsem použil k přípravě několika řad kalcinátů oxidu titaničitého. Řady se lišily použitými zárodky a kalcináty v dané řadě se lišily cílovou teplotou jejich tepelného zpracování. Aktivita mnou připravených zárodků byla posuzována a porovnávána s průmyslově vyráběnými zárodky. Kritériem byl obsah anatasu a rutilu ve vzorcích připravených při stejné cílové teplotě. Podrobnější výsledky jsou uvedeny v prezentaci a současně jsou vstupními daty pro další experimenty.

Sekce: Anorganická chemie

Depozice a charakterizace magneticky dopovaných polovodičů $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{N}$

Autor: Rudolf Souček
Ročník: 5.
Ústav: Ústav anorganické chemie
Školitel: Prof. Dr. Ing. David Sedmidubský

Spintronika je nový obor založený na využití spinu elektronu při přenosu a uchování informace. $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{N}$ patří do skupiny magneticky dopovaných polovodičů se spinově polarizovanými nositeli náboje, které mají značný aplikační potenciál v oboru spintroniky z důvodu kombinace relativně vysoké hodnoty Curiovy teploty a polovodivých vlastností. Výzkum těchto materiálů by měl otevřít cestu k vývoji rychlejších, úspornějších a menších elektronických prvků.

Práce je zaměřena na vyhodnocení vlastností tenkých vrstev $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{N}$ připravených metodou MOVPE na safírových substrátech a následně též na porovnání vlastností vrstev připravených se subvrstvou čistého GaN a bez ní. Rozměry a morfologie byly získány s využitím SEM, AFM a optické mikroskopie s Normanskiho kontrastem. Vlastnosti vrstev byly posuzovány z hlediska obsahu Mn a jeho vlivu na magnetické vlastnosti. Magnetické vlastnosti byly měřeny na SQUIDovém magnetometru. Byla také provedena transportní měření Hallova jevu a měrného odporu. Experimentální část je doplněna termodynamickou analýzou rozpustnosti Mn v GaN za podmínek depozice.

Sekce: Anorganická chemie

Příprava směsného oxidu $\text{Ca}_{1,5}\text{Sr}_{0,5}\text{CuO}_3$

Autor: Pavol Zvonček
Ročník: 3.
Ústav: Ústav anorganické chemie
Školitel: Ing. Kateřina Rubešová, Ph.D.

Směsné oxidy Ca/Sr a Cu jsou sekundárními fázemi při přípravě vysokoteplotních bizmutových supravodičů. Kuprát složení $(\text{Ca},\text{Sr})_2\text{CuO}_3$ je navíc meziproduktem při vzniku fáze Bi-2223 reakcí v pevné fázi (spolu s Bi-2212 a Ca_2PbO_4). Tato práce se zaměřila na přípravu oxidu složení $\text{Ca}_{1,5}\text{Sr}_{0,5}\text{CuO}_3$ jako materiálu pro další použití v postupných přípravách fáze Bi-2223.

Byly zvoleny dva postupy přípravy – reakce v pevné fázi a jedna z metod sol-gel. Výchozími látkami pro první postup byly uhličitany vápenatý a strontnatý a oxid měďnatý, jež byly po homogenizaci dvakrát kalcinovány při 800°C. Poté následovalo žhání materiálu při 900°C/3 dny s tím, že byly použity dva režimy závěrečného chlazení na laboratorní teplotu. Pro sol-gel přípravu byla vybrána metoda „Pechiniho polyesterifikace“: CaCO_3 , SrCO_3 a $\text{CuCO}_3 \cdot \text{Cu}(\text{OH})_2$ byly rozpuštěny v konc. roztoku kyseliny citronové a zahřívány na 80°C. Po okyselení byl přidán ethylenglykol a teplota byla zvýšena na 120°C pro zahájení polyesterifikace. Získaný gel byl tepelně zpracován postupně při 250°C, 500°C a 800°C. Poté následovala reakce v pevné fázi při 950°C stejně jako u prvního postupu, včetně dvou režimů chlazení.

Získané vzorky byly charakterizovány RTG fázovou analýzou, některé pak byly dále podrobeny Ramanově spektroskopii

Sekce: Anorganická technologie

Nitrate reduction in solutions produced during redevelopment of area damaged by mine activity

Autor: Jens Buechsenschuetz
Ročník: 3.
Ústav: Department of Inorganic Technology, ICT Prague
University of Applied Sciences Leipzig
Školitel: Ing. Martin Paidar, Ph.D.

To make solutions produced during redevelopment of area damaged by mine activity compatible for the environment it is necessary to decrease their concentration of nitrate to 100 mg/l and below. One of the suitable techniques to achieve this goal is the electrochemical reduction of nitrate to ammonia with subsequent ammonia stripping step.

As in the present case the process of cleaning consists of four steps, we have the possibility to deal with four solutions with differences in their chemical composition, their pH and the concentration of nitrate. So it is our task to find out which solution has the best chemical properties for the electrochemical nitrate reduction.

We are using a rotating disc electrode technique to test the behavior of three different cathode materials, which are stainless steel, copper and lead. While in addition an electrolyser with parallel plates, fluidized bed of inert particles and a cation selective membrane is used to test the four solutions on their eligibility of nitrate removal. Experiments with the electrolyser have already shown promising results for the potential industrial application.

Sekce: Anorganická technologie

Study of structural parameters of porous carbon supports using permeation measurements

Autor: Albert Castell
Ročník: 5.
Ústav: Ústav anorganické technologie
Školitel: Dr. Ing. Vlastimil Fíla, Ing. Vladimír Navara

Macroporous carbon materials thanks their chemical stability in highly acidic solutions could be an interesting alternative of ceramic support for zeolite membrane synthesis. The set of macroporous carbon disks was prepared. The effect of preparation conditions on the structural parameters of prepared samples were tested by means of permeation measurements, SEM and mercury porosimetry. The results of permeation measurements and Hg – porosimetry are compared on the base of calculated structural parameters. The effects of grinding time, raw material and sintering temperature are evaluated.

Sekce: Anorganická technologie

Využití anexových membrán pro elektrolýzu vody

Autor: Bc. Jaromír Hnát
Ročník: 4.
Ústav: Ústav anorganické technologie
Školitel: Prof. Dr. Ing. Karel Bouzek

Elektrolýza vody je v současné době zavedeným technologickým procesem. Nejčastěji se při tomto procesu využívá elektrolýzy vodného roztoku 20 – 30% KOH. Avšak s ohledem na předpokládané využití vodíku jako „paliva budoucnosti“, je této oblasti stále věnována značná pozornost odborné komunity. Kromě alkalických elektrolýzérů se již v současné době ve stoupající míře používá elektrolýzérů s polymerní membránou jako elektrolytem. Tato zařízení mimo jiné umožňují pracovat až s 5x vyšší proudovou hustotou, což má za následek také vyšší produkci vodíku. V elektrolýzérch s polymerní membránou se používají materiály schopné vyměňovat kation, nejčastěji jsou to perfluorované membrány typu Nafion. Tyto membrány vykazují při teplotách okolo 80°C dobrou stabilitu i iontovou vodivost, která však klesá s klesajícím obsahem vlhkosti, respektive s rostoucí teplotou.

Cílem této práce je ověřit možnost využití anexové membrány v tomto procesu. Takovýto typ membrány by teoreticky mohl, v porovnání s katexovými membránami, dosahovat ještě lepších elektrochemických vlastností, zejména v oblasti iontové vodivosti, či odporu pro transport elektronů. Velkým problémem těchto membrán je však jejich dlouhodobá stabilita za podmínek elektrolýzy vody, hlavně pak za teplot okolo 100°C.

Sekce: Anorganická technologie

Matematická simulace dějů probíhajících na povrchu katodicky chráněného kovu

Autor: Petr Klein
Ročník: 5.
Ústav: Ústav anorganické technologie
Školitel: Prof. Dr. Ing. Karel Bouzek

Katodická ochrana (KO) kovů je metoda protikorozní ochrany založená na katodické polarizaci povrchu kovu. Protikorozní účinky KO se nejčastěji vysvětlují posunutím potenciálu do oblasti imunity. Experimentální studie však naznačují, že vlivem katodické polarizace v prostředí s omezenou konvekcí dochází ke změnám složení Nernstovy difúzní vrstvy. Jedná se o nárůst pH vlivem redukce O_2 za vzniku OH^- iontů jako hlavní elektrodové reakce a snižování koncentrace iontů stimulujících korozi (Cl^- , SO_4^{2-}) vlivem elektrostatického pole. Za podmínek zvýšeného pH ($pH > 11$) pak může docházet k pasivaci povrchu kovu.

V rámci této práce byl navržen a implementován trojrozměrný matematický model simulující děje u povrchu kovu. Model uvažuje migračně-difúzní transport iontů (Nernstova-Plankova rovnice) a difúzi O_2 k povrchu kovu (1. Fickův zákon) jako krok řídící rychlost celého procesu v prostředí se zanedbatelnou konvekcí elektrolytu (půda). Model rovněž zohledňuje neutralizační kapacitu prostředí (autoprotolýza vody, disociace CO_2). Rozložení potenciálu definuje Laplaceova rovnice. Modelové vztahy jsou řešeny metodou konečných prvků v prostředí Comsol MultiphysicsTM. Modelem bylo ověřeno, že se povrch alkalizuje z $pH=7$ na $pH=12$ a vlivem migrace dochází k řádovému snížení koncentrace Cl^- .

Sekce: Anorganická technologie

Vodivost iontových kapalin a jejich směsí s kyselinou trifluoromethansulfonovou

Autor: Michal Kolafa
Ročník: 3.
Ústav: Ústav anorganické technologie
Školitel: Prof. Dr. Ing. Karel Bouzek

Palivové články jsou považovány za významný perspektivní zdroj elektrické energie. Jejich rozšíření v současnosti bohužel brání relativně vysoké pořizovací i provozní náklady. Jedním z možných způsobů řešení tohoto problému je zvýšení provozní teploty ze současných 80 °C na 160 °C. Zrychlení kinetiky elektrodových reakcí spojené s nárůstem teploty odstraní problém citlivosti katalyzátoru k otravě oxidem uhelnatým a zároveň umožní nahradit platinové kovy materiály ekonomicky mnohem dostupnějšími. Základní komplikace však spočívá v tom, že při tak vysoké teplotě již nelze použít perfluorovanou sulfonovanou membránu typu Nafion jako pevný elektrolyt. Je tedy nezbytné najít alternativní elektrolyt, který by vykazoval dostatečně vysokou vodivost rovněž při teplotách nad 100 °C.

Jednu z alternativ představují membrány na bázi iontových kapalin nesených polymerem. Zvoleny byly tyto kapaliny: 1-ethyl-3-methylimidazoliumtrifluoromethanesulfonate, 1-ethyl-3-methylimidazoliumbis(trifluoromethylsulfonyl)imide a 1-butyl-3-methylimidazolium trifluoromethanesulfonate. Cílem této práce bylo stanovit iontovou vodivost uvedených látek v širokém rozsahu teplot a určit vliv přídavku vhodného donoru protonů na její hodnotu.

Sekce: Anorganická technologie

Charakterizace tenkých vrstev na bázi $\text{SiO}_x\text{N}_y\text{:H}$

Autor: Jan Kubata
Ročník: 5.
Ústav: Ústav anorganické technologie
Školitel: André Ayrál, Vlastimil Fíla

Tenké polymerní vrstvy na bázi Si připravené pomocí metody chemické depozice z plynné fáze inicializované plazmou (PECVD) mohou být používány k přípravě membrán, které jsou svými vlastnostmi vhodné pro použití při separaci plyných směsí. Takto připravené vrstvy vykazují velmi vysokou homogenitu s dobře definovanou tloušťkou.

Presentovaná práce je zaměřena na charakterizaci vrstev připravených z hexamethyldisilazanu a amoniaku. Tyto vrstvy byly charakterizovány pomocí metod rentgenové difrakce a adsorpčních metod. V rámci této práce byly měřeny adsorpční izotermy N_2 , NH_3 , vody a toluenu. Mikroporozita připravených vzorků byla určena pomocí Dubinin-Radushkevichovy metody a metody MP (modifikovaná De Boerova t-metoda)

Sekce: Anorganická technologie

Vliv výchozí vápencové suroviny na průběh její reakce s kyselinou sírovou

Autor: Bc. Petra Kuželová
Ročník: 4.
Ústav: Ústav anorganické technologie
Školitel: Ing. Ivona Sedlářová

Při výrobě titanové běloby síranovým způsobem vzniká velké množství znečištěné odpadní kyseliny sírové, kterou je z ekologického hlediska nutno dále zpracovat na společensky využitelné produkty. Bez tohoto přepracování by výroba titanové běloby nemohla být realizována v potřebném množství. V její výrobě v Precheze a.s v Přerově je využívána neutralizace této kyseliny uhličitánem vápenatým, za vzniku dihydrátu síranu vápenatého, který je dále využíván v jiných průmyslových odvětvích. Cílem této práce bylo zjistit, jak výchozí vápencová surovina ovlivňuje vlastní průběh neutralizace.

Pokusy byly provedeny v izotermním míchaném polovsádkovém reaktoru, metodou založenou na měření vodivosti roztoku, která se titrací koncentrovanější kyselinou sírovou udržovala na konstantní hodnotě. Jako vstupní suroviny byly použity čistá kyselina sírová, vápencové suroviny představoval vápenec z lokality Čertovy schody a mramor z lokality Vápenná. U obou surovin byla použita frakce o velikosti zrn 0,4 – 0,5 mm.

Sekce: Anorganická technologie

Selective removal of copper from acid mine waters by combination of ion exchange and electro-winning

Student: Christoph Lockstet
Ročník: 3.
Ústav: Department of Inorganic technology, ICT Prague
University of Applied Sciences Leipzig
Školitel: Ing. Martin Paidar, Ph.D., Prof. Dr. Ing. Karel Bouzek

The pollution of our environment is one of the most important problems our civilisation is faced with. For example the mining of ore causes contamination of ground and surface water with iron and copper. In this case the separation method of ion exchange offers a suitable solution for decontamination. In combination with electrochemical treatment of regeneration solution it produce copper of high purity as final product. The general purpose of this work is to find acceptable ecological and economical conditions to run the process of copper removal from acid mine waters.

In present work chelating ion exchange resin especially newly developed for selective copper removal was studied.

Under common circumstances it removes all components capable to build up a complex with the functional group. The basic ion exchanger characteristic, its capacity, was measured. Another part of this study was to determine the influence on process efficiency by the pH-value of the contaminated solution and by the metal ion concentration.

Sekce: Anorganická technologie

Vliv vrstvy Nafionu® na účinnost anody u nízkoteplotního palivového článku typu PEM

Autor: Petr Mazúr
Ročník: 5.
Ústav: Ústav anorganické technologie
Školitel: Ing. Martin Paidar Ph.D.

Výzkumu a zdokonalování nízkoteplotních palivových článků je v současnosti věnována značná pozornost. Cílem práce bylo prozkoumat vliv na anodu nanesené vrstvy protonově vodivého polymeru Nafion® na výkon vodíko-kyslíkového palivového článku (PEMFC).

V předchozí práci věnované podobné problematice, byl Nafion nanášen na elektrolyticky vyloučenou platinovou katalytickou vrstvu, ve snaze zvýšit třífázový kontakt a tím i výkon článku. Neuspokojivé výsledky však podpořily hypotézu, že takto aplikovaný Nafion obalil část katalytických částic a tím k nim de facto zablokoval přístup plynu.

Oproti tomu v současné práci byl Nafion® nastříkán přímo na difúzní uhlíkový substrát GDL® a až pak na něj byla elektrochemicky vylučována platina. Vzhledem k elektronové nevodivosti Nafionu® se zrna platiny mohou vylučovat pouze na místech jím nepokrytých, ideálně pak na kontaktu s ním, což by zintenzívnilo tří fázový kontakt a tudíž i výkon PEMFC. Nafion byl nanášen sprejováním a jeho množství bylo diferenčně váženo na analytických vahách. Množství platiny, vyloučené pulsní elektrodpozicí, bylo kontrolováno hodnotou katodického náboje a po PEMFC experimentu ověřováno AAS analýzou roztoku rozpuštěné elektrody v lučavce královské. Velikost katalytických částic byla zjištěna ze SEM snímků.

Sekce: Anorganická technologie

Synthesis of titanosilicate membrane on different type of supports

Autor: David Gallardo Monjo
Ročník: 5.
Ústav: Ústav anorganické technologie
Školitel: Dr. Ing. Vlastimil Fíla, Ing. Zuzana Cílová

Importance of membrane application in the separation processes is continuously growing during the last decades. Mainly the polymeric membranes are applied industrially (gas separation, water treatment, filtration etc.) The inorganic membranes with respect to its high thermal stability and acidity resistance are the promising materials that could be use in the membrane reactors and high temperature separations.

This study is focused on the preparation of inorganic membranes based on titanosilicate ETS-4. The three types of supports (sintered stainless steel, macroporous carbon and α -alumina) were used. The effects of synthesis conditions as synthesis time, pH and temperature on the morphology of prepared membranes are evaluated.

Sekce: Anorganická technologie

Tvarování oxidů kovů do sférických částic

Autor: Lucie Ondryášová
Ročník: 3.
Ústav: Ústav anorganické technologie
Školitel: Ing. Miloslav Lhotka ,Ph.D.

Předkládaná práce navazuje na projekt zabývající se tvarováním oxidu titaničitého do sférických částic. Podstatou procesu je přidavek 1-3% polysacharidu do suspenze oxidu a následná tvorba sférických částic ve vodném roztoku dvojmocného nebo trojmocného kovu. Dávkování suspenze je prováděno přes speciální trysky umístěné do teflonové matrice. Vzniklé sférické částice se po promytí separují, suší a žíhají daným teplotním režimem.

Celý proces tvarování TiO_2 byl po laboratorních experimentech odzkoušen v provozu. Po úspěšném zavedení do výroby byla navržena řada oxidů kovů, u kterých se očekává podobné chování jako u TiO_2 a mají katalytické vlastnosti. Mezi tyto oxidy patří např. Al_2O_3 nebo ZrO_2 .

Současné laboratorní experimenty se zaměřují nejen na nalezení nejvhodnějšího složení suspenzí Al_2O_3 a ZrO_2 , ale také na sledování podmínek, které ovlivňují vlastnosti připravených sférických částic, jako je tvrdost, otěr, měrný povrch a další.

Sekce: Anorganická technologie

Vliv teploty výpalu na fotokatalytickou aktivitu TiO_2 vrstev

Autor: Patrick Tum
Ročník: 5.
Ústav: Ústav anorganické technologie
Školitel: Doc. Dr. Ing. Josef Krýsa, Ing. Martin Zlámal

Částicové vrstvy v sobě kombinují vysokou fotokatalytickou aktivitu (velký měrný povrch částic) a snadnou separovatelnost čištěného média a fotokatalyzátoru. Důležitým krokem při přípravě částicových vrstev je následná tepelná úprava, která zvyšuje soudržnost částic fotokatalyzátoru s podkladem. Nízká teplota výpalu může mít za následek špatné mechanické vlastnosti vrstvy, naopak vysoká teplota výpalu může vést ke snížení fotokatalytické aktivity. Z tohoto důvodu je nutné znát závislost fotokatalytické aktivity částicových vrstev na teplotě výpalu. Vrstvy byly připraveny sedimentační metodou z vodné suspenze předupravené ultrazvukem, aby se rozrušily aglomeráty fotokatalyzátoru. Připravené vrstvy byly následně vypáleny po dobu 2 hodin při teplotách 200°C-500°C. K přípravě vrstev byly použity práškové fotokatalyzátory pod výrobními názvy P25, AV-01 a Eurosupport. Ke stanovení rychlosti fotokatalytické degradace byla použita modelová látka Acid Oranž 7. Pro vrstvy AV-01 nemá teplota výpalu v daném rozmezí na fotokatalytickou aktivitu vliv. U fotokatalyzátoru P25 dochází s narůstající teplotou výpalu k postupnému snižování rychlosti fotokatalytické degradace o 30%. Fotokatalytická aktivita vrstev Eurosupport se s teplotou výpalu 200°C-450°C nemění, až při 500°C dochází ke snížení fotokatalytické aktivity o 40%.

Sekce: Anorganická technologie

Fotokatalytická degradace acid oranže 7 a 4-chlorfenolu na vrstvách TiO₂

Autor: Bc. Šárka Paušová
Ročník: 4.
Ústav: Ústav anorganické technologie
Školitel: Doc. Dr. Ing. Josef Krýsa

Tato práce se zabývá porovnáním rychlosti fotokatalytické degradace dvou modelových organických látek, acid oranže 7 (AO7) a 4-chlorfenolu (4-CP), na částicových vrstvách fotokatalyzátoru P25 připravených sedimentační metodou. Koncentrace AO7 lze v průběhu její degradace stanovit spektrofotometricky, protože meziprodukty jejího rozkladu neadsorbují světlo ve stejné oblasti spektra. Meziprodukty degradace 4-CP však absorbují při stejné vlnové délce, proto je koncentrace 4-CP stanovována pomocí vysokotlaké kapalinové chromatografie. Srovnávání rychlostí fotokatalytické degradace bylo provedeno pro různé počáteční koncentrace a pro různé rychlosti míchání roztoků modelových látek. Ze stanovení vyplývá, že látka 4-CP se při stejných podmínkách experimentu degraduje rychleji než AO7. Jedním z důvodů je složitější struktura molekuly AO7, která má za následek větší počet fotonů potřebný k celkové mineralizaci.

Sekce: Anorganická technologie

Vývoj alkalické bezkyanidové zinkovací lázně

Autor: Bc. Karel Plíhal
Ročník: 4.
Ústav: Ústav anorganické technologie
Školitel: Doc. Ing. Vladimír Mejta, CSc., Ing. Petr Szelag, Pragochema, s. s r.o., Praha

Nová generace alkalických bezkyanidových zinkovacích lázní umožňuje dosáhnout lepšího 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. Zinečnatanová lázeň vylučuje bez organických přísad nekompaktní práškový zinek. Proto se v alkalických lázních používají tři typy přísad. Základní přísady umožňují vylučovat kompaktní zinkové povlaky, leskotvorné přísady způsobí vylučování leklých zinkových povlaků a pomocné přísady maskují v lázni vliv kovových nečistot.

Cílem této práce bylo testovat nové organické suroviny pro základní přísady alkalických bezkyanidových zinkovacích lázní. Testování surovin probíhalo pokovováním standardních vzorků v Hullově cele. Pomocí této cely je možné sledovat vylučování kovů z galvanické lázně v širokém rozsahu proudových hustot. Bylo zkoušeno 5 organických přísad a jejich kombinací. Jako perspektivní byly vybrány zatím jen dvě přísady, které budou podrobeny dalšímu zkoumání.

Sekce: Anorganická technologie

Nové membrány pro palivové články na bázi polymerem nesených iontových kapalin

Autor: Martina Plíšková
Ročník: 3.
Ústav: Ústav anorganické technologie
Školitel: Prof. Dr. Ing. Karel Bouzek

Tato práce se věnuje vývoji nového typu elektrolytu pro palivové články typu PEM na bázi polymerem nesených iontových kapalin (IL). Hlavním cílem je připravit membrány vykazující dostatečnou teplotní stabilitu a protonovou vodivost nezávisle na relativní vlhkosti přiváděných médií. To v konečném důsledku umožní zvýšit pracovní teplotu palivového článku využívajícího tento elektrolyt nad 100 °C při atmosférickém tlaku.

Pro přípravu membrán studovaných v rámci této práce byly vybrány následující IL: 1-butyl-3-methylimidazolium 1-ethyl-3-methylimidazolium trifluoromethansulfonát, trifluoromethansulfonát a 1-ethyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imid a . Jako polymerní matrice byl v první fázi použit teplotně vysoce stabilní polybenzimidazol a jeho deriváty. V druhém kroku byly jako nosiče IL studovány polymery na bázi kopolymeru akrylonitrilu a kyseliny vinylsulfonové, resp. vinylfosfonové. Měření byla prováděna v rozmezí teplot 35° C až 160° C v inertní atmosféře o relativní vlhkosti nižší než 2 %. Výsledky ukázaly, že přítomnost IL není sama o sobě zárukou vodivosti membrány. Klíčovými aspekty se ukázaly být kompatibilita IL a polymeru a přítomnost zdroje protonů v objemu membrány. Pochopení vzájemných souvislostí je však vyžaduje další studium.

Sekce: Anorganická technologie

Studium měření průběhu rychlých heterogenních nekatalyzovaných reakcí metodou konduktostatické titrace

Autor: Michal Tuček
Ročník: 5.
Ústav: Ústav anorganické technologie
Školitel: Doc. Ing. Jan Vídenský, CSc.

Znalost kinetických dat je zásadní pro návrh vhodného reaktoru a tedy i celé technologie. Studium průběhu heterogenních nekatalyzovaných reakcí mezi kapalnou a pevnou fází klasickými metodami nelze v případě rychle reagujících látek úspěšně provést. Tato měření jsou prováděna periodicky po přerušení průběhu reakce, což je vzhledem k povaze rychlých reakcí tohoto typu velmi obtížně proveditelné a celé měření je zatíženo značnou chybou. Pro odstranění tohoto problému je třeba měřit průběh reakce metodou in-situ z čehož vyplývá výrazné zpřesnění odpovídajících si měřených údajů. Za tímto účelem bylo použito původní laboratorní zařízení sestávající se z míchaného izotermního polovsádkového reaktoru, vodivostní cely, konduktometru a automatického titrátoru. Princip metody spočívá v měření časové závislosti použitého množství titrované kyseliny do předložené reakční vsázky, kde dochází k reakci pevné fáze s kapalinou, tak aby v celém jejím průběhu zůstala vodivost roztoku konstantní. Následně se provádí korekce na změnu vodivosti způsobenou vznikajícím produktem. Pro posouzení vhodnosti daného zařízení byla zvolena reakce kyseliny dusičné a vápence a to především s ohledem na velkou reakční rychlost a její průmyslové využití.

Sekce: Anorganická technologie

Vliv dihydrogenfosforečnanu vápenatého na rozklad apatitu Kola kyselinou trihydrogenfosforečnou

Autor: Petra Veconová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav anorganické technologie
Školitel: Doc. Ing. Jan Vídenský, CSc.

Základem výroby fosforečných hnojiv je rozklad fosfátů silnými anorganickými kyselinami. Kyselina trihydrogenfosforečná se používá jednak jako rozkladné činidlo, ale též vzniká jako produkt rozkladu fosfátů kyselinou dusičnou. Jak kyselina trihydrogenfosforečná, jako produkt rozkladu kyselinou dusičnou, tak dihydrogenfosforečnan vápenatý, jako produkt rozkladu kyselinou trihydrogenfosforečnou, mají brzdící vliv na průběh reakce.

Tato práce se zabývá systémem, kde je studován brzdící vliv dihydrogenfosforečnanu vápenatého, jako produktu reakce fosfátů s kyselinou trihydrogenfosforečnou. Experimenty byly prováděny ve vsádkovém izotermním míchaném reaktoru s frakcí apatitu Kola o rozměrech 0,200 - 0,250 mm. Kyselina trihydrogenfosforečná s přídavkem dihydrogenfosforečnanu vápenatého byla použita v takovém přebytku, aby se její koncentrace během reakce prakticky neměnila. Rozklad byl sledován po přerušení reakce vážením nezreagovaného zbytku apatitu. Výsledkem provedených měření jsou závislosti stupně přeměny na čase pro různé reakční podmínky. Naměřené údaje pak byly zpracovávány pomocí modelové představy nezreagovaného jádra s použitím kinetické rovnice mocninného typu. Byl zjištěn významný brzdící vliv dihydrogenfosforečnanu vápenatého.

Sekce: Anorganická technologie

Matematický model hydrodynamiky toku v mezimembránovém prostoru elektrodialýzní cely vyplněné síťovou distanční vložkou

Autor: Bc. František Vlasák
Ročník: 4.
Ústav: Ústav anorganické technologie
Školitel: Prof. Dr. Ing. Karel Bouzek

Tato práce navazuje na předchozí studii, v níž byl navržen matematický model laminárního proudění tekutiny mezi dvěma membránami elektrodialýzní jednotky oddělenými distanční vložkou se síťovou výplní. Jedná se o dvourozměrný (2D) model sestávající ze dvou vrstev. V každé z nich je hydrodynamika toku usměrňována v závislosti na orientaci vláken sítě, přičemž orientace vláken se v jednotlivých vrstvách liší. Vlastnosti 3D toku v síťce jsou zachovány díky výměně tekutiny mezi vrstvami. Model laminárního proudění popisuje hydrodynamiku toku v síťce s dostatečnou přesností, avšak selhává v doménách nátoků resp. výtoků a v distributorech toku. V těchto oblastech proudění nabývá přechodového až turbulentního charakteru.

Cílem této práce je vytvořit matematický model umožňující simulaci turbulentního toku právě v oblastech s nelaminárním režimem proudění. Navržený model vychází z obecné Navierovy-Stokesovy rovnice, která byla v případě turbulentního proudění rozšířena o členy zahrnující setrvačné síly. Modelové rovnice byly řešeny metodou konečných prvků v programovém prostředí COMSOL Multiphysics™. Model turbulentního proudění vykazoval oproti laminárnímu podstatně vyšší nároky na výpočetní techniku.

Sekce: Kovové materiály I

Impedanční spektroskopie konverzních vrstev na zinku

Autor: Jaroslav Fojt
Ročník: 5.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Luděk Joska, CSc.

Cílem práce bylo porovnat vlastnosti různých konverzních vrstev na bázi chrómu v oxidačním stavu 3+ na zinku. Hodnocen byl vliv technologie při přípravě vrstev na jejich korozní chování.

K porovnání vlastností byla použita elektrochemická impedanční spektroskopie. Bylo měřeno v rozmezí frekvencí 10 kHz až 1mHz s amplitudou 10 mV v roztoku obsahujícím 3,5% (hm.) chloridu sodného při laboratorní teplotě. Použity byly vzorky s konverzní vrstvou vytvořenou při teplotách 20, 40 a 60°C a následně těsněnou dvěma typy přípravků (Seal Zn a Seal Si). Průměrná doba expozice činila 95 hodin. Spektra byla periodicky snímána v intervalu 24 hodin.

Spektra byla vyhodnocována pomocí tří ekvivalentních obvodů, simulujících porézní vrstvu, porézní vrstvu s difúzním řízením děje a dvě neporézní vrstvy. Na základě výsledků byl konstatován významný vliv teploty tvorby konverzní vrstvy. Bylo zjištěno odlišné chování různých těsněných vrstev, od výrazného kapacitního po odporové chování. Některé vzorky vykazovaly v průběhu měření nestabilitu samovolného korozního potenciálu.

Teplota tvorby vrstvy 40°C byla vyhodnocena jako optimální z hlediska korozní odolnosti a stability. U těsnění Seal Si byla pozorována schopnost eliminovat nevhodné vlastnosti základních chromátů, Seal Zn je schopen pouze rovnoměrněji distribuovat lokální napadení.

Sekce: Kovové materiály I

Separace Li_2CO_3 po zpracování cinvalditových odpadů sádrovou metodou

Autor: Bc. Jiří Formánek
Ročník: 1.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Jitka Jandová, CSc..

Cílem práce bylo stanovit optimální podmínky získávání čistého Li_2CO_3 z výluhů po zpracování cinvalditových koncentrátů sádrovou metodou. Cinvalditové koncentráty byly získány z gravitačních odpadů po zpracování Sn-W rud těžených v minulosti na Cínovci. Tyto výluhy obsahují v průměru 0,70 g Li/l, 0,30 g Rb/l, 2,38 g K/l, 0,20 g Ca/l a další nečistoty jako Na, Al a Si. Pro rafinaci byly používány klasické srážecí postupy založené na různé rozpustnosti síranů a uhličitánů Li, Ca, K a Rb. Pro experimentální práce byl připraven modelový roztok, jehož složení odpovídalo složení reálných výluhů.

Sekce: Kovové materiály I

Studium lokalizovaných forem koroze metodou elektrochemického šumu

Autor: Bc. Jakub Hak
Ročník: 1.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Milan Kouřil, Ph.D.

Možnosti identifikovat vznik lokalizované koroze jsou stále poněkud omezené. Metoda elektrochemického šumu se jeví jako metoda, která je schopná zaznamenat vznik lokalizované koroze, aniž by došlo k destrukci materiálu. Největší předností této metody je, že je schopna zachytit vznik bodové koroze dříve (při nižších koncentracích Cl^-) než ostatní metody. Chloridy jsou obsaženy v tělních tekutinách a proto by sledování, zda u materiálu nedochází k iniciaci lokální koroze v reálném čase, bylo velice užitečné. Proto byl při testování korozivzdorné oceli použit Ringerův roztok, který simuluje tělní tekutiny, ale i další roztoky. Cílem práce je zhodnotit možnost využití měření elektrochemického šumu k identifikaci bodové koroze, štěrbinové koroze a mezikrystalové koroze. Případně porovnat získané výsledky s některou z klasických metod používaných pro identifikaci lokalizovaných forem koroze.

Sekce: Kovové materiály I

Dělení Li a Rb z výluhu po zpracování cinvalditových odpadů

Autor: Lubomír Havlák
Ročník: 5.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Jitka Jandová, CSc.

Cílem práce bylo stanovit podmínky oddělení Li a Rb z výluhů po zpracování cinvalditových koncentrátů vápencovou metodou. Tyto výluhy obsahují v průměru 0,20 g Li/l, 0,21 g Rb/l, 1,50 g K/l, 0,10 g Ca/l a další nečistoty jako Na, Al a Si. Pro dělení byla použita metoda kapalinové extrakce za využití LIX 54 s přídavkem TOPO, pro reextrakci Li z organické fáze se prověřovaly roztoky H_2SO_4 a HCl. Byly proměřeny závislosti účinnosti extrakce a reextrakce Li na poměru anorganické a organické fáze, pH zpracovávaných roztoků, koncentraci reextrakčních kyselin, době extrakce a reextrakce. Bylo zjištěno, že tato metodou umožňuje extrahovat a reextrahovat až 96% Li, zatímco prakticky veškeré Rb zůstává ve zpracovávaném roztoku. Účinnosti reextrakce za využití H_2SO_4 anebo HCl jsou shodné.

Sekce: Kovové materiály I

Studium štěrbinové koroze metodou elektrochemického šumu

Autor: Bc. Monika Hradilová
Ročník: 1.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Luděk Joska, CSc.

Na základě výsledků expozičních zkoušek a snímání elektrochemického potenciálového šumu byla určena náchylnost sedmi materiálů na bázi titanu (Ti grade 2, Ti15Mo, Ti30Mo, Ti15Ta, Ti30Ta, Ti35Nb, Ti35Nb6Ta) ke štěrbinové korozi. Korozním prostředím byl fyziologický roztok s pH upraveným na 4,2 a 5,8 a s různým obsahem fluoridových iontů. Výsledky expozičních zkoušek byly kvantifikovány na základě vytvořené empirické stupnice hodnocení korozního napadení. V případě elektrochemického šumu byla porovnávána úroveň a průběh jeho signálu jako odezvy na probíhající korozní děje.

Oba postupy, expoziční testy i snímání elektrochemického šumu - prokázaly rozdílný vliv legujících prvků na odolnost titanových slitin vůči štěrbinové korozi. Nejnižší četnost lokalizovaného korozního napadení byla konstatována v případě expozičních zkoušek u vzorků legovaných niobem a tantalem. Při elektrochemickém měření docházelo výjimečně k výraznému nárůstu šumového signálu pouze u vzorků legovaných molybdenem.

Sekce: Kovové materiály I

Hydrotermální transformace jarožitových odpadů na magnetitové pigmenty

Autor: Bc. Tomáš Hron
Ročník: 1.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Hong Vu, Ph.D.

Cílem práce bylo nalézt podmínky, za kterých se sodné a amonné jarozity vzniklé při zpracování hlubokomořských konkrecí transformují na oxidy železa s magnetitovou strukturou. Reakce probíhala na fázovém rozhraní pevná látka-kapalina v silně alkalickém prostředí příslušné zásady (roztok NH_3 , NaOH) s přísádkem Fe^{2+} iontů ve formě zelené skalice. Teplota suspenze byla v průběhu transformace měněna v rozmezí 20-98°C a doba transformace se pohybovala od 3 do 7 h. Byl sledován vliv reakčních podmínek a typu jarozitu na barevnost, chemické složení a morfologii částic vzniklých oxidů železa.

Sekce: Kovové materiály I

Měření korozní rychlosti v atmosféře resistometrickou metodou

Autor: Bc. Jiří Kohout
Ročník: 1.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Milan Kouřil, Ph.D.

Senzory určené ke sledování korozní rychlosti jsou založené na rezistometrické metodě měření. Cílem práce bylo ověřit schopnost zaznamenávat korozní rychlost senzorů, jejich funkčnost, práci s loggerem a softwarem pro zpracování dat. Sledování tloušťky kovové vrstvy probíhalo porovnáním profilometrických stanovení a metalografických výbrusů. V průběhu experimentu došlo k vyřazení nevyhovujících stříbrných a nikl-zinkových senzorů. Byla sestavena aparatura k monitorování korozních účinků agresivních prostředí – 1% CH_3COOH , NH_3 , HCl a Na_2S . Jako nejcitlivější byl označen zinkový senzor. Také bylo zapotřebí zjistit stav senzorů exponovaných v solných komorách, v agresivní atmosféře oxidu siřičitého a v provozních podmínkách prostor Národního muzea v Praze. U senzorů exponovaných v solných komorách byl pozorován úbytek tloušťky kovové stopy směrem od měřících kontaktů.

Sekce: Kovové materiály I

Katodická pasivace – Evansův pokus

Autor: Štěpán Krtička
Ročník: 5.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Prof. Ing. Pavel Novák, CSc., Ing. Milan Kouřil, Ph.D.

Cílem této práce bylo provedení Evansova pokusu s kapkou solného roztoku na plechu z uhlíkové oceli v různých obměnách. Byly použity dvě různé úpravy povrchu ocelového plechu – broušení brusným papírem a moření v koncentrované HCl . Dále byly použity čtyři různé roztoky – roztok NaCl , roztok NaCl s přísadkou fenolftaleinu, roztok NaCl s přísadkou $\text{K}_3[\text{Fe}(\text{CN})_6]$ a roztok NaCl s přísadkou obou činidel. Všechny tyto pokusy byly provedeny ve třech různých atmosférách – N_2 , vzduch a O_2 . Během všech pokusů byly pozorovány barevné změny kapek a po 30 minutové expozici byly kapky vyfotografovány. Pozorované barevné změny byly porovnány a byl vyhodnocen vliv úpravy povrchu ocelového plechu, přítomnosti činidel v roztoku a atmosféry na průběh pokusu.

Sekce: Kovové materiály I

Zpracování cinvalditových odpadů vápencovou metodou

Autor: Bc. Lukáš Kubiš
Ročník: 1.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Hong Vu, Ph.D.

Cílem práce bylo aplikovat vápencovou metodu pro zpracování lithiových cinvalditových koncentrátů získaných z gravitačních odpadů po těžbě Sn-W rud na Cínovci. Byl sledován vliv teploty spékání a hmotnostního poměru cinvalditového koncentráту: CaCO_3 na fázové složení a na extrakci Li a Rb ze vzniklých spečenců. Li-cinvalditový koncentrát s uhličitánem vápenatým byl spékán v teplotním rozmezí od 800 – 875 °C po dobu 1h (poměr CaCO_3 : 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. Nejvyšší výtěžnost Li a Rb do roztoku, tj. 92 % a 80 %, byla dosažena při teplotě spékání 825 °C a poměru Li-koncentrát: CaCO_3 = 1 : 5.

Sekce: Kovové materiály I

Sledování vlivu legujících prvků na korozi bronzů při expozici v různých atmosférických podmínkách (vlhké, znečištěné)

Autor: Alena Lomozová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Ing. Luděk Joska, CSc., Ing. Kateřina Kreislová

Cílem práce je sledování vlivu legujících prvků v bronzových slitinách na tvorbu korozních vrstev v počáteční fázi korozního procesu.

Studované bronzové slitiny jsou rozděleny do dvou skupin – slitina obsahující olovo a slitiny bez obsahu olova. Na těchto vzorcích byly provedeny urychlené laboratorní zkoušky. Jako referenční vzorek byly použity vzorky olova a zinku.

Ze slitin s přírodní patinou byl odebrán vzorek na vytvoření metalografického výbrusu. Po vybroušení a vyleštění vzorků byla zdokumentována jejich povrchová vrstva. Struktura slitiny byla zdokumentována po naleptání. Vyhodnocení vzorků bylo provedeno pomocí elektronového rastrovacího mikroskopu. Složení povrchové vrstvy bylo hodnoceno pomocí EDAX analýzy.

Výsledky analýz umožnily identifikovat korozní produkty v povrchové korozní vrstvě v závislosti na podmínkách expozice. Celkové hodnocení vrstev bylo založeno na vizuálním studiu, EDAX analýze a porovnání výsledků určených pro bronzы s korozními produkty zinku a olova exponovaných za stejných podmínek.

Sekce: Kovové materiály I

Zjištění podmínek vzniku napadení korozivzdorných ocelí ve specifických mikroklimatech

Autor: Bc. Tomáš Popela
Ročník: 1.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Bystrianský, CSc.

Práce se zabývá poškozením ocelí v podmínkách mikroklimat podobných těm ve veřejných koupalištích. Testování bylo prováděno na vzorcích ocelí Cr18Ni12Mo2 a Cr22Ni5Mo3N. Inicie lokalizovaného napadení byla sledována pomocí metody elektrochemického šumu. Sklon ke koroznímu praskání byl hodnocen pomocí tahových zkoušek s pomalou deformací při samovolném korozním potenciálu a na polarizovaných vzorcích.

Sekce: Kovové materiály I

Příprava a vlastnosti burelové referenční elektrody

Autor: Barbora Štanclová, Kristýna Kolářová
Ročník: 2.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Milan Kouřil, Ph.D.

Při praktických aplikacích jsou na referenční elektrody kladeny vyšší nároky než v laboratorních podmínkách. Jejich konstrukce musí být robustní a potenciál dlouhodobě stálý, tzn. několik let v půdním prostředí a několik desítek let v betonu. Jak v betonu, tak v případě katodicky chráněných úložných zařízení z oceli je nutná stabilita elektrody v alkalickém prostředí. Elektroda Hg/HgO a elektroda na bázi aktivovaného titanu neprokazuje reprodukovatelný potenciál a dlouhodobou stabilitu. Slibným řešením je burelová elektroda, která vyžaduje přípravu β -MnO₂ s vhodnými vlastnostmi. Elektrody byly připraveny v experimentální formě vhodné pro testování stability v alkalickém roztoku a zkoušení vhodnosti koncentrace vnitřního elektrolytu. Potenciál elektrod byl měřen proti chlorido-stříbrné referenční elektrodě.

Sekce: Kovové materiály I

Hodnocení kvality povrchu korozivzdorných ocelí

Autor: Bc. Tomáš Vejvar
Ročník: 1.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Bystrianský, CSc.

Cílem práce bylo ověření vlivu podmínek vzniku oxidické vrstvy na korozivzdorných ocelích k lokalizované korozi. U oceli FeCr18Ni10Ti a modelových slitin FeCr byl sledován vliv oxidů vzniklých při různých teplotách tepelného ovlivnění a v různých prostředích na odolnost k bodové korozi.

Sekce: Kovové materiály II

Příprava práškového niklu pro uchovávání vodíku

Autor: Bc. Katrin Bialasová
Ročník: 1.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jan Šerák, Ph.D.

V současné době jsme svědky prudkého rozvoje metod zabývajících se výzkumem a vývojem alternativních zdrojů energie v důsledku postupného vyčerpávání zdrojů stávajících (ropa, uhlí, zemní plyn). Jednou z perspektivních možností je uchovávání vodíku v pevných látkách, které umožňuje jeho relativně bezpečné skladování a následné uvolnění plynu metodou ohřátí na relativně nízkou teplotu.

Tato práce se zabývá přípravou práškového niklu metodou chemického rozpouštění hliníkové matrice binární slitiny AlNi₂₀, připravené technologiemi gravitačního lití a metodou „melt spinning“. V průběhu rozpouštění dochází ke vzniku vodíku „ve stavu zrodu“. Atomy vodíku následně vlivem difúze migrují do mřížky Ni, kde se „hromadí“. V rámci tohoto experimentu byly připraveny vzorky práškového niklu, u kterých bylo hodnoceno fázové složení a stupeň nasycení vodíkem a dále byla sledována kinetika uvolňování vodíku při zvýšených teplotách.

Sekce: Kovové materiály II

Struktura a vlastnosti kompozitů Ti-Al-Si

Autor: Juda Čížkovský
Ročník: 5.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Doc. Dr. Ing. Dalibor Vojtěch

Kompozity in situ na bázi systému Ti-Al-Si jsou studovány jako lehké materiály pro velmi náročné vysokoteplotní aplikace např. v leteckých proudových motorech, plynových turbínách atd. V práci jsou studovány dva kompozity na bázi systému Ti-Al-Si, které jsou tvořené maticí γ -TiAl vyztuženou silicidem Ti₅Si₃. Oba kompozity se liší obsahem niobu, který je považován za prvek zlepšující vysokoteplotní oxidační odolnost a houževnatost. Kompozity byly připraveny obloukovým tavením v ochranné atmosféře hélia. Je studována jejich mikrostruktura a kinetika vysokoteplotní oxidace na vzduchu. Výsledky umožňují vyhodnotit vliv přítomných fází a legujících prvků na oxidační odolnost za vysokých teplot.

Sekce: Kovové materiály II

Příprava kompozitních vrstev bezproudovým niklováním

Autor: Bc. Jan Hruška

Ročník: 1.

Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství

Školitel: Doc. Dr. Ing. Dalibor Vojtěch, Ing. Michal Novák

Bezproudové niklování s přidavkem částic je jedním ze způsobů přípravy kompozitních vrstev. Na tvrdost Ni-P vrstvy a na její odolnost vůči abrazi má příznivý vliv kódepozice tvrdých částic, jako například WC, B₄C, Al₂O₃, SiO₂. Typ, tvar a velikost částic výrazně ovlivňují vlastnosti výsledné vrstvy. Očekává se, že kompozitní vrstva obsahující částice ve formě krátkých vláken bude mít vyšší houževnatost.

Cílem práce bylo připravit pomocí bezproudového niklování kompozitní vrstvu vyztuženou vlákny Al₂O₃. Byly použity dva typy vláken: nanokrystalická vlákna a vlákna SAFIL. Byla zkoumána využitelnost vláken pro přípravu kompozitních povlaků, zejména rovnoměrnost depozice a tloušťka získané vrstvy.

Sekce: Kovové materiály II

Vlastnosti rychle ztuhlé slitiny AlMm6Fe5Mg3Si3

Autor: Tomáš Janoušek

Ročník: 3.

Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství

Školitel: Ing. Alena Michalcová

Cílem této práce bylo popsání struktury rychle ztuhlé slitiny AlMm6Fe5Mg3Si3 a určení změny jejích vlastností za zvýšených teplot. Tento materiál byl vyroben metodou rovinného lití. V porovnání s konvenčními hliníkovými slitinami jsou pro rychle ztuhlé slitiny charakteristické dobré mechanické vlastnosti a tepelná stabilita. Důvodem lepších vlastností rychle ztuhlých slitin je jejich nanokrystalická struktura a také menší výskyt strukturních poruch v materiálu.

Sekce: Kovové materiály II

Oxidační odolnost slitin Ti-Al-Si vyrobených reaktivní sintrací

Autor: Bc. Vítězslav Knotek
Ročník: 1.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Pavel Novák, Ph.D.

Slitiny titanu jsou perspektivní materiály pro použití v automobilovém a leteckém průmyslu díky nízké hustotě a vynikajícím mechanickým vlastnostem. Avšak jejich hlavní nevýhodou je nízká odolnost proti vysokoteplotní oxidaci. Slitiny na bázi intermediálních fází TiAl, Ti_3Al a Ti_5Si_3 mohou být použity při vysokých teplotách, ale jejich příprava není jednoduchá. V této práci byly práškovou metalurgií připraveny slitiny TiAl₁₅Si₁₅ a TiAl₈Si₂₀. Postup zahrnoval přípravu prášků mechanickým obráběním titanu, hliníku, křemíku a předslitiny AlSi₃₀. Prášky byly lisovány za studena a následně reaktivně sintrovány v inertní atmosféře při teplotě 900 °C po dobu 30 min. Připravené vzorky byly podrobeny oxidačním zkouškám na vzduchu při teplotě 900 °C. Jako srovnávací materiál byla využita slitina TiAl₄₅ připravená vakuovým indukčním tavením. Cílem této práce bylo popsat kinetiku a mechanismus vysokoteplotní oxidace tohoto materiálu a jeho tepelnou stabilitu měřením tvrdosti po žhání.

Sekce: Kovové materiály II

Vliv křemíku na strukturu slitin Fe-Al a Fe-Ni vyrobených reaktivní sintrací

Autor: Jiří Kubásek
Ročník: 3.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Pavel Novák, Ph.D.

Slitiny tvořené intermetalickými fázemi Fe-Al a Ni-Al patří mezi moderní materiály pro vysokoteplotní aplikace. Přípravu technologií tavné metalurgie však komplikují vysoké teploty tání těchto fází. Velmi jednoduchou technologii výroby představuje reaktivní sintrace, při které vzniká výsledné fázové složení materiálu ze smísených prášků kovů v průběhu procesu spékání. U některých systémů (např. Ti-Al) však dochází při sintraci ke vzniku vysoké pórovitosti. Přídavek křemíku vede u těchto materiálů k poklesu podílu pórů. V této práci byl testován vliv přídavku křemíku na pórovitost, mikrostrukturu a fázové složení slitin Fe-Al a Ni-Al.

Sekce: Kovové materiály II

Příčiny rozdílné barevnosti patiny na mědi při atmosférické expozici

Autor: Veronika Procházková
Ročník: 5.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Prof. Ing. Pavel Novák, CSc., Ing. Pavel Novák, Ph.D.

Na měděných površích stejně exponovaných ve vnějších atmosférických podmínkách je možné pozorovat oblasti s patinou zelené i černé barvy. Cílem této práce bylo s použitím dostupných analytických metod porovnat chemické a fázové složení a mikrostrukturu odlišně zbarvených vzorků patiny a na základě provedených analýz objasnit příčinu vzniku těchto barevných rozdílů. Byla využita metalografická analýza, světelná a elektronová mikroskopie, RTG difrakční analýza, optická emisní spektroskopie (GDS), infračervená spektroskopie a povrchová analýza metodou ESCA.

Sekce: Kovové materiály II

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

Autor: Bc. Filip Průša
Ročník: 1.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Pavel Novák, Ph.D.

Slitiny tvořené intermediálními fázemi Ti-Al nebo Ti-Si jsou perspektivní materiály pro speciální aplikace v leteckém, automobilovém nebo kosmickém průmyslu. Jejich výhodami jsou nízká hustota, vysoká tvrdost a odolnost proti opotřebení a rovněž velmi dobrá odolnost proti vysokoteplotní oxidaci. Problémy však činí jejich výroba, neboť při výrobě metodou vakuového indukčního tavení dochází k reakci taveniny s běžnými materiály tavících kelímků.

V této práci byl testován alternativní postup výroby těchto materiálů – prášková metalurgie s využitím reaktivní sintrace. Slitiny TiAl₃₆, TiSi₂₆ a Ti-Al-Si o různém chemickém složení byly připraveny z prášků titanu, hliníku, křemíku a předslitiny AlSi₃₀. Postup zahrnoval lisování při laboratorní teplotě a reaktivní sintraci v inertní atmosféře při 900 °C s dobou výdrže 30 minut. Mikrostruktura byla vyhodnocena optickým a elektronovým mikroskopem, přítomné fáze byly stanoveny RTG difrakční analýzou. Byl vyhodnocen obsah pórů a provedeny zkoušky tvrdosti připravených materiálů.

Sekce: Kovové materiály II

Snížení obsahu železa ve slitině AlSi10Cu2MgFe

Autor: Bc. Václav Šefl

Ročník: 1.

Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství

Školitel: Ing. Jan Šerák, Ph.D.

V souvislosti se stále se zmenšujícími zdroji surovin pro výrobu primárního hliníku se v současné době stále více setkáváme s využitím sekundárních hliníkových slitin. Ty mohou obsahovat zvýšený obsah železa, což je u hliníkových slitin určených pro lití pod tlakem přínosem. V případě gravitačně litých hliníkových slitin je obsah železa vysoce nežádoucí, protože je železo obsaženo ve formě dlouhých jehlicovitých intermetalických fází s vysokou tvrdostí a křehkostí. Tyto fáze výrazně narušují strukturní homogenitu odlitku a velmi značně snižují mechanické vlastnosti. Proto je snaha nalézt co nejjednodušší metodu umožňující snížení obsahu železa v hliníkových slitinách.

Tato práce se zabývá možností snížení obsahu železa ve slitinách AlSi10Cu2MgFe. Princip je založen na žíhání taveniny na teplotě, při které krystalizují fáze s obsahem železa, jejich sedimentaci, případně filtraci. V rámci experimentu byly naměřeny ochlazovací křivky, realizováno žíhání taveniny, studována a vyhodnocována byla mikrostruktura připravených slitin.

Sekce: Anorganické nekovové materiály I

Vyluhování olova z olovnatého křišťálového skla

Autor: Veronika Hornychová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Helena Hradecká, Prof. Ing. Aleš Helebrant, CSc.

Současná produkce nápojových skel z olovnatého křišťálu v sobě zahrnuje výrobu nejen tradičních tenkostěnných kalíšků vyráběných foukáním do formy s následným broušením, ale do popředí se v poslední době dostává i výroba lisovaných silnostěnných sklenic a pohárů. Jednotlivé typy výrobků se mohou lišit jednak složením, jednak konečnými technologickými úpravami povrchů (chemické leštění nebo leštění plamenem), což může mít významný vliv na množství Pb, které se následně vyluhuje z vnitřního povrchu skla do nápojů. Vzhledem k toxicitě olova jsou mezinárodně platnou legislativou stále zpřísňovány maximální povolené limity koncentrací Pb ve výluzích ze skel. Předložená práce se zabývá jednak porovnáním vlivu v současné době používaných konečných technologických úprav výrobků na množství olova ve výluzích z jejich vnitřních povrchů, jednak sledováním vlivu změny složení a způsobu tvarování Pb skel na jejich chemickou odolnost. Krátkodobé i dlouhodobé testy loužení byly provedeny na celistvých vzorcích i na vzorcích ve formě skleněné drti, skla byla loužena podle normy ISO 7086-1 do 4% kyseliny octové. Pomocí modelových testů loužení byla dále testována bezpečnost použití silnostěnných lisovaných Pb skel pro horké nápoje z hlediska výluhu olova.

Sekce: Anorganické nekovové materiály I

Kvantová simulace křemičitých materiálů

Autor: Soňa Charvátová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Doc. RNDr. Ondřej Gedeon, Ph.D., Ing. Jan Macháček, Ph.D.

Ab initio molekulové simulace lze využít při modelování struktury a vlastností krystalických křemičitanů a křemičitých skel. Cílem práce bylo prozkoumat možnosti těchto simulací pomocí programu VASP, který provádí kvantově mechanické výpočty založené na teorii funkcionálu elektronové hustoty (DFT). Byla provedena strukturní optimalizace krystalové buňky disilikátu sodného (α -Na₂O.2SiO₂) a wollastonitu (α -CaO.SiO₂) a byl sledován vliv parametrů simulace na výsledné mřížkové parametry, meziatomové vzdálenosti a kohezni energii krystalu. Sledované strukturní parametry prokázaly dobrou shodu s experimentem. Jako nejuniverzálnější testovaný funkcionál se osvědčil typ PBE s pseudopotenciálem PAW. Výsledky byly využity při tvorbě modelu popisujícího ozařování binárního draselno-křemičitého skla paprskem elektronů, kdy dochází k strukturním a objemovým změnám při migraci draselných iontů do objemu vzorku a kdy pravděpodobně vznikají peroxidové a Si-Si vazby. Pomocí kvantové molekulové dynamiky byl vytvořen základní skelný systém simulací chlazení náhodného uspořádání cca 100 atomů K, Si a O. Analýzou systému byla získána radiální distribuční funkce. Dalším krokem práce bude odebrání atomů K ze skla a sledování následné relaxace struktury. Tím bude simulováno uspořádání odpovídající struktuře skla po ozáření elektrony.

Sekce: Anorganické nekovové materiály I

Dynamika teplotních polí v plynem vyhřívané peci

Autor: Helena Kočárková
Ročník: 5.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Doc. Ing. Stanislav Kasa, CSc.

Tato práce navazuje na dřívější práci zabývající se optimálním umístěním mačkácí tyče v nahřívací peci. Kritériem pro hledání vhodného umístění bylo homogenní prohřátí tyčí. Homogenní prohřátí mačkácí tyče je velmi důležité pro přesnost lisovaného výrobku. Na základě dřívějších výsledků bylo zjištěno, že dosavadní stav ohřevu tyčí ve sklárně je nevyhovující a je třeba hledat jeho zlepšení. Cílem této práce bylo navrhnout možná řešení problému a ověřit jejich použití pro praxi pomocí metody matematického modelování. Byla zkoumána dvě řešení zahrnující změnu geometrie pece. Namísto použití jednoho hořáku umístěného v levé části pece, bylo navrženo použití šesti menších hořáků umístěných ve vrchní části pece. Prvním navrhovaným řešením bylo umístění šesti hořáků v jedné řadě v horní části pece. Druhou variantou bylo umístění šesti hořáků ve dvou řadách po třech a jejich natočení od osy pece směrem ke stěnám pece o 10° . Třetí původně navrhované řešení, umístění dvou řad hořáků po třech ve stěnách pece a ne v horní části pece, nebylo matematickým modelem zkoumáno, protože jeho realizace v praxi by byla příliš ekonomicky i technicky náročná.

Výsledky práce ukázaly, že obě navrhovaná řešení pomohou vylepšit stávající stav ohřevu mačkácích tyčí. Ve sklárně bylo zvoleno umístění šesti hořáků ve dvou řadách po třech, neboť díky natočení hořáků na stěny pece se pec vyhřeje na vyšší teplotu než u druhého navrhovaného řešení. Tyče se tak ohřívají především díky sálání tepla ze stěn pece a ne přestupem tepla z proudícího media kolem tyčí, což umožní jejich rovnoměrnější prohřev.

Sekce: Anorganické nekovové materiály I

Snížení obsahu čeřících směsí vnesením oxidu kovu vzácné zeminy do skloviny

Autor: Kurfiřtová Lenka
Ročník: 1. magisterské studium
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Miroslav Rada, CSc.

Cílem této práce bylo na základě poznatků získaných z literatury provést na modelové olovnaté sklovině s obsahem PbO větším než 24 hmot. % následující úkoly: Vyšetřit vliv samotného oxidu kovu vzácné zeminy nebo v kombinaci s dusičnanem draselným na stupeň vyčeření skloviny a na povrchové napětí. Vyšetřit vliv oxidu kovu vzácné zeminy na stupeň vyčeření a na povrchové napětí při jeho užití v kombinaci s již používanými čeřícími směsmi. Nalezení takové kombinace při sníženém obsahu těchto běžně používaných čeřících směsí, aby byla zachována kvalita vyčeřené skloviny.

Přidání oxidu kovu vzácné zeminy k čeřícím směsím As_2O_3 , Sb_2O_3 a CeO_2 v kombinaci s KNO_3 ve všech případech přispělo ke snížení povrchového napětí a stupeň vyčeření zůstal zachován nebo se zlepšil. Uvedená skutečnost tak umožňuje snížit obsah čeřící směsi.

Sekce: Anorganické nekovové materiály I

Vliv oxidů vzácných zemin na vlastnosti křišťálových skel

Autor: Alena Kopitzová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Miroslav Rada, CSc.

Čeření se ve sklářství považuje za jeden z nejdůležitějších fyzikálně-chemických procesů. K odstraňování rozpuštěných plynů, tedy k čeření, se používají čeřiva, jako např. As_2O_3 , Sb_2O_3 v kombinaci s KNO_3 pro olovnatá křišťálová skla a Na_2SO_4 pro užitková skla. Tato čeřiva ovlivňují důležité technologické vlastnosti, především povrchové napětí a viskozitu. Díky rozvoji chemického průmyslu se můžeme v dnešní době pokusit nahradit tyto ekologicky nevyhovující látky, látkami ekologicky únosnými, mezi něž patří lanthanoidy. Lanthanoidy, neboli „vzácné zeminy“ si jsou po chemické stránce velmi podobné a mají vlastnosti pro čeřiva velmi důležité. Výrazně snižují viskozitu a prvky jako cer, praseodym a terbium vytvářejí kationty M^{4+} , které mají oxidační vlastnosti. Cílem této práce je zjištění možnosti použití oxidu prvku, který vytváří kationt M^{4+} , jako náhrady dosud používaných čeřiv a optimalizace jeho množství v kmeni. Je zjišťován stupeň vyčeření (na základě určení počtu bublin ve 100 gramech utavené skloviny statickou metodou) a povrchové napětí (metodou maximálního tlaku v bublině) u olovnatého křišťálu s obsahem PbO nad 24 hmot. %. Sleduje se závislost přídatku tohoto oxidu samotného i v kombinaci s KNO_3 .

Sekce: Anorganické nekovové materiály I

Tvarování skleněných destiček pro vesmírné teleskopy

Autor: Martina Landová
Ročník: 3.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Dr. Ing. Martin Míka

V naší práci se zabýváme tepelným tvarováním skleněných destiček. Změnami v teplotním režimu je možno dosáhnout velmi přesného tvaru a zachování velmi malé mikrodrsnosti v optimálním případě menší než 1 nm. V této oblasti výzkumu již bylo dosaženo slibných výsledků a my se nyní zabýváme jejich reprodukovatelností a dalším vylepšením tvarovacího procesu. Vytvarované skleněné destičky jsou určeny k vakuovému pozlacení a následné instalaci do vesmírných teleskopů. Zde jsou sestaveny do optického systému, který fokusuje rentgenové paprsky do detektoru signálu. Díky přesnému tvaru destiček a jejich velmi malé mikrodrsnosti je možné získat kvalitní obraz o velmi malém úhlovém rozlišení. Současné vesmírné teleskopy typu Wolter 1 mají malý zorný úhel a proto je pro ně problém pozorovat krátkodobé záblesky rentgenového záření. Ze tímto účelem byl vyvinut nový typ optického systému Lobster-eye s výhledem 1000 a více čtverečních stupňů. Jedná se však o rozsáhlejší systém než dříve, proto je třeba použít materiálu o nízké hustotě. Tento požadavek splňuje borosilikátové sklo Desag 263, se kterým pracujeme.

Sekce: Anorganické nekovové materiály I

Reakce ve sklářském kmeni

Autor: Rostislav Lošot
Ročník: 5.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Doc. Ing. Stanislav Kasa, CSc.; Ing. František Novotný CSc.

Průběh tavicího procesu je značně ovlivňován prvotními chemickými reakcemi mezi danými surovinami. Vhodnou volbou podmínek např. granulometrií surovin, rychlostí ohřevu a dobou výdrže na maximální teplotě, lze žádoucím způsobem ovlivnit následný čerací proces a zároveň kvalitu skloviny.

Sledování tavicího děje bylo prováděno ve vertikální píce, přičemž kmen byl zahříván ze spod roztavenými střepy. Testování probíhalo na Ba křišťálu v keramických kelímcích. Poté co byla získána rovinná vrstva skloviny, roztavením Ba střepů, byl nasypán Ba kmen. Jednotlivé pokusy se lišily rozdílnou dobou výdrže.

Pomocí počítačového softwaru Nis Elements bylo zkoumáno vzniklé rozhraní kmen - sklovina a byla vyhodnocována vzniklá mikrostruktura. Bylo zjištěno, že rozdílnou dobou výdrže na maximální teplotě vznikají rozdíly v mikrostruktuře na rozhraní kmen - sklovina.

Sekce: Anorganické nekovové materiály I

Protonově vodivé membrány pro středně teplotní H_2/O_2 palivové články

Autor: Jakub Michal
Ročník: 5.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Dr. Ing. Martin Míka

Mezi nejperspektivnější možnosti využití vodíku patří bezesporu palivové články využívající přímé přeměny chemické energie na elektrickou. Klíčovou složkou v palivovém článku je hybridní fosforečno-křemičitá membrána, která je předmětem našeho výzkumu. Tato protonově vodivá membrána zprostředkovává pohyb protonů mezi anodou a katodou a zároveň musí být nepropustná pro elektrony, které procházejí vnějším elektrickým obvodem. Současné protonově vodivé membrány musí být udržovány v hydratovaném stavu atmosférou s vysokou relativní vlhkostí, aby byla zachována jejich vysoká protonová vodivost, to je však technicky velmi náročné a drahé. Pro použití v automobilech se předpokládá pracovní teplota palivového článku v intervalu 120-130 °C. Proto je naší snahou vytvořit membránu, která je pružná a protonově vodivá i při vyšších teplotách od 100°C do 130°C v prostředí o velmi nízké relativní vlhkosti. Složení a postup přípravy naší hybridní membrány upravujeme vzhledem k dosažení optimálních mechanických a chemických vlastností. Ukazuje se, že přidavkem pevných částic SiO_2 se tyto vlastnosti příznivě ovlivňují. Protonovou vodivost počítáme z experimentálně určeného odporu membrány a výsledné chování membrány měříme přímo na kyslíko-vodíkovém palivovém článku.

Sekce: Anorganické nekovové materiály I

Koroze skel s křemičitými vrstvami připravenými metodou sol-gel

Autor: Stanislav Plíhal
Ročník: 5.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Helena Hradecká, Prof. Ing. Aleš Helebrant, CSc.

Dlouhodobý kontakt křemičitých skel obsahujících alkalické oxidy s vodnými roztoky způsobuje nevratné změny ve struktuře povrchu skel. Jednou z možností ochrany povrchu substrátů proti působení koroze je nanášení chemicky odolných vrstev. V předložené práci byly metodou sol-gel připraveny křemičité vrstvy kyselou hydrolyzou TEOSu za přítomnosti isopropylalkoholu při zvýšené teplotě (60°C), sol byl z důvodu porovnání ochranného účinku nanášen na podložní skleněný substrát v jedné resp. dvou vrstvách. Dále byla navržena příprava jiného typu křemičitých vrstev s použitím přídavku acetylacetonu bez nutnosti ohřevu solu. Všechny vrstvy byly na podložní substrát nanášeny metodou dip-coating, po vysušení byly vypáleny v peci po dobu 1 a 6 h při teplotě 500°C. Po výpalu byla změřena tloušťka vrstev a byly provedeny statické korozní testy potažených i nepotažených substrátů v prostředí destilované vody při 60°C.

Sekce: Anorganické nekovové materiály I

Vliv oxidů vzácných zemin na některé vybrané parametry průmyslově vyráběných skel

Autor: Miroslav Polák
Ročník: 1. MS
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Miroslav Rada, CSc.

Cílem této práce bylo prozkoumat vliv vybraného oxidu vzácné zeminy v určitém množství na některé parametry průmyslově vyráběných skel: float, bílá obalová sklovina, zelená obalová sklovina, sodnovápenatá křišťálová sklovina, barnatá křišťálová sklovina a olovnatá křišťálová sklovina s obsahem 24 a 30 hmot. % oxidu olovnatého. Jednalo se o zkoumání vlivu na tyto parametry: stupeň vyčeření skloviny, povrchové napětí, viskozitu, měrný elektrický odpor, krystalizační vlastnosti a hydrolytickou odolnost. 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. Nejpozitivněji působí na bílou obalovou sklovinu. Vliv na ostatní skla byl méně pozitivní, přičemž klesal v řadě: bílá obalová sklovina > zelená obalová sklovina > barnatá křišťálová sklovina > sklovina float $\approx$ sodnovápenatá křišťálová sklovina $\approx$ olovnatá křišťálová sklovina s obsahem 24 hmot. % PbO > olovnatá křišťálová sklovina s obsahem 30 hmot. % PbO

Sekce: Anorganické nekovové materiály II

In vitro testy biomateriálů za podmínek blízkých v lidském těle

Autor: Iva Březovská
Ročník: 4.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Dr. Ing. Dana Rohanová

Nové materiály používané k náhradám kostní tkáně v chirurgii a stomatochirurgii musí projít sérií testů in vitro a následně in vivo. Dynamický test in vitro je uspořádán tak, aby co nejvěrněji modeloval situaci v lidském těle. Vzorek je obýván čerstvým roztokem SBF (simulated body fluid) a ve výluhu jsou analyzovány koncentrace vápníku a fosforu (srážení HAp se projeví jejich odčerpáváním) i pH roztoku. Mimo to je sledován povrch testovaného materiálu pomocí optické mikroskopie, sledován váhový přírůstek i růst nové vrstvy v řezu. Dynamickým testem byly testovány jak Ti slitiny prekalifikované v přesyceném roztoku tak β -TCP (trikalciumfosfát) určený k výplním kostních dutin.

β -TCP byl testován i v samotné destilované vodě a v roztoku pufru TRIS (tris (hydroxymethyl)amino metan), který se využívá k pufování simulované tělní tekutiny SBF. Bylo zjištěno, že prekalifikované povrchy Ti slitiny reagují v SBF prakticky okamžitě (srážení HAp) a povrchová úprava prekalifikací může významně zkrátit dobu zhojování implantátu. β -TCP se v samotné vodě rozpouští velmi pomalu oproti vodě s obsahu TRIS. Pufr TRIS ovlivňuje i chování materiálů v samotném SBF roztoku. K prvotnímu náhledu na testovaný materiál se však roztok SBF pufovaný TRISem jeví jako vhodný.

Sekce: Anorganické nekovové materiály II

Příprava bioaktivních vrstev na titanu a Ti-slitině

Autor: Petra Haufová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Dr. Ing. Dana Rohanová

Titan a jeho slitiny (Ti6Al4V) jsou, pro své vhodné mechanické vlastnosti (vysoká pevnost, nízká hustota) a vysokou korozní odolnost, jedny z nejpoužívanějších materiálů pro náhradu kosti (dentální a ortopedické implantáty). Jsou to bioinertní materiály a aby mohli vytvořit pevnou vazbu s kostní tkání, musí se jejich povrch nejprve upravit pomocí silných kyselin (HCl) a zásad (NaOH). Dále je vhodné povrch implantátu tzv. prekalifikovat pomocí roztoku SCS (supersaturated calcification solution), který obsahuje vápenaté a fosforečnanové ionty. Při prekalifikaci se na povrchu Ti vytvoří Ca-P vrstva, která v organismu či v prostředí simulované tělní tekutiny (SBF) dále usnadní precipitaci hydroxyapatitu (HA) $[\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2]$. HA má chemickou a biologickou podobnost s kostní tkání. Dokáže vytvořit přímou vazbu s kostí a podporovat vznik a růst nové tkáně, čímž urychlí a usnadní vhojení implantátu.

Cílem práce je optimalizace podmínek prekalifikace, aby byly připraveny vrstvy o vhodných vlastnostech (dostatečná adheze k implantátu, porozita a tloušťka) a aby jejich příprava byla rychlá a snadno reprodukovatelná. Povrch vzorků byl hodnocen optickým mikroskopem, v roztocích se měřila změna pH a koncentrace Ca^{2+} a $(\text{PO}_4)^{3-}$ iontů. Tvorba a růst HA byl sledován in vitro testem v SBF.

Sekce: Anorganické nekovové materiály II

Využití biopolymerních přísad pro přípravu porézní keramiky

Autor: Svatava Holíková
Ročník: 5.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Eva Gregorová, CSc.

Práce je zaměřena na vyhledávání a studium nových biopolymerních přísad pro přípravu porézní korundové keramiky. Byly odzkoušeny přísady na bázi pšeničného škrobu s velikostí částic v intervalu 20 – 600 mikronů. Přísady byly charakterizovány pomocí rentgenfluorescenční analýzy a termické analýzy (RFA, TG, DTA). Tvar částic byl posuzován ze snímků zhotovených pomocí optického mikroskopu, velikost částic a kinetika bobtnání pórotvorných přísad byla proměřena metodou laserové difrakce. Pro přípravu suspenzí bylo zvoleno dvě metody lišící se způsobem zpracování pórotvorné přísady. Reologické vlastnosti vodných korundových suspenzí s pórotvornými přísadami byly získány pomocí měření prováděných na rotačním viskozimetru. Vzorky porézní keramiky byly připraveny metodou škrobového lití litím suspenzí do kovových forem, zahřátím na teplotu 80 °C s dobou výdrže 120 minut, následným vysušením a výpalem na teplotu 1570 °C. Charakterizace připravených vzorků byla provedena stanovením objemové hmotnosti, zdánlivé a skutečné pórovitosti a celkovým smrštěním.

Sekce: Anorganické nekovové materiály II

Kinetika krystalizace tetragonálního leucitu z amorfního prekurzoru

Autor: Zuzana Chocholoušková
Ročník: 5.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Alexandra Kloužková, CSc.

Leucit je minerál patřící do skupiny feldspatoidů. Vyskytuje se ve dvou polymorfních modifikacích - kubické a tetragonální. Díky jeho vysoké hodnotě koeficientu teplotní roztažnosti je využíván pro výrobu kovokeramických zubních náhrad jejichž součástí je kompozitní materiál, složený ze skelné matrice a vhodně dispergovaných krystalů tetragonálního leucitu. Současná dentální keramika již splňuje požadavky na tvrdost, bioinertnost a stálost barevných odstínů, nicméně jejím hlavním nedostatkem je stále křehkost resp. nízká lomová houževnatost, kterou lze ovlivnit vhodně zvolenou technologií výroby. Předložená práce se zabývá přípravou tetragonálního leucitu cestou výpalu amorfního prekurzoru získaného hydrotermální syntézou a hlavní část je zaměřena na studium kinetických parametrů procesu krystalizace leucitu. K hodnocení stupně přeměny amorfního gelu v krystalický leucit bylo použito difraktogramů XRD získaných v různých časových intervalech při teplotách výpalu 950 °C, 1000 °C a 1050 °C. Bylo prokázáno, že závislost množství leucitu na čase při konstantní teplotě výpalu má esovitý průběh a z možných kinetických rovnic byla experimentálně ověřena rovnice Avrami-Erofeev. Hodnoty kinetických parametrů byly vyhodnoceny pomocí programu ERA. Ze získaných výsledků měření vyplynulo, že řídicím mechanismem studované krystalizace je nukleace.

Sekce: Anorganické nekovové materiály II

Stárnutí keramických materiálů na bázi přírodních surovin

Autor: Jaroslava Křížková
Ročník: 5.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Jana Andertová, CSc., Ing. Vladimír Machovič, CSc.

Práce se zabývá studiem stárnutí a degradace keramického pórovitého materiálu připraveného z přírodních surovin. Byl studován vliv surovinového složení vstupních směsí na tendenci keramického materiálu podléhat objemovým změnám v důsledku hydrotermální expozice. Vedle stanovení nevratných délkových změn keramického střepe po normované hydrotermální expozici byla pro detekci vazebných změn ve střepe využita technika difúzně reflektanční infračervené spektroskopie. Kvalitativní a kvantitativní změny charakteru přítomných hydroxylových skupin v důsledku hydrotermální expozice jsou v přímé korelaci se stanovenými hodnotami nevratné vlhkostní roztažnosti.

Sekce: Anorganické nekovové materiály II

Tenké vrstvy TiO_2 s dopanty vzácných kovů připravené metodou sol-gel

Autor: Jan Krutský
Ročník: 5.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Prof. Ing. Josef Matoušek, DrSc.

Tenké vrstvy oxidu titaničitého připravené metodou sol-gel se v současné době ukazují jako velmi progresivní možnost modifikace povrchů různých materiálů. Především TiO_2 ve formě anatasu vykazuje fotoaktivní vlastnosti, tj. po ozáření určitou částí světelného spektra se objevují např. fotodegradační a superhydrofilní vlastnosti. Tyto schopnosti lze umocnit použitím vhodných látek jako dopantů.

Cílem práce bylo připravit tenké vrstvy s obsahem oxidu titaničitého, které jsou dopované vzácnými kovy (zlato, stříbro a měď). Práce je také zaměřena na různé postupy přípravy solů. Dále je posuzován vliv dopantu na fotoaktivní vlastnosti připravených tenkých vrstev, především na jejich fotodegradační schopnosti. Ty byly testovány na různých modelových kapalinách. Z nich se nejčastěji používá vodný roztok oranže II vzhledem k širokým možnostem použití. Z hlediska použitého dopantu se nadějně jeví vrstvy s přídavkem zlata.

Sekce: Anorganické nekovové materiály II

Hodnocení glazur pro pálenou střešní krytinu

Autor: Michal Kuneš
Ročník: 1. magisterské studium
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Alexandra Kloužková, CSc

Projekt je zaměřen na hodnocení glazur použitých pro pálenou střešní krytinu. Vzhledem k tomu, že glazury mají v tomto případě plnit funkci nejenom estetickou, ale především musí zvyšovat dlouhodobou odolnost proti povětrnostním vlivům, bylo nezbytné hodnotit kromě vlastností glazur samotných i celý systém glazura-střep. Stanovení mikrostrukturních parametrů střepu a glazur bylo provedeno na střešní krytině dodané předním výrobcem, který rovněž dodal dva druhy glazury.

Cílem této práce je uvést metody, které se k testování glazur používají, provést laboratorní zkoušky dvou glazur na keramickém střepu pálené krytiny a zhodnotit vhodnost jejich použití z hlediska dlouhodobé stability výrobku. V práci je uveden způsob přípravy vzorků z keramické střešní krytiny pro glazování a popsáno stanovení mikrostrukturních parametrů vzorků, jako jsou: objemová hmotnost, hmotnostní nasákavost, otevřená pórovitost a dalších vlastností např. pevnosti v ohybu. Hlavní pozornost je věnována určení hodnot koeficientu teplotní roztažnosti glazur i střepové hmoty a stanovení odolnosti proti náhlým změnám teplot u systému glazura-střep. Z provedených analýz byl následně vyhodnocen vhodnější typ glazury pro konkrétní střešní krytinu.

Sekce: Anorganické nekovové materiály II

Vliv alternativních paliv na vyluhovatelnost toxických prvků z portlandského cementu

Autor: Martin Švejda
Ročník: 5.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Doc. RNDr. František Škvára, DrSc.

V současné době jsou při výrobě portlandského cementu užívána z ekonomických a ekologických důvodů místo uhlí jiná alternativní paliva založená převážně na průmyslových či komunálních odpadech. Alternativní paliva obsahují prvky, které nebyly obsaženy v dosud používaném uhlí a jsou zachycovány při výpalu v cementářském slínku. Jsou to např. Zn, Pb, Cu, As, Tl, Cr a další toxické prvky. Není zcela jasné v jaké podobě jsou tyto toxické prvky vázány v cementářském slínku. V současné době, kdy podíl alternativních paliv dosahuje i více než 50 % paliva, vzniká otázka, zda tyto toxické prvky se nevyluhují ze zatvrdlého cementu. Dalším problémem je možnost vyluhovatelnosti stop Al ze zatvrdlého portlandského cementu.

Byly vypracovávány a ověřovány metody stanovení vyluhovatelnosti toxických prvků ze zatvrdlých cementových těles (malt). Jako metoda stanovení byla použita absorpční atomová spektrometrie a polarografie. Bylo sledováno několik českých portlandských cementů a bylo zjištěno, že koncentrace toxických prvků jsou pod EU limitem pro pitnou vodu.

Projekt byl řešen ve spolupráci s VUMO Radotín s.r.o. a Svazem výrobců cementu ČR.

Sekce: Anorganické nekovové materiály II

Optimalizace postupu přípravy bioaktivních vrstev na Ti-slitině (Ti6Al4V)

Autor: Milan Touš
Ročník: 1. magisterské studium
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Dr. Ing. Dana Rohanová

Titanová slitina je materiál používaný k náhradě kostní tkáně v chirurgii a stomatologické chirurgii. Titan je v prostředí lidského těla inertní, netoxický a má vhodné mechanické vlastnosti. K docílení pevného spojení s kostní tkání je nutná úprava povrchu, několikanásobná chemická úprava pomocí silných kyselin a zásad. Dochází tak k vytvoření gelovité struktury povrchu, k pevnému srůstu s kostní tkání a zamezení nežádoucím reakcím mezi kostí a implantátem. Pro urychlení doby vhojování implantátu byly vyvinuty biomimetické postupy tzv. prekalifikace, kde z přesycených roztoků fosforečnanů vápenatých precipitují na povrchu implantátu rozpustnější formy kalcium fosfátů. Cílem práce bylo optimalizovat postup prekalifikace, tzn. zrychlit, zlevnit a zjednodušit přípravu této vrstvy. Experimenty bylo zjištěno, že pro vznik bioaktivně chovající se vrstvy postačuje už 6-ti nebo 24 hodinová expozice v přesyceném roztoku k okamžitému srážení hydroxyapatitu na povrchu implantátu a tedy ke zkrácení doby vhojování v reálném prostředí lidského těla.

Sekce: Anorganické nekovové materiály II

Příprava a vlastnosti pórovitého hydroxyapatitu

Autor: Vítová Vendula
Ročník: 5.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Jana Andertová, CSc.

Keramické biomateriály určené pro náhradu nemocných nebo poškozených částí kostních tkání představují současný vrchol vývoje a využití progresivních keramických materiálů. Materiály na bázi hydroxyapatitů patří do skupiny bioaktivní keramiky stimulující kostní apatit. Práce se zabývá přípravou pórovitého hydroxyapatitu metodou srážecí titrace. Byl sledován vliv tepelného zpracování produktu v intervalu teplot 150 – 700 °C na vybrané chemické a fyzikální vlastnosti. Na základě provedených testů byly vyhodnoceny optimální podmínky procesu přípravy pro získání produktu požadovaných vlastností blízkých se vlastnostem kostní tkáně.

Sekce: Anorganické nekovové materiály II

Vlastnosti porézní ZrO_2 keramiky

Autor: Kateřina Závorská
Ročník: 5.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Doc. Ing. Jiří Havrda, CSc.

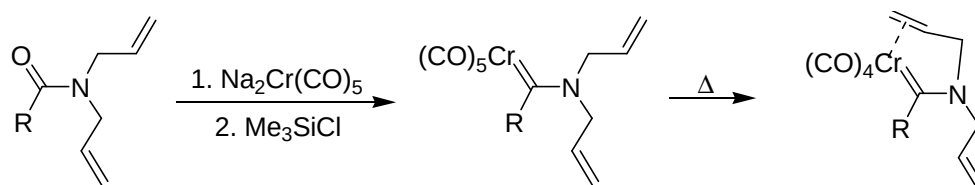
Keramické materiály jsou zajímavou oblastí pro získání biomateriálů určených k výrobě implantátů. Vlastnosti biokeramiky ovlivňuje mnoho faktorů jako např. velikost částic, složení, pórovitost, povrch, defekty, krystaličnost. Tato keramika je vyvíjena za účelem dosažení srovnatelných vlastností s kostí. Při přípravě je hlavním cílem sjednotit fyzikální a mechanické vlastnosti, na které jsou kladeny přísné požadavky (mechanická pevnost, Youngův modul pružnosti, lomová houževnatost, korozní vlastnosti, chemická čistota, biokompatibilita). Práce se zabývá studiem fyzikálních a mechanických vlastností zirkoničité porézní keramiky připravené litím z vodné suspenze na pórovitý blok. Pórovitost je řízena obsahem vyhořívajícího pórotvorného činidla ve vodné suspenzi. Jsou studovány vlastnosti syrových, přežahnutých i slinutých těles.

Sekce: Organická chemie IA

Příprava nových nenasycených aminokarbenových komplexů chromu a železa pro elektrochemické studie

Autor: Petra Slavíková
Ročník: 1. magisterského studia
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.

Aminokarbenové komplexy chromu a železa byly připraveny reakcí *N,N*-diallylamidů karboxylových kyselin s $\text{Na}_2\text{Cr}(\text{CO})_5$ resp. $\text{Na}_2\text{Fe}(\text{CO})_4$ a trimethylchlorsilanem. V případě chromu vznikly nechelatované aminokarbenové komplexy, které byly dále termicky chelatovány. Chelatované komplexy železa vznikaly z *N,N*-diallylamidů karboxylových kyselin přímo.

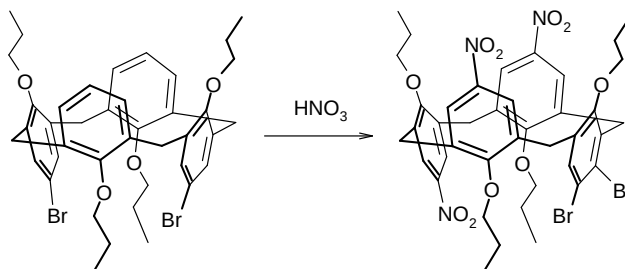


Sekce: Organická chemie IA

Neobvyklé ipso-substituce bromderivátů calix[4]arenu

Autor: Filip Šembera
Ročník: 1. magisterského studia
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Ing. Jan Budka, Ph.D.

Mezi velmi efektivní receptory aniontů, jejichž syntézou se naše laboratoř zabývá, patří distální bis(ureido)deriváty calix[4]arenu, v kónické i 1,3-alternující konformaci. Hlavním úskalím syntézy je příprava precursorů - distálních dinitroderivátů calix[4]arenu, které se získávají několikastupňovou syntézou s náročnými chromatografickými separacemi. Z tohoto důvodu byla navržena syntéza ze snadno dostupných dibromderivátů, kdy by mělo docházet k bromaci nesubstituovaných jader. Za podmínek nitrace dýmavou kyselinou dusičnou ale dochází k *ipso*-substituci jednoho nebo více atomů bromu. Jedním z produktů, jejichž vznik se v současné době pokoušíme optimalizovat, je zobrazený inherentně chirální dibrom-trinitrotetrapropoxycalix[4]aren v 1,3-alternující konformaci.

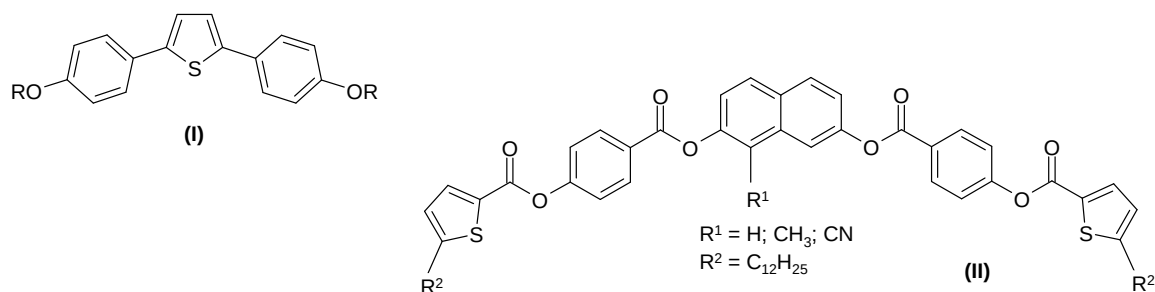


Sekce: Organická chemie IA

Kapalné krystaly lomeného tvaru s 2,5-disubstituovanými thiofenovými jádry

Autor: Petr Polášek
Ročník: 5.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

Naše pracovní skupina se již delší dobu zabývá syntézou kapalných krystalů lomeného tvaru. Jako další strukturní alternativu jsme se pokusili využít 2,5-disubstituovaný thiofen jako centrálního jádra (I), ale též do postranního řetězce (II). Tato práce pojednává o syntéze těchto molekul a jejich kapalně krystalických vlastnostech.

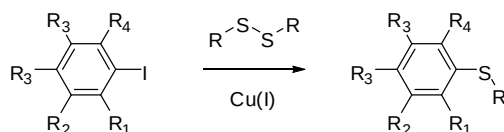


Sekce: Organická chemie IA

Katalytický oxidativní cross-coupling aryljodidů s disulfidy Studium mechanismu a syntetického rozsahu reakce

Autor: Michal Korf
Ročník: 5.
Ústav: Ústav organické chemie a biochemie AV ČR v.v.i.
Školitel: Ing. Jiří Šrogl, Ph.D.

Cross-couplingová reakce aryljodidů s organickými bisulfidy je katalyzována měďnými solemi. Syntetické a mechanistické aspekty reakce byly studovány v závislosti na druhu použitého elektro-donorního činidla/redukovačla. Bio-mimetická ko-katalýza/redukce askorbovou kyselinou je představena jako nová metoda k udržení Cu katalyzátoru v aktivním stavu.



Sekce: Organická chemie IA

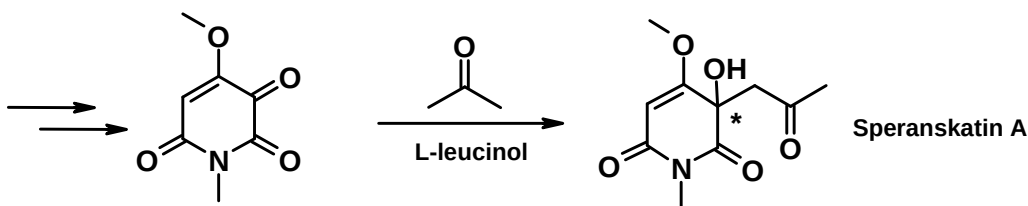
Syntéza Convolutamydinu A a Speranskatinu A.

Autor: Ondřej Kysilka
Ročník: 5.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc., Prof. Pavel Kočovský

Aminoalkoholy na bázi přírodních aminokyselin mohou sloužit jako účinné katalyzátory pro aldolovou kondenzaci aktivovaných ketonů s acetonem. Tuto metodiku jsem použil pro závěrečný krok v syntéze přírodních látek Convolutamydinu A a Speranskatinu A.

Výchozí keton pro přípravu Speranskatinu A jsem připravil třístupňovou syntézou z dimethyl-3-oxoglutarátu. Aldolová kondenzace s acetonem s použitím L-leucinolu jako katalyzátoru poskytla s vysokým enantiomerním výtěžkem produkt totožný s přírodní látkou, zatímco s pomocí D-leucinolu jsem získal produkt s opačnou konfigurací.

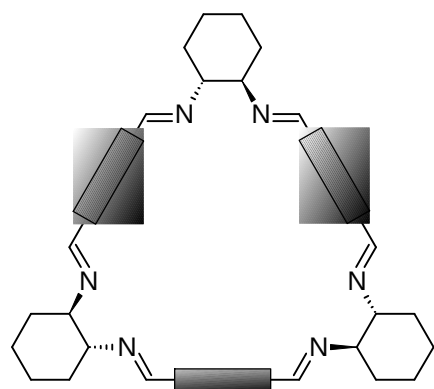
Analogicky jsem aldolovou kondenzací acetonu s komerčně dostupným ketonem syntetizoval přírodní Convolutamydin A i jeho enantiomer. Při sledování reakce jsem pozoroval s rostoucí konverzí neobvyklý nárůst enantiomerní čistoty produktu. Proto jsem podrobně studoval i mechanismus těchto aldolových kondenzací.



Sekce: Organická chemie IA

Syntéza rigidních polyaromatických dialdehydů a jejich následná [3+3] cyklokondenzace s *trans*-1,2-diaminocyklohexanem

Autor: Jiří Hlinka
Ročník: 1. magisterského studia
Ústav: Ústav organické chemie (ÚOCHB AV ČR)
Školitel: Dr. Ing. Jana Hodačová



Literárně popsaná kondenzace tereftaldehydu s *trans*-1,2-diaminocyklohexanem poskytuje ve velkém výtěžku makrocyclickou hexa-Schiffovu bázi trojúhelníkového tvaru. Cílem této práce je studium cyklokondenzační reakce s dalšími rigidními dialdehydy. Bylo syntetizováno několik dialdehydů o různých délkách řetězců, které byly následně využity k přípravě trojúhelníkových makrocycklů obecné struktury **1**. Tyto hexa-Schiffovy báze byly dále redukovány na příslušné makrocyclické hexaaminy.

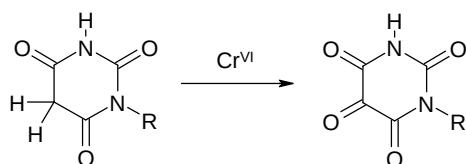
Fragment výchozího dialdehydu

Sekce: Organická chemie IA

Syntéza *N*-substituovaných alloxanů pro přípravu derivátů flavinu

Autor: Viktor Mojř
Ročník: 1. magisterského studia
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Ing. Radek Cibulka, Ph.D.

N-substituované alloxany se osvědčily jako vhodné prekurzory pro přípravu 3-substituovaných derivátů flavinu. Jejich využití však bylo dosud omezeno pouze na 3-methylalloxan. Dosud totiž nebyla publikována obecná metoda pro přípravu *N*-substituovaných alloxanů, které by umožňovaly přípravu flavinů s různou skupinou v poloze 3-.



R = CH₃, C₄H₉, B₈H₁₇, C₁₂H₂₅, Ph, Bn

Schéma 1

V práci byl navržen postup pro přípravu *N*-substituovaných alloxanů založený na oxidaci *N*-substituovaných barbiturových kyselin účinkem sloučenin obsahujících šestimocný chrom (Schéma 1). Substituované barbiturové kyseliny byly získány kondenzací příslušných močovín s kyselinou malonovou, resp. diethyl-malonátem.

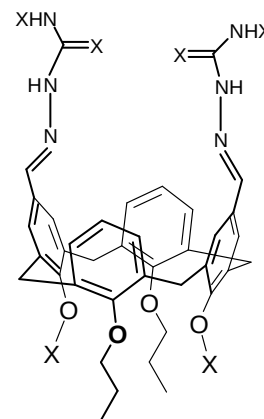
Sekce: Organická chemie IA

Modifikace (thia)calix[4]arenového skeletu

Autor: Tomáš Vrubl
Ročník: 5.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Ing. Ondřej Kunderát

Mezi velmi dobré aniontové receptory patří různé deriváty semikarbazonů. Této skutečnosti jsme využili při syntéze (thio)semikarbazonových derivátů calix[4]arenu v *konické* a *1,3-alternující* konformaci. Komplexační vlastnosti připravených derivátů byly zkoumány pomocí ¹H NMR a UV-Vis spektroskopie.

Druhým tématem je příprava proximálního dipropoxy-thiacalixarenu pomocí disiloxanového přemostění, následná alkylace a odstranění chránicí siloxanové skupiny. V současné době se zabýváme dalšími možnostmi derivatizace uvedeného thiocalixarenu a jejich optimalizací.

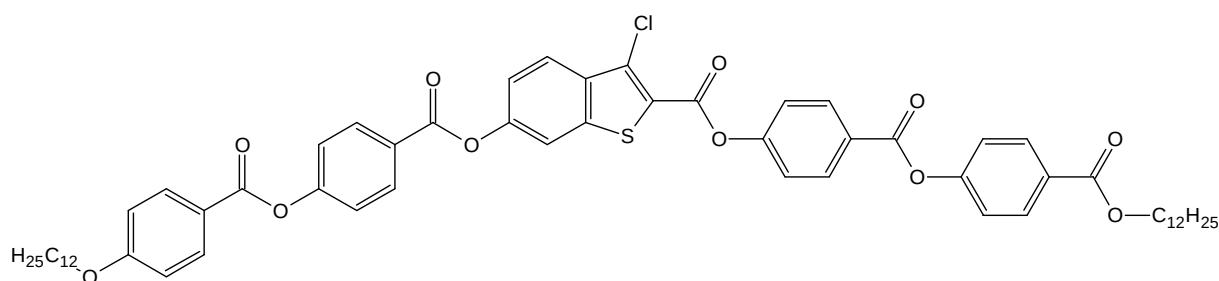


Sekce: Organická chemie IA

Syntéza nových lomených kapalných krystalů na bázi 2,6-difunkcionalizovaného benzo[b]thiofenu

Autor: Petr Špaček
Ročník: 1. magisterského studia
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

Byla připravena modelová struktura nového kapalného krystalu lomeného tvaru. Syntéza vychází z chráněné 4-hydroxysořicové kyseliny, z níž lze sledem reakcí připravit centrální jádro, tj. 3-chlor-6-hydroxybenzo[b]thiofen-2-karboxylovou kyselinu, a následně cílovou strukturu. Bude diskutována syntéza, její problémy a odlišnosti od příbuzných strukturních motivů, a mesomorfní vlastnosti nového materiálu.

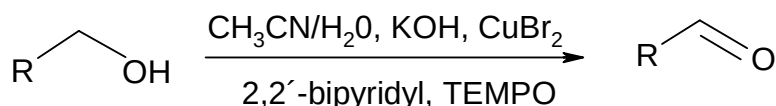


Sekce: Organická chemie IA

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

Autor: Kateřina Řeháková
Ročník: 1. magisterského studia
Ústav: 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.



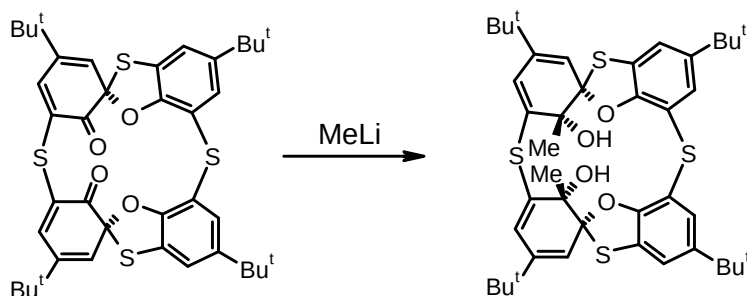
Byla studována oxidace primárních alkoholů - benzylalkoholu, cyklohexylmethanolu, cyklopentylmethanolu a hexanolu systémem Cu^{II} -TEMPO s 2,2'-bipyridylem nebo fenanthrolinem jako ligandy. Za podmínek, uváděných v literatuře, bylo dosaženo pouze nízkých konverzí. Zkoumaly se tedy jiné podmínky reakce, za nichž bylo dosaženo vyšších konverzí a výtěžků příslušného aldehydu. Konverze a výtěžky byly stanoveny plynově chromatograficky metodou vnitřního standardu.

Sekce: Organická chemie IB

Spirosloučeniny thiacalixarenů

Autor: Kateřina Polívková
Ročník: 1. magisterského studia
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Ing. Markéta Šimánová, Prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Mono- a bis-spirosloučeniny thiacalix[4]arenů vznikají reakcí p-terc-butylthiacalix[4]arenů s nesubstituovaným spodním okrajem s chloraminem T. Tyto sloučeniny jsou vhodnými výchozími látkami k získání derivátů thiacalix[4]arenů, které jsou nedostupné přímou syntézou. Jednou z možností je provést adici organokovových činidel na karbonylovou skupinu. Následná rearomatizace produktů této reakce triethylsilanem by mohla vést k mono- případně dialkyl derivátům. Úspěšně byly uskutečněny adice MeLi a MeMgI. Problém těchto reakcí představuje vznik velkého množství látek, které jsou špatně oddělitelné. Přístupnost karbonylových skupin je zjišťována reakcí s objemnějšími činidly, jako je BuLi.

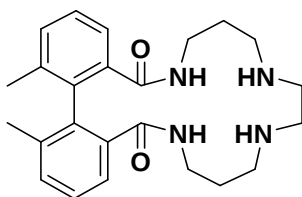


Sekce: Organická chemie IB

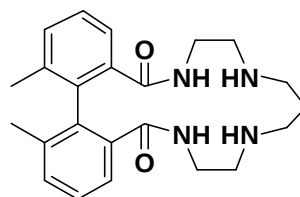
Axiálně chirální makrocyclické polyaminy

Autor: Kristýna Bürglová
Ročník: 1. magisterského studia
Ústav: ÚOCHB AV ČR
Školitel: Dr. Ing. Jana Hodačová

Cílem práce je syntéza nových makrocyclických polyaminů obsahujících axiálně chirální bifenylovou jednotku. Byly připraveny makrocykly **1** a **2** reakční sekvencí, která vychází ze selektivně chráněných lineárních tetraaminů a kyseliny 6,6'-dimethylbifenylo-2,2'-dikarboxylové. Makrocykly byly syntetizovány jak v racemické, tak opticky aktivní formě. Bude následovat studium komplexačních vlastností laktámů **1** a **2** a také tetraaminů, které vzniknou jejich redukcí, na které v současné době pracuji.



1



2

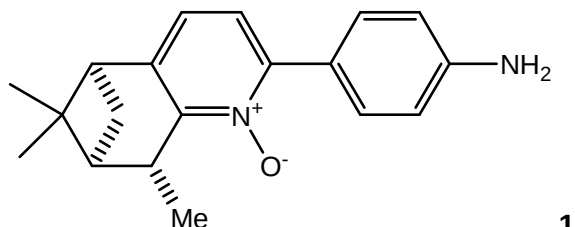
Sekce: Organická chemie IB

Syntéza nového typu katalyzátoru pro asymetrické allylace

Autor: Kryštof Šigut
Ročník: 5.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc., Prof. Pavel Kočovský, Dr. Andrei Malkov

Allylace aromatických aldehydů allyltrichlorsilanem, vedoucí ke vzniku chirálních allylalkoholů, může být efektivně katalyzována chirálními Lewisovými bázemi, např. různými deriváty pyridin-*N*-oxidu. Cílem mého projektu byla syntéza nového typu katalyzátoru, lišícího se od předchozích aminoskupinou na fenylovém kruhu.

Výchozí látkou pro syntézu byl (*R*)-(-)-isopinokamfeol, který jsem převedl na chirální nenasycený bicycklý intermediát. Po jeho cyklizaci s Kröhnkeho solí jsem po sérii reakčních kroků získal cílový katalyzátor **1**, který jsem následně testoval v modelové reakci s benzaldehydem. Ukázalo se, že přítomnost aminoskupiny v pozici 4 fenylového kruhu snižuje enantioselektivitu reakce.



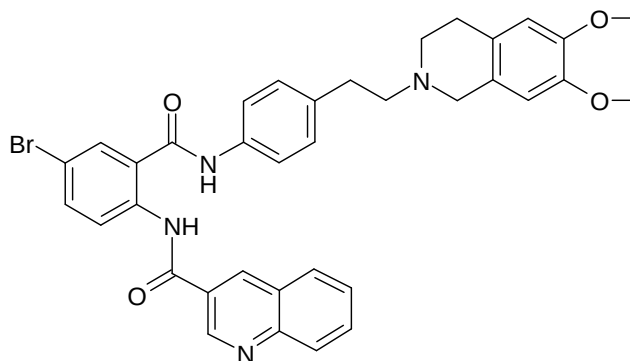
Sekce: Organická chemie IB

Syntéza tariquidar derivátů, inhibitorů ABCB1 transportérů

Autor: Alexandra Bílá
Ročník: 5.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Burkhard König (Univerzita Regensburg)

Tkáňová dostupnost protinádorových léků pro léčbu maligních mozkových nádorů je snižována činností skupiny ABC transportérů, především ABCB1 transportérem. Účinkem inhibitorů ABCB1 je možné hladinu cytostatik v mozku zvýšit. Jako velmi efektivní inhibitor se ukázal tariquidar. Při jeho testování bylo zjištěno, že výrazně lepšího účinku by bylo možno dosáhnout snížením jeho lipofility.

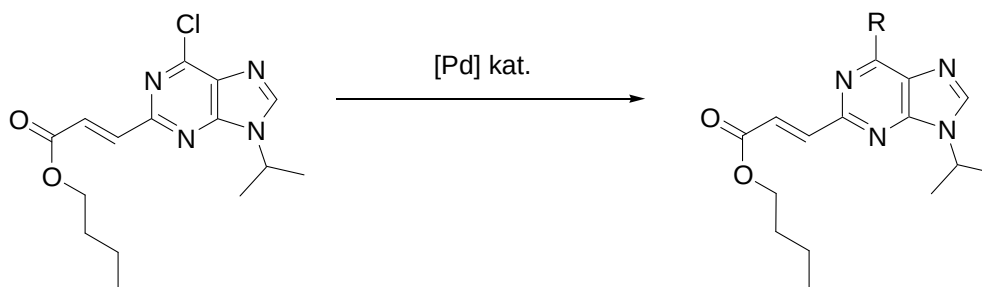
Při přípravě bromtarquidaru jsme vycházeli z kyseliny antranilové a po pětistupňové syntéze jsme dospěli k celkovému výtěžku 38%. Tento bromderivát jsme pak použili jako prekurzor pro mědí katalyzovaný *N*-aryl coupling, s cílem připravit další deriváty se sníženou lipofilitou.



Sekce: Organická chemie IB

Příprava a studium reaktivity 9-substituovaných 2- nebo 6-chlorpurinových derivátů

Autor: Markéta Šmídková
Ústav: Ústav organické chemie
Ročník: 1. magisterského studia
Školitel: Prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.



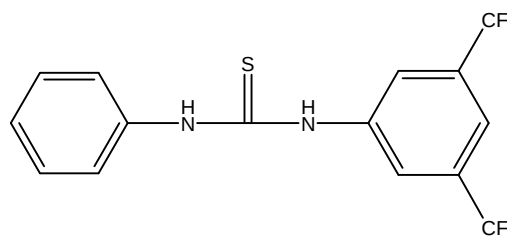
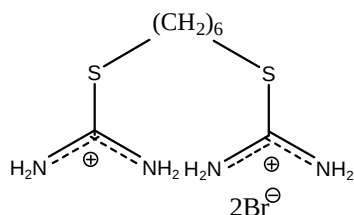
Cílem této práce je příprava 9-benzyl-2-chlor-6-(α -hydroxybenzyl)purinu a 2-(butyl-propen-1-yl-3-óat)-6-chlor-9-isopropylpurinu a prozkoumat reaktivitu atomu chloru v poloze 2 resp. 6 purinového jádra v některých palladiem katalyzovaných „cross-coupling“ reakcích. K modifikaci purinového jádra byla jako vhodná metoda použita „cross-coupling“ reakce chlorpurinů s arylboronovými kyselinami (Suzuki-Miyaura) a dále aminace, kde jsme se pokoušeli substituovat atom chloru za primární a sekundární aminy. U 6-chlorpurinového derivátu byl vyzkoušen „cross-coupling“ s terminálními alkyny (Sonogashira) jako další možnost derivatizace purinového jádra.

Sekce: Organická chemie IB

Isothiuroniové soli nejen jako intermediáty výroby thiolů

Autor: Marta Sládková
Ročník: 5.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.

Byla připravena série bisisothiuroniových solí, jakožto potenciálních receptorů aniontů. Komplexy těchto solí s biskarboxyláty byly studovány pomocí rentgenostrukturní analýzy. Dále se práce rovněž zabývá různě N,N' -disubstituovanými thiomocovinami a jejich S -alkylovanými analogy. Jejich chování během komplexace s tetrabutylammonium bromidem bylo zkoumáno pomocí UV/VIS spektroskopie. Byla změřena i míra komplexace s cyklohexenonem pro možnost eventuální organokatalýzy (např. Baylis-Hillmanova reakce).

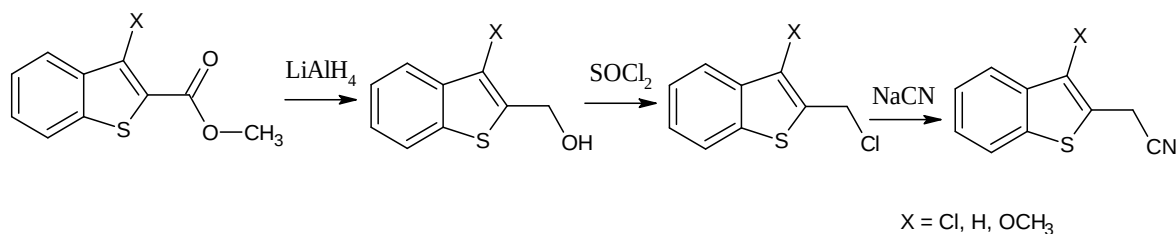


Sekce: Organická chemie IB

Studium reaktivity derivátů benzo[*b*]thiofenu

Autor: Arnošt Seidler
Ročník: 1. magisterského studia
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Ing. Václav Kozmík, CSc.

Práce se zabývá studiem přípravy a reaktivity 3-substituovaných 2-(chlormethyl)-benzo[*b*]thiofenových derivátů. Sérií reakcí bylo prokázáno, že u těchto sloučenin substituent v poloze 3 velkou měrou ovlivňuje reaktivitu methylenové skupiny v poloze 2. Konkrétně, elektronakceptorní substituent podporuje následné alkylace na methylenové skupině. Naopak, elektrondonorní skupina tyto alkylace potlačuje a podporuje následné paralelní reakce v poloze 2 na benzo[*b*]thiofenovém skeletu.



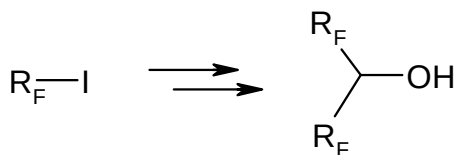
Sekce: Organická chemie IB

Perfluorované rozvětvené stavební bloky

Autor: Mario Babuněk
Ročník: 1. magisterského studia
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Cílem mé práce je syntéza vysoce fluorovaných rozvětvených stavebních bloků jako intermediátů pro fluorofilní ligandy. Jako výchozí sloučeniny jsem s výhodou použil levné perfluoralkyljodidy, které jsem transformoval na odpovídající perfluoralkylmagnesiumbromidy pomocí nízkoteplotní transmetalace ethylmagnesiumbromidem. Následně jsem z těchto intermediátů připravil reakcí s diethyl-karbonátem perfluorované ketony, které jsem převedl redukcí pomocí BH₃ na odpovídající sekundární alkoholy. 7*H*-perfluortridekan-7-ol poskytl reakcí s methyl-triflátem odpovídající methyl-ether. V současné době studuji přípravu triflátů polyfluorovaných sekundárních alkoholů a jejich reaktivitu.

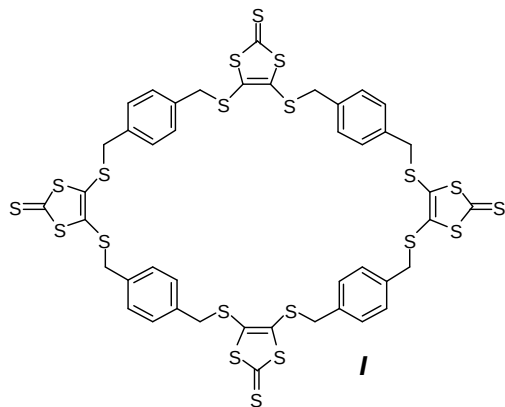
Pomocí *ab initio* a DFT metod jsem analyzoval rozdíly v elektronové distribuci fluorovaných a nefluorovaných triflátů sekundárních alkoholů.



Sekce: Organická chemie IB

Syntéza thiamakrocyklů pro komplexaci fullerenu

Autor: Michal Buchta
Ročník: 1. magisterského studia
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Ing. Petr Holý, CSc.



Práce obsahuje vstupní informace o možnosti přípravy thiamakrocyklů uvažovaných pro komplexaci fullerenu. Makrocyclická struktura je vytvářena z 4,5-bis(2-kyanoethylthio)-1,3-dithiol-2-thionu jako bifunkčního stavebního prvku, jehož elektronově bohatý charakter je důležitý pro uvažovanou komplexaci. Navíc z této struktury lze ve dvou krocích bazí odstranit kyanoethyltové skupiny a generované thiolátové skupiny postupně alkylovat. S využitím 1,4-bis(brommethyl)benzenu jako druhé komponenty lze vhodným sledem reakcí dospět k thia-makrocyklu **I**, jehož dutina velikostí odpovídá fullerenu C₆₀.

Sekce: Organická chemie II

Příprava a optimalizace přípravy amidinů

Autor: Petr Kovaříček
Ročník: 3.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.

Z pohledu organokatalýzy či symptomatické medikace je jedním ze zajímavých témat studium amidinů. Tato velmi široká skupina látek zahrnuje i dnes používané či již nepoužívané aktivní farmaceutické substance např. benzodiazepinového typu a mnoho dalších. Dnes se hovoří o amidinech v souvislosti s nemocemi způsobenými priony (Gerstmann-Sträussler-Scheinkerův syndrom, FFI, CWD, BSE, Creutzfeld-Jakobova a Alzheimerova choroba) jako o potenciální struktuře stabilizující přirozené bílkovinné struktury v těle. Z organokatalytických vlastností je třeba zmínit katalýzu aldolizací či například stereoselektivní katalýzu Dielsovy-Alderovy reakce. Zcela zřejmé je, že amidiny mohou vytvářet komplexy s anionty stejně jako mohou být ligandy přirozených somatických receptorů.

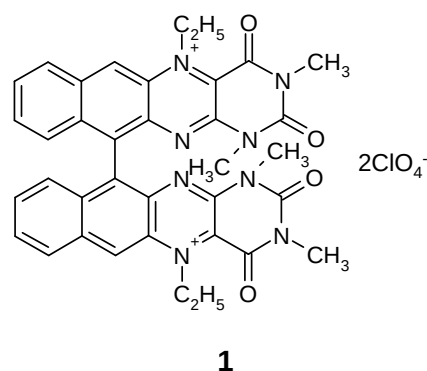
Metod přípravy amidinů je celá řada, stejně tak široký je i výběr výchozích reaktantů. Amidiny lze obecně vyrábět z aldehydů, karboxylových kyselin, esterů, esterů orthokyselin, nitrilů, amidů, thioamidů, thioimidů, iminoesterů i amidoximů. Za modelovou reakci pro optimalizaci byla zvolena reakce tereftalodinitrilu s ethylendiaminem za přítomnosti sulfidu fosforečného. Tato reakce je dle experimentů závislá na teplotě, době reagování, ale především na přítomnosti rozpouštědla.

Sekce: Organická chemie II

Studium přípravy a vlastností chirálních flaviniových solí na bázi 1,1'-binaftalen-2,2'-diaminu

Autor: Petra Ménová
Ročník: 3.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Ing. Radek Cibulka, Ph.D.

Flaviniové soli mohou být využity v organické syntéze jako katalyzátory řady oxidačních reakcí. V rámci studia enantioselektivních oxidací katalyzovaných chirálními flaviniovými solemi byla navržena axiálně chirální sloučenina **1** založená na 1,1'-binaftalen-2,2'-diaminu. Pro její syntézu byly testovány dva přístupy: (1) kondenzace azosloučeniny získané z 1,1'-binaftalen-2,2'-diaminu s kyselinou barbiturovou a (2) kondenzace samotného 1,1'-binaftalen-2,2'-diaminu se substituovanými uracily, následovaná uzavřením flavinového skeletu a redukcí získaného N-oxidu. Katalytická účinnost flavinového derivátu **1** byla testována na modelové oxidaci thioanisolu a methyl(naftyl)sulfidu na příslušné sulfoxidy.

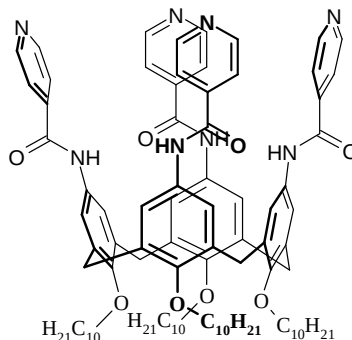


Sekce: Organická chemie II

Supramolekulární asociáty calix[4]arenových amidů

Autor: Oldřich Hudeček
Ročník: 1.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Zavedením vhodného substituentu (např. isonikotinoyl-amino skupiny) na horní okraj calix[4]arenu v *konické* konformaci lze připravit látky s možností tvorby vzájemných asociátů. Zkoumáno bylo především, na jakých faktorech závisí tvorba těchto supramolekulárních struktur a také jakými způsoby lze dané látky připravit. Hlavním cílem byla příprava takového derivátu, z jehož NMR spekter by bylo možné zjistit, jakým způsobem k tvorbě daných asociátů dochází.



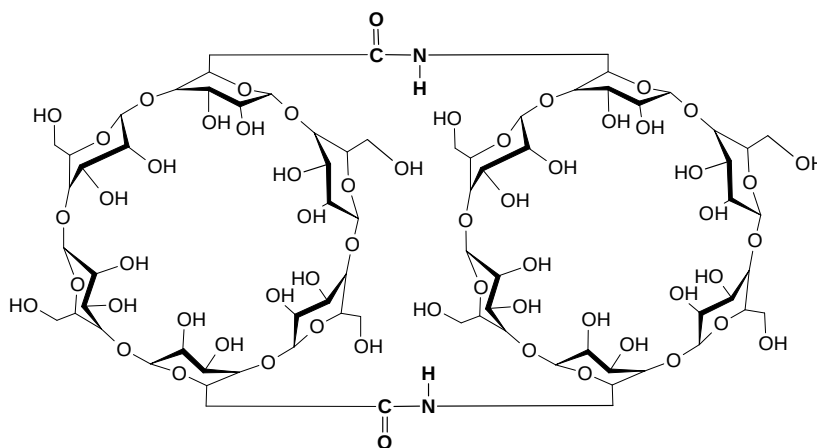
Sekce: Organická chemie II

Syntéza dimeru α -cyklodextrinu spojeného amidovými vazbami

Autor: Petr Koutník
Ročník: 2.
Ústav: Ústav organické chemie (Ústav organické chemie a biochemie AV ČR)
Školitel: Mgr. Tomáš Kraus, Ph.D. (Ústav organické chemie a biochemie AV ČR)

Cílem práce je syntéza dimeru I a studium jeho schopností komplexovat organické molekuly ve vzniklé kavitě. Syntéza vychází ze dvou komponent: dikarboxylové kyseliny a diaminu α -cyklodextrinu. Ten je v prvním kroku syntézy benzylován a dále selektivně debenzylován v polohách 6^A a 6^D za vzniku symetrického diolu. Tato látka je oxidací Dess-Martinovým perjodinanem a následně

chloritanem transformována na dikarboxylovou kyselinu. Při syntéze diaminu je perbenzylovaný diol převeden přes dibromid na diazid, který je poté redukován hydrogenací na diamin. Byly připraveny obě výchozí látky pro přípravu dimeru I. Poslední krok spočívající v tvorbě amidových vazeb je předmětem dalšího studia.



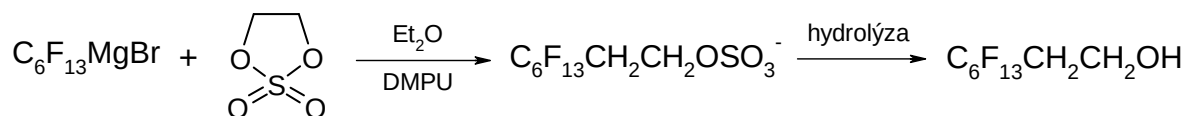
Sekce: Organická chemie II

Nukleofilní substituce s využitím perfluorovaných Grignardových činidel

Autor: Jana Paterová
Ročník: 3.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Doc. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Perfluorovaná Grignardova činidla na bázi perfluoralkyljodidů jsou univerzálními stavebními bloky pro fluorovou chemii. Doposud byly s těmito činidly popsány pouze nukleofilní adice, proto jsme se rozhodli studovat možnost jejich využití pro nukleofilní substituce. Reakce $\text{C}_6\text{F}_{13}\text{MgBr}$ s CH_3OTf je první známou substitucí s využitím perfluorovaných Grignardových činidel, klíčovým je přidavek DMPU.

2-(Perfluoralkyl)ethylalkoholy $\text{C}_n\text{F}_{2n+1}\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ jsou často využívané stavební bloky, jsou ovšem poměrně drahé a komerčně dostupné pouze pro $n = 6, 8$. V rámci výše uvedené studie jsem vyvinula nový univerzální způsob syntézy těchto alkoholů s využitím perfluorovaných Grignardových činidel ($n = 4, 6, 8, 10$) a 1,3,2-dioxathiolan-2,2-dioxidu:



Výtěžek této reakce významně závisí na způsobu zpracování reakční směsi. Nejvýhodnější se ukázala macerace meziproductu (2-(perfluorhexyl)ethylsulfátu) diethyletherem za chladu a následná kombinace jeho zásadité a kyselé hydrolýzy za zvýšené teploty.

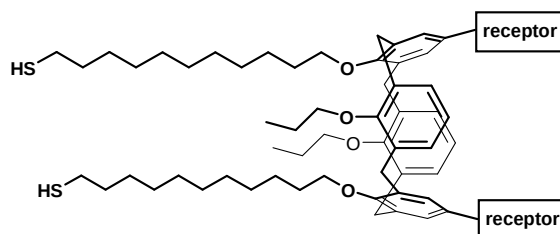
Sekce: Organická chemie II

Syntéza a využití sulfanylderivátů calix[4]arenu v supramolekulární chemii

Autor: Karolína Flídrová
Ročník: 3.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Ing. Michal Himl

Sulfanylovou skupinu lze v supramolekulární chemii využít mnoha různými způsoby. Naším hlavním cílem byla příprava receptoru na bázi calix[4]arenu, substituovaného na dolním okraji dlouhým alkylovým řetězcem zakončeným –SH skupinou, který by umožnil tvorbu SAM (self-assembled monolayers) na povrchu zlata. Horní okraj by nesl zvolený receptor (viz. schéma).

Dalším zajímavým využitím terminální –SH skupiny je tvorba inter- a intramolekulárních disulfidů. Tato vratná reakce by umožňovala uzavření hosta v kavitě hostitele a jeho opětovné uvolnění do roztoku.



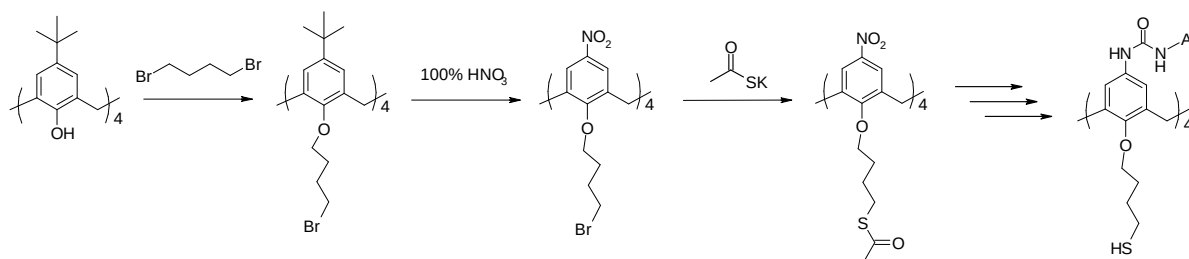
Sekce: Organická chemie II

Syntéza derivátů calix[4]arenu pro přípravu self-assembly systémů na povrchu zlata

Autor: Markéta Zajícová
Ročník: 2.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Ing. Jan Budka, Ph.D.

Calixareny jsou jedním ze základních skeletů, které jsou využívány v supramolekulární chemii pro konstrukci receptorů, senzorů, self-assembly systémů apod.

Cílem této práce je vytvoření derivátů calix[4]arenu, obsahujících na spodním okraji skupiny, které bude možno ukotvit na povrchu zlata (SAM – *self-assembled monolayers*) a zároveň na horním okraji skupiny, které bude možno modifikovat na vhodný receptor. Schema ukazuje syntézu ureido-derivátu, který by měl vytvořit na zlatém povrchu SAM, který bude efektivním receptorem aniontů.

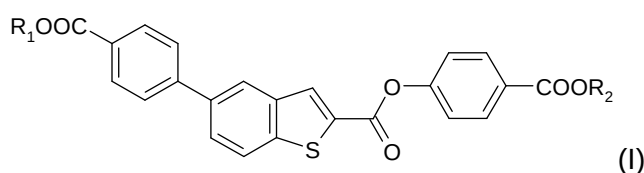


Sekce: Organická chemie II

Syntéza kapalných krystalů s benzo[hienovým centrálním jádrem

Autor: Lucie Řehová
Ročník: 3.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

V rámci systematického studia kapalných krystalů byl v naší pracovní skupině zaveden benzo[b]thiopen jako nový typ centrálního jádra. Jeho 2,6-substituované deriváty vykazovaly vznik nematické, smectické a u chirálních sloučenin vznik ferroelektrické fáze. Také 2,5-disubstituované deriváty vykazovaly velmi zajímavé mesomorfní vlastnosti v širokém teplotním rozsahu. Rozhodli jsme se tedy rozšířit sérii připravených 2,5-disubstituovaných derivátů a syntetizovat nové chirální mesogeny. V příspěvku budou diskutovány syntézy vedoucí k cílovým molekulám (I).



Sekce: Organická technologie I

Stereoselektivní hydrogenace v iontových kapalinách a syntéza iontových kapalin

Autor: Ivana Černá
Ročník: 5.
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Doc. Dr. Ing. Petr Klusoň

Iontové kapaliny jsou velmi moderními rozpouštědlovými systémy, které umožňují zejména v oblasti homogenní katalýzy snadnou separaci produktů z reakční směsi extrakcí a tím i opakované použití homogenního katalyzátoru, který je zároveň v iontově-kapalinové fázi chráněn před působením vzdušného kyslíku a tím je stabilizován. V reakčních systémech iontových kapalin je také možné dosáhnout vysokých hodnot enantioselektivity reakce i aktivity katalyzátoru. Iontové kapaliny rozpouštějící účinně řadu organických, anorganických i organokovových sloučenin vykazují vysokou tepelnou stabilitu a nízkou tenzi par v širokém teplotním rozmezí a jsou považovány za alternativní rozpouštědla pro organickou syntézu. V rámci této práce byl studován vliv některých reakčních systémů vybraných iontových kapalin na dosaženou enantioselektivitu reakce a aktivitu katalyzátoru ve zvoleném modelovém reakčním systému. Byla vytvořena simulační studie opakované vsádkové extrakce používaných iontových kapalin, která umožnila optimalizaci purifikační metodiky a tím i dosažení maximální dosažitelné enantioselektivity reakce vzhledem k optické čistotě použitého katalytického komplexu Ru-BINAP. Rovněž byla navržena a sestavena sonochemická aparatura na přípravu iontových kapalin s cílem minimalizovat množství zbytkových výchozích látek a využití těžkých organických rozpouštědel.

Sekce: Organická technologie I

Imobilizace Rh komplexu

Autor: Lenka Fricová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav organická technologie
Školitel: Ing. Eliška Leitmannová, Ph.D.

Selektivní hydrogenace v homogenní fázi katalyzovaná kovovými komplexy patří mezi velmi důležité procesy organické technologie. Jedním z problémů je ovšem separace a následná regenerace rozpuštěného katalyzátoru. Častým řešením je pak zakotvení katalyzátoru na pevný nosič.

V předložené práci byly studovány imobilizace Wilkinsonova katalyzátoru $\text{RhCl}(\text{PPh}_3)_3$, který lze využít pro hydrogenaci trojných vazeb na dvojně. Imobilizace tohoto katalyzátoru byla prováděna pomocí iontové výměny na nosiče hektorit, montmorillonit K10 a montmorillonit pilířový. Bylo sledováno množství katalyzátoru zakotveného na zvolených nosičích a vliv rozpouštědel (methanol, diethylether, hexan) na heterogenizaci. Charakterizace získaných materiálů byla prováděna pomocí AAS a XRD.

Sekce: Organická technologie I

Oxidace vodného glycerolu

Autor: Václav Juříček
Ročník: 5.
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Doc. Ing. Vratislav Tukač CSc.

Vodný roztok glycerolu je významným odpadem při výrobě methylesteru řepkového oleje. Vzhledem k produkovaným objemům produkovaných glycerínových vod, přesahujícím možnosti biologických čistíren je nutné chemické zpracování. Pokud by se současně podařilo ekonomicky využít odpadní glycerín na technicky významné produkty, vedlo by to ke zlevnění výroby bionafty, což by významně přispělo k podpoře trvale udržitelného rozvoje. Cílem předložené práce byla šetrná oxidace glycerínu Fentonovým činidlem (peroxidem vodíku a ionty železa). Reakce byla realizována ve zkrápěném reaktoru s inertní výplní Raschigových kroužků. Účelem je zapojení vzdušného kyslíku do oxidace. To by snížilo spotřebu peroxidu vodíku. Součástí práce byla identifikace oxidačních produktů a sestavení kinetického modelu sledované reakce. Výsledkem práce bylo porovnání hloubky oxidace a složení produktů oxidace pro ustálené a periodicky modulované provozování reaktoru.

Sekce: Organická technologie I

Hydrogenační aminace 2-(2-hydroxy-ethoxy)-ethanolu

Autor: Kulhánek Jiří
Ročník: 5.
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. J. Trejbal, PhD

Hydrogenační aminace 2-(2-hydroxy-ethoxy)-ethanolu na 2-(2-amino-ethoxy)-ethanol (DGA) za přítomnosti kovového katalyzátoru. Při návrhu procesu bylo rovněž provedeno srovnání vlastností vybraných typových katalyzátorů pro DGA. Byly určeny optimální reakční podmínky. Byly doporučeny parametry pro komerční katalyzátor.

Sekce: Organická technologie I

Příprava oligofenylethynylenů s thiafulvalenovými skupinami

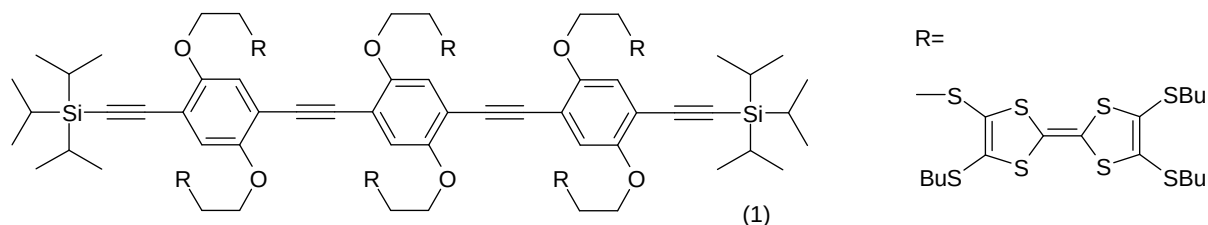
Autor: Šárka Lipnická

Ročník: 5.

Ústav: Ústav organická technologie

Školitel: Ing. Martin Bělohradský, CSc. (ÚOCHAB AV), Doc. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.

Tato práce je součástí projektu na přípravu rigidních oligomerů, tvořených acetylenovými a benzenovými jednotkami, přičemž benzenová jádra oligomerů obsahují elektrondonorní skupiny. Syntéza je zaměřena konkrétně na oligomery obsahující tetrathiafulvalenové uskupení. Jako klíčový meziprodukt byl připraven 1,4 – diiodderivát benzenu obsahující dvě tetrathiafulvalenové funkce. S využitím Sonogashirova kaplinku se podařilo připravit ethynylové meziprodukty a následně první dva zástupce řady oligomerů – dimer a trimetr (1).



Sekce: Organická technologie I

Hydrogenace methyl-fenoxyacetátu s použitím Ni-katalyzátoru

Autor: Ivana Luštická

Ročník: 5.

Ústav: Ústav organické technologie

Školitel: Ing. Eliška Leitmannová, Ph.D.

Methyl(cyklohexyloxy)acetát vzniká hydrogenací aromatického systému methyl-fenoxyacetátu. Je velmi žádanou látkou v parfumářském a potravinářském průmyslu a zároveň může být výchozí látkou pro přípravu allyl(cyklohexyloxy)acetátu, který je velmi ceněný a rozšířený pod komerčním názvem ISOANANAT (ananasové vůně).

Pro hydrogenaci lze využít různé komerční nosičové katalyzátory (zejména Pd/C, Pt/C, Ni/alumina), ze kterých byl podle potřeby Aroma a.s. byl zvolen Ni/Al₂O₃. Nevýhodou tohoto katalyzátoru je nízká selektivita, proto bylo nutno optimalizovat podmínky (teplota, tlak, množství katalyzátoru, přítomnost rozpouštědla). Následně byl přečištěný produkt získaný hydrogenací převeden transesterifikací na allyl(cyklohexyloxy)acetát.

Sekce: Organická technologie I

Katalytické hydrogenace v kapilárním reaktoru

Autor: Petr Martínek
Ročník: 5.
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Doc. Ing. J. Koubek, CSc.

Katalytické hydrogenace jsou jednou z nejdůležitějších reakcí v chemickém průmyslu; nacházejí uplatnění ve velkotonážní chemii i v syntéze chemických specialit. Mezi klíčové vlastnosti katalyzátoru při hydrogenaci patří jeho aktivita, stabilita a selektivita. Studium těchto vlastností v laboratorním prostředí se provádí především v autoklávu tj. v integrálním reaktoru. V tomto konvenčním reaktoru není prakticky možné odhalit deaktivaci katalyzátoru. Konceptně zcela nový reaktor – kapilární reaktor – by mohl být alternativou díky své jednoduchosti, bezpečnosti a rychlosti získání dat. Možností kapilárního reaktoru byly testovány při hydrogenaci modelového alkynu, 3-methyl-1-pentyn-3-olu, na palladiu, který byl nanesen na různých nosičích uvnitř kapiláry. Experimenty ukázaly řadu výhod i překážek při využití tohoto alternativního reaktoru.

Sekce: Organická technologie I

Stereoselektivní syntetický proces přípravy Mivacuria

Autor: Václav Matoušek
Ročník: 5. ročník
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Petr Kačer, PhD., Prof. Ing. Libor Červený, DrSc.

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 vývojem syntetického postupu přípravy opticky čistého intermediátu – (R)-5'-methoxylaudanosu, který představuje základní syntetický stavební blok v syntéze myorelaxancia Mivacuria. Problematika syntézy Mivacuria je nastíněna v jednotlivých, na sebe navazujících reakčních krocích. Zvláštní pozornost je věnována závěrečné fázi syntézy klíčového stavebního bloku – práce porovnává enantioselektivní cestu redukce iminu homogenní asymetrickou transfer hydrogenací s variantou racemické syntézy zakončené optickou rezolucí produktu. Optická rezoluce produktu je koncipována jako diastereoselektivní krystalizace s chirálním partnerem, přičemž byly nalezeny optimální podmínky optické resoluce a metodika odstranění zbytkových rozpouštědel z krystalického produktu. Závěrečná část práce diskutuje další možné přístupy ke klíčovému kroku syntetického postupu, které si kladou za cíl optimalizaci výroby jak z pohledu ekonomického, tak z pohledu provozního.

Sekce: Organická technologie I

Elektrochemické vlastnosti tenkých vrstev TiO_2

Autor: Magdalena Morozová

Ročník: 5. ročník

Ústav: Ústav organické technologie

Školitel: Doc. Dr. Ing. Petr Klusoň, Doc. Ing. Bohumír Dvořák, CSc.

Metoda sol-gel je jednou z nejpoužívanějších technik pro přípravu tenkých vrstev funkčních částic kovových oxidů. Postup je založený na hydrolýze a následné polykondenzaci organických prekurzorů. V této práci jsou vrstvy oxidu titaničitého připravovány v prostředí reverzních micel tvořených z neionogenního tenzidu s komerčním skupinovým názvem Triton X. V jádru micely je obsaženo malé množství vody, ve kterém dochází k hydrolýze alkoxidu titanu a k tvorbě tvarově uniformní částice. Jednotlivé Tritony se liší délkou hydrofilního oxyethylenového řetězce. Vhodnou volbou tohoto surfaktantu lze ovlivňovat tvar, velikost a strukturu výsledných částic, což se může projevit ve vlastnostech připravených vrstev. Tyto odlišnosti jednotlivých vrstev lze pozorovat při elektrochemických měřeních, která se provádějí ve skleněné cele s klasickým tříelektrodovým zapojením. Mezi nejčastěji používané elektrochemické charakterizace patří cyklická voltametrie, lineární voltametrie a OCP. Základní funkcí sledovanou v tomto uspořádání je schopnost uspořádaných nanočástic oxidu titaničitého generovat při osvětlení světlem odpovídající vlnové délky fotoproud.

Sekce: Organická technologie II

Příprava pilířovitých vrstevnatých struktur a jejich využití

Autor: Sarah Becharová
Ročník: 1. magisterského studia
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Eliška Leitmannová, Ph.D.

Práce se zabývá možností imobilizace homogenního Ru katalyzátoru na vybrané anorganické materiály ze skupiny smektitů. Vybraný katalyzátor $[\text{Cp}^*\text{Ru}(\text{kyselina sorbová})]\text{Tf}$ ($\text{Tf} = \text{CF}_3\text{SO}_3^-$), používaný pro hydrogenaci kyseliny sorbové na cis-hex-3-enovou, byl imobilizován pomocí iontové výměny na vybrané anionické minerály, a to na montmorillonit K 10, hektorit a bentonit. Nejvhodnějším minerálem pro imobilizaci se ukázal být montmorillonit. Méně úspěšná byla iontová výměna na hektorit a jako nejméně vhodný se ukázal minerál bentonit. Dalším krokem byla úprava minerálů pomocí pilířování, která je považována za možnost, jak odstranit vliv difúze při imobilizaci. Syntéza pilířů byla úspěšná u všech minerálů, u montmorillonitu se povedlo připravit pilířovitý minerál se stejnou strukturou jako má minerál komerčně dodávaný. Úprava nosičů pilířováním neumožnila imobilizaci tak velkého množství katalyzátoru. Katalyzátor imobilizovaný na MTM K10 iontovou výměnou může být využit k hydrogenaci kyseliny sorbové bez ztráty selektivity.

Sekce: Organická technologie II

Disoluce pevných lékových forem s prodlouženým uvolňováním účinné látky

Autor: Jana Ettelová
Ročník: 3.
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Doc. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.

Cílem práce bylo studovat kinetiku uvolňování účinné látky z přípravku Celaskon Long Effect (Zentiva) formou měření disolučního profilu. Celaskon Long Effect patří mezi léčivé přípravky s prodlouženým uvolňováním účinné látky. Přípravek je podáván ve formě želatinových tobolek, které jsou plněny mikrosférulemi s obsahem účinné látky a šelaku. Na zpomalení uvolňování se podílí jak želatinový obal, tak i šelak v mikrosférulích.

Kinetika uvolňování byla sledována v disolučním přístroji Zotax AT7 pádélkovou metodou. Disoluční profily byly konstruovány jako časové závislosti procentuálních podílů uvolněné účinné látky, které byly vypočteny z koncentrací účinné látky v odebraných vzorcích disolučního média na základě UV spektrofotometrického stanovení.

Kinetika rozpouštění byla sledována jak u celé lékové formy, tak i u mikrosférulí zbavených želatinové tobolky. V rámci sledování vlivu prostředí byly disoluční testy provedeny v disolučních médiích s různým pH a při různé teplotě. Kromě klasického zpracování naměřených dat byly regresní analýzou stanoveny i kinetické parametry disoluce.

Sekce: Organická technologie II

Ketalizace ethyl-acetoacetátu

Autor: Petr Jansa
Ročník: 1. magisterské studium
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Prof. Ing. Libor Červený, DrSc., Ing. Eliška Leitmannová, Ph.D.

Práce se zabývá návrhem technologického postupu výroby vonných látek na bázi 1,3-dioxolanových sloučenin, které vznikají kondenzací acetoacetátů s glykoly. Na základě poznatků získaných literární rešerší byly navrženy počáteční reakční podmínky a ve vlastní experimentální části byla studována zejména reakce ethyl-acetoacetátu s ethylenglykolem, resp. 1,2-propylenglykolem. Byly vypracovány analytické metody pro sledování průběhu reakce a studovány základní parametry reakce, ovlivňující její průběh, tak, aby výsledkem byl návrh podmínek pro poloprodukt v a. s. Aroma – Židovice. Pozornost přitom byla věnována jak reakčním podmínkám, tak senzorickému hodnocení produktů.

Připravené vonné látky mají široké uplatnění v parfumářském průmyslu a při přípravě ve větším měřítku lze očekávat výrazně vyšší výtěžky, než jakých bylo dosaženo při laboratorní přípravě.

Sekce: Organická technologie II

Oxidativní stres a jeho diagnostika

Autor: Hana Lupoměská
Ročník: 3.
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Předkládaná práce si kladla za cíl postihnout a kvantifikovat biomarkery oxidativního stresu v řadě tělních tekutin a umožnit tak včasnou diagnostiku řady onemocnění indukovaných oxidativním stresem. Princip metody spočívá v kvantifikaci specifických látek - „biomarkerů“ a to 8-isoprostanu, malondialdehydu a 8-hydroxynonenalu, jejichž koncentrační hladiny jsou v příslušné části organismu zvýšeny v důsledku probíhajících patologických procesů v porovnání s fyziologickým stavem organismu. Biologickými matricemi byly krevní plasma, dechový kondenzát, moč, mozkomíšní likvor ad. Výsledkem experimentální činnosti v této oblasti je vypracování zcela originální metody kombinující vysoce specifickou separaci biomarkerů – immunoafinitní extrakci, jejíž principem je reakce monoklonální protilátky s příslušným markerem, s dostatečně citlivou a selektivní detekční metodou – hmotnostně-spektrometrickou analýzou, která umožňuje kvantifikaci uvedených specifických látek. Vypracovaná metoda může být charakterizovatelná vysokou citlivostí, nízkou chybou stanovení (<9 %) a vysokou reprodukovatelností.

Sekce: Organická technologie II

Studium selektivity a mechanismu asymetrické transfer hydrogenace C=N vazby

Autor: Radek Majdloch
Ročník: 3.
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Petr Kačer, Ph.D., Ing. Marek Kuzma, Ph.D.

Předkládaná práce se zabývá studiem selektivity a mechanismu asymetrické transfer hydrogenace C=N vazby přítomné ve strukturním skeletu substituovaných dihydroisochinolinů na homogeních Ru(II) katalytických systémech Noyoriho typu. Ke studiu a vyhodnocení kinetiky, enantioselektivity, mechanismu, reakčních parametrů a vlivů na průběh hydrogenace byla použita NMR spektroskopie. Experimentálně získaná data pak dále mohou sloužit jako vodítko pro molekulárně dynamické modelování za účelem návrhu struktur nových katalytických systémů s požadovanou selektivitou. V předkládané práci jsou prezentovány výsledky, které lze považovat za příspěvek k popsání zatím dostatečně neobjasněného reakčního mechanismu asymetrických transfer hydrogenací na rutheniových katalytických systémech Noyoriho typu.

Sekce: Organická technologie II

Studium oxidace cyklopentenu azoxidem na cyklopentanon

Autor: Jakub Otmar
Ročník: 1. magisterského studia
Ústav: Ústav organická technologie
Školitel: Ing. Jiří Krupka

Cyklopentanon je důležitou surovinou chemického průmyslu. Největší množství cyklopentanonu se v současné době vyrábí z kyseliny adipové a jejích esterů. Jednou z dalších možných cest produkce cyklopentanonu je využití petrochemických surovin. Výchozí látkou je pak cyklopenten.

Tato práce se zabývá experimentálním výzkumem nekatalytické oxidace cyklopentenu na cyklopentanon azoxidem v kapalně fázi. Experimenty byly prováděny v nerezovém autoklávu Parr o objemu 50 ml. Kapalně vzorky reakční směsi byly analyzovány pomocí plynové chromatografie. K identifikaci vedlejších produktů byla využita metoda GC/MS. Cílem práce bylo nalezení optimálních podmínek reakce a identifikace vedlejších produktů. Pozornost byla věnována aldolizační reakci cyklopentanonu, která je příčinou vzniku většiny vedlejších produktů.

Sekce: Organická technologie II

Vývoj neinvazivní diagnostiky *Asthma Bronchiale*: stanovení biorytmu sledovaných markerů

Autor: Jan Přech
Ročník: 1.
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Petr Kačer, Ph.D.

Předkládaná práce je součástí řešení širší problematiky „Vývoj neinvazivní diagnostiky *asthma bronchiale*“, který je realizován na Ústavu organické technologie VŠCHT Praha ve spolupráci s Klinikou nemocí z povolání 1. LF UK a VFN. Cílem tohoto projektu je vyvinout spolehlivou, rychlou a nenáročnou neinvazivní metodu pro diagnózu *asthma bronchiale*, využívající monitorování hladin biomarkerů - leukotrienů v kondenzátu vydechaného vzduchu pomocí vysoce citlivé a selektivní analytické metody - HPLC/MS. Předkládaná práce si kládla za cíl popsat změny hladin biomarkerů výše zmíněného onemocnění v průběhu 24 hodin. Znalost těchto změn je důležitá pro přesné určení diagnózy bez ohledu na dobu odběru kondenzátu vydechaného vzduchu. Pro zpracování vzorků byla úspěšně aplikována již vyvinutá separační metoda immunoafinitní extrakce a hmotnostně spektrometrické analýzy. Výsledkem experimentální části je popis vývoje hladin markerů v průběhu 24 hodin. Během dne, kdy je tělo aktivní, dochází k rovnoměrnému růstu hladin markerů a ve spánku k jejich poklesu. Paralelně byl též zkoumán vývoj hladiny 8-isoprostanu jakožto markeru oxidativního stresu.

Sekce: Organická technologie II

Selektivní hydrogenace substituovaných aromatických nitrilů

Autor: Sedláková Veronika
Ročník: 1. magisterské studium
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Prof. Ing. Libor Červený, DrSc., Ing. Klára Kopřivová

Práce se zabývá kinetikou hydrogenace substituovaných aromatických nitrilů na aminy, mající využití jako meziprodukty chemických specialit. Aromatické nitrily byly hydrogenovány na směs primárních a sekundárních aminů. Ke studiu byl použit o-, m- a p-tolunitril. Byl studován vliv polohy substituentu, vliv katalyzátoru a vliv rozpouštědla na průběh hydrogenační reakce. Jako katalyzátory byly pro hydrogenace použity Raneyovy katalyzátory - RaNi a RaMo a jejich modifikované formy. Práce byla zaměřena na studium průběhu hydrogenace, zejména rychlosti hydrogenace a selektivity k primárnímu produktu. Pro zjištění požadovaných závislostí byla provedena řada hydrogenačních reakcí s různými kombinacemi substrátu, katalyzátoru a rozpouštědla.

Sekce: Organická technologie II

Syntéza Mayolu

Autor: Martina Štekrová
Ročník: 3.
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Prof. Ing. Libor Červený, DrSc., Ing. Eliška Leitmannová, Ph.D.

Cílem práce je stanovení optimálních podmínek pro syntézu Mayolu (*cis*-4-isopropylcyklohexylmethanolu). Mayol je vonná látka se svěžím jemným květinovým aroma používaná jako složka mýdel, detergentů a kosmetických výrobků. Výchozí látkou celé syntézy byl β -pinenoxid. Ten je v prvním stupni štěpen za přítomnosti kyselého katalyzátoru na perillový alkohol. Perillový alkohol je ve druhém stupni hydrogenován pomocí komerčních nosičových katalyzátorů (Pd/C, Pt/C, Pt/Al₂O₃, Ni/Al₂O₃) již na výsledný produkt. Hlavním tématem výzkumu bylo především provedení spojeného syntézního kroku („one-pot“) tedy spojení reakcí štěpení β -pinenoxidu a následné hydrogenace. Řešením se ukázala směs zeolitu a komerčního hydrogenačního katalyzátoru. Výzkum byl převážně zaměřen na použití hydrogenačního katalyzátoru Ni/Al₂O₃. Byl studován vliv teploty, tlaku, typu použitého komerčně dostupného zeolitu (mordenit/ USY/ beta), vliv množství hydrogenační a zeolitové složky. Výsledkem práce byla úspěšná realizace obou reakcí (štěpení kruhu a hydrogenace) v jednom syntézním kroku pomocí směsi katalyzátorů. O syntézu této látky projevila velký zájem firma Aroma a.s.

Sekce: Organická technologie II

Hydrogenační aminace diethylenglykolu v kaplné fázi dimethylaminem

Autor: Tomáš Trégner
Ročník: 1. magisterské studium
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Jiří Trejbal, Ph.D.

Hydrogenační aminací diethylenglykolu (DEG) dimethylaminem (DMA) vzniká terciární amin bis(2-dimethylaminoethyl)ether (BDMAEE), který je považován za hlavní produkt reakce. BDMAEE a jeho deriváty nachází největší uplatnění jako katalyzátory pro výrobu polyuretanových hmot. Příčina vzniku několika vedlejších produktů je disproportionace DMA. Aminace probíhá na kovových katalyzátorech za zvýšené teploty a tlaku. Cílem této práce bylo zjistit, zda je možné syntetizovat BDMAEE v kaplné fázi. Pro syntézu byly testovány tři typy kovových katalyzátorů Ry-Ni, Ry-Co a Cu/SiO₂. Reakce byly uskutečněny v teplotním rozmezí 185 – 220°C v tlakovém reaktoru za molárního poměru DEG: DMA 1 : 1,65. Reaktor byl před každou reakcí natlakován vodíkem na 2 MPa. Distribuce produktů byla analyzována plynovou chromatografií.

Sekce: Chemie a technologie polymerů

Porovnání vlastností nevulkanizovaného přírodního kaučuku

Autor: Pavel Bican
Ročník: 5.
Ústav: Ústav polymerů
Školitel: Doc. Ing. Antonín Kuta, CSc., Ing. Zdeněk Hrdlička, Ph.D.

Príspevek se věnuje porovnávání zpracovatelských vlastností nevulkanizovaného přírodního kaučuku na základě měření indexu zachování plasticity (PRI), viskozity Mooney při proměnných otáčkách rotoru a dynamických vlastností na přístroji RPA 2000. Pokouší se najít korelace mezi těmito vlastnostmi. K měření bylo použito 36 vzorků přírodního kaučuku NSR-10.

Sekce: Chemie a technologie polymerů

Modifikace směsí PA12 s PE

Autor: Jarmila Červinková
Ročník: 3.
Ústav: Ústav polymerů
Školitel: Ing. Jan Šimek, CSc.

V práci jsem se soustředila na směsi PA 12 s PE, které jsou nemísitelné a ve směsích tvoří separované fáze se špatnými mechanickými vlastnostmi. Pro jejich modifikaci jsem jako kompatibilizátor použila maleinizovaný PE. Účinnost modifikace jsem vyhodnocovala pomocí DSC, DMA, tahovými zkouškami a houževnatostí Charpy. Práce ukázala možnost využití maleinizovaného polyetylénu jako vhodného modifikátoru mechanických vlastností nemísitelných binárních směsí PA 12 s PE.

Sekce: Chemie a technologie polymerů

Studium vlivu hydrofobity a charakteru povrchu silikonové pryže na adhezi mikrobiální populace

Autor: Lenka Ferdová
Ročník: 3.
Ústav: Ústav polymerů
Školitel: Doc. Ing. Petr Hron, CSc.

Pro účely studia vlivu hydrofobity a drsnosti povrchu substrátu - silikonové pryže - na adhezi mikrobiální populace, byly připraveny tři typy směsí, a to pryž modifikovaná hydrofobizovaným plnivem na bázi pyrogenního oxidu křemičitého, pryž modifikovaná hydrofilním plnivem – řídce sesíťovaným polyakrylamidem a směs nemodifikovaná. Část povrchu vzorků byla zdrsňena smrkovým papírem. Metodou přisedlé kapky byl měřen úhel smáčení jednotlivých vzorků, a to jak na povrchu hladkém, tak na povrchu zdrsňeném. Pro studium adheze mikrobiální populace byla použita bakterie *Rhodococcus erythropolis*. Míra adheze bakteriálních buněk na površích vzorků byla stanovena dvěma metodami: barvením krystalovou violetí a pomocí obrazové analýzy (fluorescenční a konfokální mikroskopie).

Sekce: Chemie a technologie polymerů

Náhrada olejů DAE v kaučukových směsích netoxickými oleji typu MES a TDAE

Autor: Radek Hasal

Ročník: 5.

Ústav: Ústav polymerů

Školitelé: Doc. Ing. Antonín Kuta, CSc., Ing. Zdeněk Hrdlička, Ph.D.

Dnem 1.1.2010 vstupuje v účinnost evropská direktiva č. 79/769/EHS, omezující použití olejů s vysokým podílem polycyklických aromatických uhlovodíků z důvodu jejich škodlivého dopadu na životní prostředí a živé organismy. Proto je třeba najít vhodný alternativní zdroj s obdobnými vlastnostmi, který bude vyhovovat zmíněné směrnici a bude použitelný v provozech gumárenského průmyslu.

Cílem studie proto bylo srovnání fyzikálně-mechanických vlastností kaučukových směsí obsahujících jako změkčovadlo nezávadné oleje MES 15 a TDAE (Paramo, a.s.) a směsí se standardně používaným olejem typu DAE (Triumf). Směsi byly připraveny a jejich fyzikálně-mechanické vlastnosti stanoveny ve firmě Mitas, a.s., za aktivní účasti autora příspěvku v souvislosti s jeho působením v rámci odborné praxe. Druhá fáze testů proběhla na půdě VŠCHT testováním dynamických vlastností vulkanizátů obsahujících olej typu TDAE na přístroji RPA 2000.

Sekce: Chemie a technologie polymerů

Polymerace alk-1-enů katalyzovaná diiminovými komplexy niklu

Autor: Zdeněk Hošťálek

Ročník: 3.

Ústav: Ústav polymerů

Školitel: Ing. Jan Merna, Ph.D.

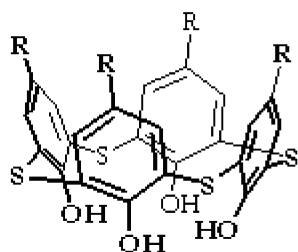
Cílem této práce je syntéza diiminových komplexů niklu lišících se strukturou diiminových ligandů. Ligandy byly charakterizovány ^1H NMR spektroskopii, výsledné Ni komplexy byly charakterizovány elementární analýzou. Připravené komplexy byly po aktivaci methylalumoxanem využity jako katalyzátory koordinační polymerace alkenů. Polymerace byly prováděny za nízkých teplot ($-10\text{ }^\circ\text{C}$) pro potlačení přenosových reakcí. Vliv struktury katalyzátoru na mikrostrukturu vznikajících polyalkenů ovlivněnou izomeračními reakcemi (chain-walking) byl studován pomocí ^1H NMR spektroskopie. Rozsah přenosových reakcí v závislosti na struktuře diiminových komplexů byl sledován pomocí rozměrově vylučovací chromatografie (SEC).

Sekce: Chemie a technologie polymerů

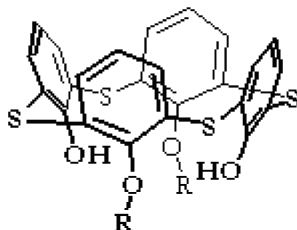
Syntéza titanových komplexů thiakalixarenů a jejich využití pro polymerace ethenu

Autor: Ondřej Hylský
Ročník: 3.
Ústav: Ústav polymerů
Školitel: Ing. Jan Merna, Ph.D.

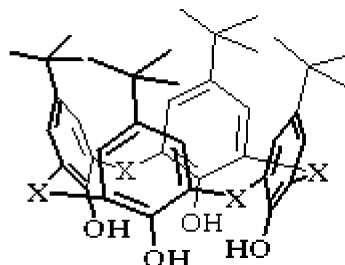
Práce je zaměřena na syntézu komplexů titanu nesoucích thiakalixarenové ligandy **1-5** lišících se substitucí horního i dolního okraje thiakalixarenového skeletu a typem můstků (-S-, -SO₂-) mezi aromatickými jádry kalixarenu. Připravené komplexy byly charakterizovány pomocí ¹H-NMR spektroskopie. Vliv struktury katalyzátorů byl po jejich aktivaci methylalumoxanem studován při polymeraci ethenu. Připravené polyethyleny byly charakterizovány pomocí DSC.



R=^tBu **1**
=H **2**
=Ph **3**



R=Pr **4**



X= -SO₂- **5**

Sekce: Chemie a technologie polymerů

Degradace alifaticko-aromatických kopolyesterů na bázi PETP II

Autor: Zuzana Hyniová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav polymerů
Školitel: Doc. Ing. Irena Prokopová, CSc.

Jednou z možností chemické recyklace PETP z použitých nápojových lahví je příprava alifaticko-aromatických kopolyesterů. Již dříve byla prokázána snížená odolnost kopolyesterů na bázi PETP a kyseliny mléčné k biodegradaci za aerobních i anaerobních podmínek. Ve své práci jsem se zaměřila na rozšíření poznatků o anaerobní degradaci těchto polymerů a dále na rozložitelnost kopolyesterů obsahujících vedle ethyltereftalátových strukturních jednotek také jednotky kyseliny sebakové, případně adipové a maleinové za termofilních podmínek při 55 °C. Kromě toho bylo sledováno urychlené povětrnostní stárnutí těchto typů kopolyesterů i samotného PETP ve veterometru Q-Sun v režimu tzv. Florida testu. Hydrolytická stabilita kopolyesterů byla testována abiotickou hydrolýzou při pH 7 a alkalickou hydrolýzou při 60 °C.

Sekce: Chemie a technologie polymerů

Vliv změkčovadel na povětrnostní stárnutí směsí PVC

Autor: Dana Kulhová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav polymerů
Školitel: Ing. Radka Kalousková, CSc.

V této práci jsme studovali vliv třech typů změkčovadel (na bázi ftalátu, butyrátu a polyesteru kyseliny adipové) v různé koncentraci na umělé povětrnostní stárnutí PVC. Vzorky nestabilizovaného PVC byly testovány v xenonové testovací komoře Q-Sun. Po dobu řádově stovky hodin na vzorky působil testovací cyklus, kombinující účinek slunečního záření, sprchování vodou a zvýšené teploty.

U exponovaných vzorků byla sledována změna rychlosti dehydrochlorace, změna optických parametrů a lesku, teplota skelného přechodu fólií a nárůst konjugovaných dvojných vazeb v řetězci polymeru. Vyšší koncentrace změkčovadla ve směších vede k zhoršení světelné stability PVC.

Sekce: Chemie a technologie polymerů

Vlastnosti směsí poly(3-hydroxybutyrát) – poly(L-mléčná kyselina)

Autor: Bc. Lenka Malinová
Ročník: 1. magisterské studium
Ústav: Ústav polymerů
Školitel: Doc. Ing. Jiří Brožek, CSc.

Jednou z ceněných vlastností poly(3-hydroxybutyrátu) (PHB) je jeho biodegradabilita. Jeho širšímu využití brání jeho nízká termická stabilita v blízkosti teploty tání, dále fyzikální stárnutí a vysoká cena. Vlastnosti PHB lze ovlivnit chemickou a fyzikální modifikací. Tato práce je zaměřena na fyzikální modifikaci, tj. na přípravu směsí PHB s jinými biodegradovatelnými polymery.

Práce navazuje na studium mísitelnosti směsí PHB s nízkomolekulární poly(L-mléčnou kyselinou) připravenou polykondenzací. Cílem práce bylo studium kompatibility směsí PHB s vysokomolekulární poly(L-mléčnou kyselinou), připravenou polymerací L-laktidu za iniciace 2-ethylhexanoátu cínatého. Studium mísitelnosti těchto směsí pomocí DSC komplikuje překryv teplot skelných přechodů (T_g) se studenou krystalizací složek. Proto byla s úspěchem ke studiu použita modulovaná DSC. Rozsah výměnných reakcí mezi oběma polyesterami byl vyhodnocen ze záznamů DSC.

Sekce: Chemie a technologie polymerů

Roubování škrobu polylaktony

Autor: Jakub Mráček
Ročník: 3.
Ústav: Ústav polymerů
Školitel: Doc. Ing. Irena Prokopová, CSc.

Dennodenně se lidstvo staví před stále naléhavější otázku, co s narůstající množstvím platového odpadu, jehož velký podíl tvoří použité obaly. Jedním z možných příspěvků k řešení tohoto problému je alespoň částečná náhrada tradičních polymerních materiálů, které jsou velmi odolné biologickému rozkladu, polymery biodegradovatelnými. V úvahu připadají vhodné syntetické polymery nebo polymery přírodní, z nichž se z ekonomického hlediska jeví jako zvláště zajímavý škrob. Jeho nedostatečné aplikační vlastnosti pro obalovou techniku (malá mechanická pevnost a vysoká hydrofilita) je možné zlepšit buď chemickou modifikací škrobu, nebo jeho smísením s hydrofobnějšími syntetickými biologicky rozložitelnými polymery.

Cílem práce bylo ověřit podmínky efektivního roubování škrobu polykaprolaktonem a polyvalerolaktonem. Kopolymery vzniklé polyreakcí ϵ -kaprolaktonu a δ -valerolaktonu na hydroxylových skupinách polysacharidu mohou být i vhodným kompatibilizátorem při přípravě směsí škrobu se syntetickým polymerem.

Sekce: Chemie a technologie polymerů

Využití CO₂ při aniontové polymeraci ϵ -kaprolaktamu

Autor: Michal Ondráček
Ročník: 5.
Ústav: Ústav polymerů
Školitelé: Doc. Ing. Jiří Brožek, CSc., Ing. Jana Kredatusová

Aniontová polymerace ϵ -kaprolaktamu (CLA) má nezastupitelné místo při výrobě polyamidu 6 technologií polymeračního odlévání. Iniciační systém polymerace je tvořen dvěma složkami - iniciátorem a aktivátorem polymerace. V současné době se jako aktivátory polymerace používají převážně diisokyanáty nebo jejich reakční produkty s kaprolaktamem. Stranou zájmu jsou některé netradiční aktivátory polymerace jako např. oxid uhličitý.

Oxid uhličitý byl dříve v naší laboratoři s úspěchem využit při přípravě termicky stabilního poly(2-pyrrolidonu). V případě polymerace CLA byl využit při přípravě práškového polyamidu 6 v rozpouštědle. Ucelené informace o jeho polymerační aktivitě při blokové polymeraci CLA však chybí.

Práce je zaměřena na studium polymerace CLA iniciované jeho sodnou solí a urychlené CO₂, který s iniciátorem vytváří karboxylát, který je omezeně rozpustný v tavenině CLA. Byla sledována rychlost polymerace v závislosti na koncentraci složek a polymerační teplotě. K charakterizaci molární hmotnosti byla využita viskozimetrie.

Sekce: Chemie a technologie polymerů

Možnosti využití dielektrické analýzy pro sledování izotermního vytvrzování siloxanových pryskyřic

Autor: Václav Smrček
Ročník: 5.
Ústav: Ústav polymerů
Školitel: Doc. Ing. Petr Hron, CSc.

Metoda dielektrické analýzy je využívána pro sledování vytvrzovacích procesů celé řady reaktoplastů. Výhodou této metodiky je možnost in situ sledování průběhu síťovacích reakcí bez nutnosti odebrání vzorků. Další předností je jednoduchost instrumentace. Předkládaná práce testuje možnosti využití izotermní dielektrické analýzy pro sledování průběhu síťování komerčně dostupných siloxanových pryskyřic. V průběhu vytvrzování siloxanových pryskyřic dochází ke kondenzaci silanolových skupin, což vede ke změnám rheologických i dielektrických vlastností. Průběh síťování byl charakterizován obsahem gelu a změnou dielektrických vlastností.

Sekce: Chemie a technologie polymerů

Využití roztokové polymerizace L-laktidu k modifikaci poly(3-hydroxybutyrátu)

Autor: Lucie Trávníčková
Ročník: 5.
Ústav: Ústav polymerů
Školitelé: Doc. Ing. Jiří Brožek, CSc., Ing. Marie Kutáčová

Poly(3-hydroxybutyrát) (PHB) patří do skupiny přírodních biodegradabilních polyesterů obecně nazývaných poly(3-hydroxyalkanoáty). PHB je semikrystalický, vysoce stereoregulární termoplast, který díky chirálnímu uhlíku vykazuje optickou aktivitu. PHB se vyskytuje v mnoha typech bakterií, které jej využívají jako zásobní zdroj energie a uhlíku. Průmyslově se vyrábí fermentačním procesem v bioreaktorech.

Vedle zatím vysoké ceny PHB představuje nízká termická stabilita a tzv. fyzikální stárnutí omezení jeho aplikačních možností. Tyto nepříznivé vlastnosti lze eliminovat modifikací PHB. Práce je zaměřena na chemickou modifikaci PHB spočívající v začlenění strukturních jednotek oxy-ethan-1,1-diyl-karbonylu (kyseliny mléčné) do jeho struktury. Toho lze dosáhnout polymerizací (3S)-cis-3,6-dimethyl-1,4-dioxan-2,5-dionu (L-laktidu) v přítomnosti PHB rozpuštěném v termodynamicky dobrém rozpouštědle. Práce se v první fázi zabývá roztokovou polymerizací L-laktidu v chloroformu, popisem polymerizačního procesu a charakterizací produktu.

Sekce: Chemie a technologie polymerů

Vysoce větvené polyimidy na bázi tris(2-aminoethyl)aminu 2.část

Autor: Martina Traxmandlová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav polymerů
Školitel: Doc. Ing. Petr Sysel, CSc.

Polyimidy se vyznačují dobrou mechanickou, chemickou a dielektrickou odolností v širokém rozmezí teplot (přibližně -150 až 250°C). Využití nacházejí v (mikro)elektronice, leteckém průmyslu a jako membrány v separačních technologiích. Propustnost plynů závisí především na schopnosti jejich difúze skrz polymerní membránu. Difúzní koeficient je ovlivněn zejména mírou volného objemu polymeru a velikostí separovaných částic. Z pohledu řiditelného volného objemu jsou perspektivní vysoce větvené polyimidy (VVPI). Práce navazuje na výzkum z minulého roku, kde byly studovány VVPI na bázi dvojfunkčního anhydridu kyseliny 3,3',4,4'-benzofenontetrakarboxylové a trojfunkčního tris(2-aminoethyl)aminu. Finální produkty ve formě filmů však nebyly většinou samonosné. Proto byly v této práci uvedené monomery kombinovány s dvojfunkčním 4,4'-diaminodifenyletherem v různém molárním poměru. Polyimidové prekurzory, polyamidkarboxylové kyseliny, byly charakterizovány viskozimetricky a IČ analýzou. Filmy konečných produktů byly studovány pomocí IČ a dynamicko-mechanické analýzy. Byla hodnocena jejich termická a chemická stabilita. Zvláštní pozornost byla věnována jejich transportním vlastnostem pro plyny. Bylo provedeno porovnání s lineárním polyimidem na bázi bis(2-aminoethyl)aminu.

Sekce: Chemie a technologie polymerů

Syntéza a vlastnosti alifatických polyanhydridů

Autor: Martin Votrubec
Ročník: 5.
Ústav: Ústav polymerů
Školitel: Doc. Ing. Irena Prokopová, CSc.

Polyanhydridy patří do skupiny biologicky rozložitelných polymerů s nízkou hydrolytickou stabilitou, které mohou najít i pro své další vlastnosti zajímavé biomedicínální aplikace. Byla syntetizována řada alifatických polyanhydridů s cílem ověřit ve spolupráci s pracovníky TU v Liberci možnost přípravy nanovláken z těchto polymerů. Polyanhydridy byly připraveny polykondenzační reakcí směsných anhydridů kyseliny adipové a kyseliny sebakové s kyselinou octovou. Kopolykondenzací obou typů směsných anhydridů byly připraveny polymery s různou polaritou řetězců makromolekul. Termické chování vzniklých polymerů bylo charakterizováno pomocí diferenciální skenovací kalorimetrie a termogravimetrické analýzy. Byla sledována závislost hydrolytické stability na složení polymerů. Práce by měla přispět k nalezení korelace mezi strukturou polymeru, jeho molární hmotností a termickým chováním a možnostmi přípravy nanovláken.

Sekce: Materiálové inženýrství

Modifikace polymerů plazmou

Autor: Aleš Chaloupka
Ročník: 5.
Ústav: Ústav inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Jakub Siegel

Polymery mají významné uplatnění jako součásti biomateriálů, kompozitů, ochranných vrstev, mikroelektronických součástek a v řadě dalších aplikací. Důraz je kladen především na povrchové vlastnosti, které u surových polymerů nevyhovují. Lze je však relativně snadno přetvářet pomocí metod povrchové modifikace. Využívá se zejména vlastností plazmy, fotonů, svazku elektronů nebo iontů, a také gama a rentgenového záření. Cílem povrchové modifikace je například zlepšení chemické odolnosti, potiskovatelnosti povrchu, změna povrchové energie, smáčivosti, vodivosti, morfologie, snížení tření povrchu.

V této práci byla studována smáčivost polytetrafluorethylenu, modifikovaného Ar plazmou, v závislosti na době stárnutí. Smáčivost PTFE klesá s rostoucí dobou degradace a naopak roste s dobou stárnutí. Dále byla studována tloušťka deponovaných Au vrstev na polyethyleny a jejich homogenita před a po modifikaci plazmou. Kontinuita vrstev byla charakterizována měřením její plošné rezistance. S rostoucí dobou depozice roste tloušťka vrstvy. Při vytvoření souvislé vrstvy dochází k prudkému poklesu hodnot plošné rezistance. Povrchová morfologie vybraných vzorků byla studována metodou AFM.

Sekce: Materiálové inženýrství

Nanokompozitní materiály připravené interkalací podvojných vrstevnatých hydroxidů organickými anionty

Autor: Eva Jindová
Ročník: 1. magisterského studia
Ústav: Ústav chemie pevných látek
Školitel: Doc. Ing. František Kovanda, CSc.

Má práce je zaměřena na přípravu sloučenin typu hydrotalcitu interkalovaných anionty kyseliny akrylové a jejích derivátů, konkrétně kyseliny 2-akrylamido-2-methyl-1-propansulfonové, kyseliny 4,4'-azobis(4-kyanopentanoové) a kyseliny methakrylové. Jako prekursory byly použity podvojně vrstevnaté hydroxidy typu Mg-Al a Zn-Al v dusičnanové formě s molárním poměrem Mg:Al či Zn:Al = 2:1. Prekursory byly připraveny srážením roztoků příslušných dusičnanů v roztoku hydroxidu sodného pod ochranou dusíkovou atmosférou. Interkalace organických anionů do struktury hydrotalcitu byla prováděna aniontově výměnnou reakcí za použití vysušeného prekursoru, aniontově výměnnou reakcí za použití nevysušeného prekursoru a rehydratační reakcí kalcinovaného prekursoru. Jako nejefektivnější se ukázala metoda aniontové výměny za použití nevysušeného prekursoru, kterou se podařilo interkalovat všechny výše uvedené anionty do struktury Mg-Al i Zn-Al hydrotalcitu. Vzorky interkalované do Zn-Al hydrotalcitu vykazovaly lepší krystalinitu a zřejmě se do struktury Zn-Al hydrotalcitu i snadněji interkalují.

Sekce: Materiálové inženýrství

Relativní entalpie a tepelná kapacita CaNb_2O_6

Autor: Ivan Šipula
Ročník: 5.
Ústav: Ústav inženýrství pevných látek
Školitel: Prof. Ing. Jindřich Leitner, DrSc.

Práškový vzorek CaNb_2O_6 byl připraven vysokoteplotním keramickým postupem ze stechiometrické směsi CaCO_3 a Nb_2O_6 . Charakterizace připraveného vzorku byla provedena pomocí RTG difrakční analýzy. K měření relativních entalpií byl použit kalorimetr Multi HTC96 Setaram s detektorem pro vhažovací kalorimetrii. Jako standard byl použit syntetický safír. Měření byla provedena v rozsahu teplot 773–1473 K. Pro vyhodnocení teplotní závislosti molární tepelné kapacity CaNb_2O_6 v oboru teplot 298–1500 K byly využity změřené relativní entalpie a publikovaná hodnota $C_{pm}(298 \text{ K})$ získaná z měření tepelné kapacity metodou relaxačního času v oboru teplot 2–300 K. Výsledky byly porovnány s empirickou predikcí podle Neumannova - Koppova pravidla.

Sekce: Materiálové inženýrství

Hydrotermální stabilita geopolymérů

Autor: Martin Koiš
Ročník: 1. magisterského studia
Ústav: Ústav chemie pevných látek
Školitel: Ing. David Koloušek, CSc.

Základem byla exotermní reakce vodního skla s metakaolinem v alkalickém prostředí. Posuzovalo se několik systémů s různými poměry základních složek ($\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ (2,1-4:1), $\text{H}_2\text{O}/\text{SiO}_2$ (0,4-18:4), $\text{Na}_2\text{O}/\text{SiO}_2$ (0,75-3:2,1-4)).

Používal se kaolin Sedlec la společně s vodním sklem R-145 a hydroxidem sodným. Tělíška vytvořená ze směsi byla převedena do forem, vložena na 3 dny do sušárny při 50 °C, kde zrála. Po třech dnech byla tělíška vyjmuta a vložena do sušáren při izotermách 100, 140, a 180 °C na 3 dny. Druhá část tělísek byla za stejných teplot vložena do autoklávů za přídatku 10 ml vody opět na 3 dny. Byly prováděny zkoušky pevností v tlaku těchto tělísek a vyhodnoceny pomocí ternárních diagramů, korelace dosažených pevností v tlaku s obsahem zeolitových fází v matici na podmínkách zrání, identifikace zeolitových fází v tělíscích pomocí RTG difrakční práškové analýzy.

Bylo výhodné použít vyšších rozdílů mezi látkovými množstvími SiO_2 a Na_2O pro dosažení relativně vysokých pevností v tlaku. Na^+ ionty dramaticky snižují pevnosti v tlaku, přídavek vody rovněž snižuje pevnosti, hydrotermální zrání způsobovalo rozpad tělísek po vyjmutí z autoklávu, pevnosti tělísek po třídním zrání v sušárnách klesaly s rostoucí teplotou, rostoucí množství zeolitů rovněž snižuje pevnosti v tlaku.

Sekce: Materiálové inženýrství

Charakterizace směsných oxidů vzniklých tepelným rozkladem podvojných vrstevnatých hydroxidů obsahujících Co, Ni, Mn a A

Autor: Petra Mašátová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav chemie pevných látek
Školitel: Doc. Ing. František Kovanda, CSc.

Práce je zaměřena na charakterizaci směsných oxidů vzniklých tepelným rozkladem podvojných vrstevnatých hydroxidů obecného chemického složení $M^{II}_{1-x}M^{III}_x(OH)_2A^{n-}_{x/n} \cdot yH_2O$. Směsné oxidy kovů M^{II} a M^{III} připravené kalcinací takových prekursorů se často využívají v heterogenní katalýze. Srážecí reakcí roztoků dusičnanů v alkalickém prostředí byly připraveny prekursor v uhličitanové formě obsahující v hydroxidových vrstvách kationy Co, Ni, Mn a/nebo Al. Prekursor byly následně kalcinovány na vzduchu při teplotě 100 – 1100°C. Připravené prekursor a produkty jejich tepelného rozkladu byly charakterizovány pomocí termické analýzy, chemické a redoxní analýzy a práškové rentgenové difrakční analýzy. Prekursor se rozkládaly při teplotách 250 – 300°C za vzniku spinelové fáze a oxidu typu bunsenitu (NiO). Z naměřených difrakčních dat byly vyhodnoceny mřížkové parametry vzniklých oxidů. Hlavní fází je spinel, obsah oxidu typu bunsenitu se pohybuje v rozmezí 5 – 50 % a zvyšuje se s rostoucí koncentrací Ni ve vzorku.

Sekce: Materiálové inženýrství

Měření na tenkých vysokoohmových vrstvách s využitím počítače

Autor: Martin Strnad
Ročník: 5.
Ústav: Ústav inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Josef Náhlík, CSc.

Práce je zaměřena na zjišťování plošné rezistivity tenkých vrstev vysokoohmových materiálů. V první fázi byla nastudována teorie měření vysokých odporů (nad 200 MΩ) s přihlédnutím k měření na tenkých vrstvách pravidelné geometrie.

Následně byla zvolena vhodná metodika testování a především navržen a realizován univerzální přípravek pro operativní připojení vzorků ve tvaru vrstev k elektrometru Keithley 6517 A, umožňující i současné sledování teploty a relativní vlhkosti v bezprostřední blízkosti vzorku.

Současně proběhl návrh vhodné geometrie vrstvy, a na základě toho pak byly navrženy a realizovány přípravky a pomůcky pro plošné vymezení depozičních vrstev tak, aby mohla být posouzena nejenom plošná rezistivita, ale i případný vliv kontaktního odporu.

Nedílnou součástí pak představuje vytvoření odpovídajícího programového vybavení pro automatizované měření v programovém prostředí Labview 8.5 a ověření funkčnosti systému a programového vybavení na vybraných vzorcích.

Sekce: Materiálové inženýrství

Přirozené a antropogenní zdroje selenu v životním prostředí (Kladensko)

Autor: Stanislava Krejčová
Ročník: 1. magisterského studia
Ústav: Ústav chemie pevných látek
Školitel: Ing. Barbora Doušová, CSc.

Přirozeným zdrojem selenu mohou být například oblasti související se sopečnou činností. Antropogenním zdrojem pak skládky komunálního odpadu, úložiště odpadů z průmyslových výroby, případně haldy hlušiny po těžbě uhlí a rud.

V okolí svého bydliště jsem vytipovala dvě lokality, ve kterých lze výskyt selenu předpokládat. Jedná se o Vinařickou horu a haldy bývalého dolu Schöller. Vinařická hora (413 m n. m.) leží nedaleko Kladna a jedná se o třetihorní sopečné těleso. Tvořena je především vyvřelými horninami, ale i opukami a pískovci. V některých částech obsahuje vyvřelá hornina větší množství dutin, jejichž stěny jsou pokryty mnoha zajímavými minerály, předpokládá se zastoupení i minerálů selenu. Na haldě bývalého dolu Schöller byl nalezen elementární selen v podobě jehlicovitých krystalů. V současnosti lze na této lokalitě předpokládat spíše výskyt selenových minerálů.

Cílem mé práce je ověřit přítomnost selenových specií v půdě a horninovém podloží na uvedených lokalitách

Sekce: Materiálové inženýrství

Příprava a charakterizace C - vrstev

Autor: Tomáš Hubáček
Ročník: 5.
Ústav: Ústav inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Petr Slepíčka, PhD.

Uhlíkové vrstvy na polymerních materiálech slouží především jako substráty s využitím v biomedicíně, kde se tyto materiály používají pro růst buněk. Modifikace polymerů slouží k zlepšení jejich povrchových vlastností. Depozice uhlíkových vrstev byla prováděna napařováním z uhlíkových vláken za sníženého tlaku. Pro tyto vrstvy byla měřena smáčivost v závislosti na vzdálenosti od zdroje uhlíku. Se zvětšováním vzdálenosti od zdroje klesá množství naneseného uhlíku. Za těchto podmínek se smáčivost pro rozdílné vzdálenosti expozice výrazně neliší, ale je patrný rozdíl oproti původnímu materiálu. Dále byl měřen odpor těchto vrstev, který úzce souvisí s jejich homogenitou a tloušťkou. Na základě měření byla také stanovena maximální vzdálenost expozice, při které je možné úspěšně reprodukovat nanášení vrstvy. Pro depozici bylo použito více substrátů, aby bylo možné porovnat jejich vliv na vlastnosti uhlíkové vrstvy.

Sekce: Chemická technologie restaurování památek

Historický vývoj materiálů pro železniční kolejnice

Autor: Petra Guhlová
Ročník: 4.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jiří Děd, CSc.

Cílem této práce je na základě vyhodnocení chemického složení a struktury vzorků železa a litiny z různých historických typů kolejnic stanovit pravděpodobnou technologii jejich výroby a zpracování. Získané informace jsou v práci dále použity pro demonstraci vývoje technologie výroby železa v posledních 250 letech.

Výběrem vyčleněného analyzovaného souboru se podařilo postihnout všechny vývojové etapy výroby železa a oceli v období 18.-20. století. Jedná se tedy o kolejnice litinové, kolejnice ze svářkového železa různé kvality a kolejnice z plávkové oceli vyrobené ve vzduchem dmýchaných konvertorech, Siemens-Martinské peci a v moderním kyslíkovém konvertoru. Práce slouží také k upřesnění záznamů depozitáře NTM k daným kolejnicím.

Sekce: Chemická technologie restaurování památek

Barvení mosazi

Autor: Eliška Křečanová
Ročník: 2.
Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Šárka Msallamová

Cílem naší práce bylo posoudit vliv povrchových úprav mosazi na vznik barevných patin při chemickém barvení materiálu.

K práci byly použity vzorky válcovaného mosazného plechu. Tyto vzorky byly postupně broušeny, leštěny a mořeny v kyselém nebo alkalickém prostředí. Odmaštění materiálu probíhalo buď v alkalické lázni nebo elektrolyticky v alkalickém prostředí. Takto připravené mosazné vzorky byly po zvážení barveny v roztocích síranu měďnatého a amoniaku nebo síranu měďnatého, vinanu sodného a hydroxidu draselného. Vliv mořících lázní na povrchové složení mosazného plechu byl vyhodnocován pomocí atomové absorpční spektroskopie a skenovacího elektronového mikroskopu. Kompaktnost barevné vrstvy vyloučené na mosazi byla pozorována na stereomikroskopu a její tloušťka byla hodnocena skenovacím elektronovým mikroskopem.

Z našich poznatků plyne, že vyloučení kvalitního barevného odstínu je závislé na mechanické úpravě povrchu, způsobu omašťování a moření mosazných vzorků.

Sekce: Chemická technologie restaurování památek

Návrh restaurování beuronské kaple v bývalém klášteře boromejek v Teplicích (dnes budova gymnázia)

Autor: Kateřina Labaničová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Martina Hucková, Ing. Jakub Havlín

Nástěnné malby v bývalém klášteře boromejek (dnes Gymnázium Teplice) jsou jediným dochovaným příkladem ranného beuronského umění na našem území. Dílo bylo poškozeno především nešetrnými stavebními úpravami během minulého režimu. Tato práce se zabývá technologickým průzkumem nástěnných maleb al secco určeným k restaurování. Byl vytvořen vlhkostní profil a profil zasolení, stratigrafie maleb a analýza vybraných pigmentů, dále byl testován nejvhodnější konsolidant pro fixaci maleb. Výsledky průzkumu budou sloužit pro pozdější restaurování.

Sekce: Chemická technologie restaurování památek

Identifikace inkoustů nedestruktivními metodami

Autor: Tereza Pilousová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Martina Ohlídálová

V minulosti byly jako psací prostředky historických dokumentů nejčastěji používány různé druhy inkoustů a tuší. V této práci jsem se pokusila vyvinout metodiku identifikace těchto inkoustů pomocí nedestruktivních metod. Pro experiment byly připraveny jednak zástupci inkoustů různých skupin podle historických receptur (železozalový, směsný, chromový, uhlíkový a kovový), tak byly testovány i některé komerčně vyrobené inkousty a tuše. K vytvoření metodiky byly využity následující metody: optická mikroskopie ve viditelném a UV světle, IR reflektografie, FTIR mikrospektroskopie, XRF spektrometrie a UV-VIS spektrometrie. Na základě získaných výsledků jsem se pokusila vyvinout metodiku identifikace jednotlivých skupin inkoustů a aplikovat ji na 5 vybraných rukopisů či perokreseb.

Sekce: Chemická technologie restaurování památek

Vliv vakuového balení na vlastnosti novinového papíru

Autor: Šárka Jonášová
Ročník: 3.
Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Petra Vávrová, Ing. Martina Ohlídalová

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 organických materiálů, které podléhají degradaci, pokud nejsou dodržovány optimální podmínky jejich uložení. V současnosti jsou vzácné knihovní fondy převážně ukládány do nekyselých lepenkových krabic. Tento způsob uložení dostatečně a účinně chrání archiválie před prachem, mechanickým poškozením a přímým světlem. Problematickými otázkami ale zůstává ochrana před vzdušnými polutanty a ochrana před působením mikroorganismů. Tento způsob uložení také nijak nebrání oxidačnímu mechanismu degradace materiálů archiválií atp. Vakuové balení těchto materiálů 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. U fólií zjišťuji např. propustnost pro kyslík a mechanické vlastnosti, u papírů potom hodnoty pH a optické a mechanické vlastnosti.

Sekce: Chemická technologie restaurování památek

Studium vlivu mramorování na vlastnosti vazební usně

Autor: Marie Benešová
Ročník: 3.
Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Martina Ohlídalová

Na výrobu řady významných knižních vazeb 19. a 20. století byla použita mramorovaná useň. Nejběžnějším způsobem tohoto dekorování usní bylo mramorování zelenou skalicí ve vodě, octě nebo vínu. Pro adekvátní vyhodnocení vlivu železnatých iontů na useň je nutné nejprve dobře znát vliv samotného nosného média. Cílem této práce bylo tedy porovnat vliv tohoto nosného média a média se síranem železnatým. Jako nosná média byla použita voda, 5 hm % kyselina octová, lihový ocet a vinný ocet. Mramorování vzorků usní bylo provedeno 5 hm % roztokem heptahydrátu síranu železnatého ve výše zmíněných nosných médiích. Po ošetření byly vzorky uměle stárnuty suchým teplem a vyhodnoceny jejich vlastnosti (tj. změny barevnosti, změny mechanických vlastností, teplot smrštění, hodnot pH výluhů a vyhodnocení charakteru povrchu vláken usní pod elektronovým mikroskopem).

Sekce: Chemická technologie restaurování památek

Vliv relativní vlhkosti vzduchu na albuminovou fotografii

Autor: Linda Mišková

Ročník: 4.

Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek

Školitel: Ing. Petra Vávrová

Práce se zabývá bližším prozkoumáním vlivu relativní vlhkosti vzduchu na albuminovou fotografii. Vzorky albuminové fotografie jsem připravila podle tradiční technologie z 19. století. Vzorky byly vystaveny působení několika různých hodnot relativní vlhkosti vzduchu nad vybranými nasycenými roztoky solí. Předpokládáme, že probíhají různé interakce mezi albuminovou vrstvou a papírovou podložkou. Jedním z cílů této práce je příprava vzorků příčných řezů fotografie a jejich zkoumání pod elektronovým mikroskopem. Tato analýza by měla objasnit chování bílkovinné vrstvy pod vlivem působení různé relativní vlhkosti vzduchu.

Na chování a odstín obrazu albuminové fotografie má také podíl distribuce a míra zoxidování a povaha atomů stříbra, které jsou ve své podstatě nositeli obrazu. Pro výskyt a rozmístění atomů stříbra jsme zvolili také analýzu mikrosondou.

Sekce: Konzervování a restaurování památek

Restaurování štítu na Tóru

Autor: Adéla Dandová

Ročník: 3.

Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství

Školitel: Ing. Jiří Děd, CSc.

Príspevek se týká problematiky restaurování historického stříbrného předmětu, který byl v minulosti již několikrát poškozen a různými způsoby opravován. Průzkumová část je zaměřená na zjištění výrobce, materiálové analýzy, posouzení celkového stavu předmětu a korozního napadení. Některé dřívější opravy (použití cínové pájky a doplňování nevhodným materiálem) se ukázaly jako nevhodné a bylo nutné zvolit jiný způsob. Žíhání a následné letování stříbrnou pájkou vyžadovalo důkladné odstranění veškeré cínové pájky. Po vyrovnání deformací byly vyspraveny praskliny, přiletována odlomená závěsná očka a doplněny chybějící části. Většina korozních produktů byla odstraněna mechanicky.

Sekce: Konzervování a restaurování památek

Restaurování poměděné zinkové lité plastiky

Autor: Veronika Procházková

Ročník: 5.

Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství

Školitel: Ing. Jiří Děd, CSc.

Cílem této práce bylo zrestaurování neznámé zinkové lité plastiky, jejíž povrch byl značně poškozen. Samotnému restaurování předcházelo zjištění původu a stáří plastiky, identifikace použitého materiálu pro plastiku a také složení nepůvodní povrchové úpravy. Dále byl zjišťován rozsah korozního poškození, degradace a zachování původní povrchové úpravy a výskyt nepůvodní povrchové úpravy.

Pro získání původního vzhledu povrchu plastiky bylo nejprve na několika vzorcích stejného složení zkoušeno galvanické i bezproudové pokovení. Až poté byla aplikována nová povrchová úprava na samotnou plastiku. Na závěr byl nový povrch plastiky patřičně zakonzervován.

Sekce: Konzervování a restaurování památek

Zhotovení replik galvanoplastickou technikou

Autor: Silvia Mrázová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Jiří Děd, Csc.

Cílem této práce bylo stanovení optimálních podmínek pro zhotovení replik restaurovaných drobných předmětů galvanoplastickou technikou. Zhotovení měděných replik se skládalo z několika kroků: zhotovení Lukoprenové formy, výroba voskového modelu, aplikace elektrovedivé vrstvy, elektrolytické pokovení a konzervace měděné skořepiny. Při elektrolytickém vylučování silné vrstvy mědi byla použita kyselá síranová lázeň. Vyloučení kvalitního kovového povlaku v přijatelném časovém intervalu je dáno nastavením vhodných parametrů elektrolyzy (složení a teplota lázně, míchání lázně, použitá proudová hustota, geometrické uspořádání v elektrolyzátoru atd.). Tyto parametry byly v průběhu jednotlivých elektrolyz upravovány pro dosažení kvalitního kovového povlaku s minimálním množstvím defektů (dendritické výrůstky, matný povlak, nepokovené oblasti v důsledku zachytávání bublin, atd.). Součástí práce bylo také hodnocení kvality vyloučeného povlaku metalografickou analýzou.

Sekce: Konzervování a restaurování památek

Restaurování halštatské amfory nalezené v žárovém hrobu

Autor: Karolina Vítovcová
Ročník: 3.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Kloužková Alexandra, CSc., Bc. Milan Metlička

Předmětem předložené práce se stala amfora z Halštatského období náležící k Mohylové kultuře. Byla nalezena v komorovém hrobu společně s dalšími nádobami. Nádobu je z větší části zachována. Její povrch je z vnější stany tuhovaný a zdobený rytím a prstováním. Na rekonstrukci předmětu bylo použito lepidlo Gama fix - univerzální disperzní lepidlo. Nádobu byla dosud zrekonstruována přibližně ze dvou třetin a další práce bude zaměřena na její celkové dokončení.

Sekce: Konzervování a restaurování památek

Restaurování šňůrové keramiky- Vliněves

Autor: Lucie Vágnerová
Ročník: 3.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Kloužková Alexandra, CSc., Ljuba Svobodová

Předmětem práce bylo zrestaurování nádoby, která pochází z pozdní doby kamenné – eneolitu – šňůrové kultury. Byla nalezena v roce 2005 ve Vliněvsi (okres Mělník) v písčitém v polykulturním pohřebním areálu. Vzhledem k tomu, že byla převzata ve formě *in-situ* (střepy se zeminou z původního místa uložení) byla nejprve odstraněna zemina a pak bylo provedeno očištění vodou a nakonzervování (konzervační roztok PMA – Sokrat 501 s vodou – 1:8) rozpadajících se střepů. Dalším krokem bylo vyhledání a slepení střepů (lepidlo Sokrat 501 – PMA) do konečného tvaru. Pro zajištění stability byla nádoba doplněna sádkou a na přání zadavatele dobarvena (latex V2011, temperové barvy). Výsledkem je spodní část amfory s uchem a 2 pásy ryté výzdoby. Nádobu je nutné uchovávat za doporučených podmínek. Neumístěné střepy byly využity k identifikaci chemického a mineralogického složení střepové hmoty.

Sekce: Konzervování a restaurování památek

Restaurování nádoby z doby bronzové

Autor: Šárka Hejlová
Ročník: 3.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Kloužková Alexandra, CSc., Václava Síglová

Předmětem práce je restaurování fragmentu amforovité nádoby z doby bronzové. Amfora byla nalezena v 70. letech v obci Rokytno (okr. Pardubice). Majitelem nádoby je VČM Pardubice. Nádoba již byla v minulosti jednou restaurována. Avšak během kompletního stěhování sbírek muzea došlo k jejímu rozlomení na několik částí a byla pouze provizorně slepena. Nádoba byla ve špatném stavu, byla rozlepena na několik částí a proto bylo nutné ji opět zrestaurovat. Nejdříve byly všechny předchozí zásahy odstraněny a střepy vyčištěny od starého lepidla a sádkových doplňků. Po vyhledání a slepení střepů bylo zjištěno, že tvoří polovinu amforovité nádoby. Vzhledem k tomu, že by mohlo dojít ke zborcení nádoby byla chybějící místa dosádkována. Pro snížení procesu stárnutí keramického střepu této nádoby je důležité dodržet podmínky uložení, rovněž by mohlo dojít ke snížení pevnosti lepených spojů a následnému rozpadnutí.

Sekce: Konzervování a restaurování památek

Restaurování eneolitické zásobnice z archeologického projektu Libkovice 1989

Autor: Romana Kozáková
Ročník: 3.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Alexandra Kloužková, CSc., Mgr. Aleš Káčerík

V rámci prezentace bude představen záchranný archeologický projekt Libkovice – okr. Most, uskutečněný v letech 1988 – 1991 a dodatečně dokončovaný v roce 2007. Celkový postup zpracování nálezů bude ukázán na konkrétní nádobě – eneolitické zásobnici, od jejího počátečního nálezu po konečné zrestaurování. Jedná se o jednu z největších nádob nalezenou v rámci projektu, kterou se podařilo zrekonstruovat do celistvé podoby.

Sekce: Konzervování a restaurování památek

Restaurování hedvábného sáčku

Autor: Jitka Svobodová
Ročník: 3.
Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Markéta Škrdlantová, Dorothea Hodková

Práce popisuje restaurování hedvábného sáčku z 19. stol. z vlastivědného muzea Dr. Hostaše v Klatovech (inv. č. 115 556). Hedvábný sáček v barvě slonové kosti zdobený hadovkou z dracounu ze žlutého kovu byl celkově velmi zašpiněný. Hedvábí je silně degradované, místy silně potřhané do flotází. Sáček bylo třeba vyčistit a zpevnit pro zachování hmotné a umělecké podstaty předmětu a pro případné vystavování. Restaurování probíhalo v následujících krocích: demontáž všech dílů, odebrání vzorků, materiálově technický průzkum, čištění, zpevnění hedvábí sendvičovou technikou mezi krepelínu a hedvábí, závěrečná montáž sáčku. Na závěr byly navrženy vhodné klimatické podmínky pro dlouhodobé uložení restaurovaného předmětu.

Sekce: Konzervování a restaurování památek

Restaurování malovaného vějíře

Autor: Tereza Ševčíková

Ročník: 3.

Ústav: Ústav chemické technologie restaurování památek

Školitel: Ing. Markéta Škrdlantová, Dorothea Hodková

Práce popisuje restaurování malovaného vějíře z 19. stol. z vlastivědného muzea Dr. Hostaše v Klatovech. Vějíř se skládá ze dvou částí, dřevěné kostry a dvou textilních součástí, a to hedvábné tkaniny a dvou hedvábných krajek. Hedvábná tkanina s malbou byla značně degradovaná a v místech ohybů popraskána. Hedvábná krajka byla značně znečištěna a nevykazovala žádné známky mechanického poškození. Restaurátorský zásah spočíval v dokumentaci celého průběhu prací, analýzách druhu vláken dle morfologických znaků, demontáži textilních součástí z dřevěné kostry, jejich následném čištění a konzervaci. Tkanina s malbou byla v celé ploše podložena a podlepena. Krajky byly v celé délce přišity na hedvábnou krepelínu. Poté následovalo zkompletování všech součástí dohromady. Závěrem byly doporučeny vhodné depozitární a expoziční podmínky pro uložení předmětu.

Sekce: Výroba, analýza a využití léčiv

Kokrystaly - formulační alternativa API

Autor: Jana Balcárková
Ročník: 3.
Ústav: Ústav chemie pevných látek
Školitel: Prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc.

Kokrystaly jsou relativně novým typem pevných API. Zatím se uplatňují jenom ve výzkumné sféře a testuje se jejich využití. Ve farmaceutických databázích není zatím popsáno žádné používané léčivo, které by obsahovalo kokrystal.

Díky své struktuře patří kokrystal mezi multikomponentní sloučeniny. Je to struktura typu „hostitel-host“, které spolu interagují prostřednictvím vodíkových vazeb. Složka „hostitel“ představuje v léčivu aktivní substanci a složka „host“ je chemická sloučenina, která modifikuje vlastnosti substance. Jedná se především o zlepšení farmakokinetického profilu.

Zavedení kokrystalů do farmaceutických výrob a jejich použití v terapii se očekává v nejbližší budoucnosti.

Můj rešeršní příspěvek je zaměřen na vysvětlení pojmu kokrystal, na objasnění jeho struktury a na synthonový přístup syntézy. Na několika příkladech je dokumentována modifikace vlastností při přechodu od substance na kokrystal.

Sekce: Výroba, analýza a využití léčiv

Vliv stupně zaplnění homogenizátoru na uspořádání sypkých farmaceutických směsí

Autor: Pavla Hrušková
Ročník: 1. magisterského studia
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Lucie Jezerská

Kvalitní mísení sypkých směsí je v mnoha farmaceutických procesech klíčovým krokem. Je však poměrně málo známo o základních mechanismech tohoto procesu. Cílem práce proto bylo podrobnější studium jednotlivých typů mísících pohybů a jejich citlivost na změnu důležitého procesního parametru – stupně zaplnění homogenizátoru. Experimenty probíhaly v poloprovozním homogenizátoru Hotic se dvěma typy sypkých směsí. Byly testovány varianty s 35, 50, 70 a 85 % zaplněním homogenizátoru. Experimenty ukázaly, že proces mísení je spojen s třemi typy toku materiálu. Převažujícím typem byl pohyb rolovací, který je doprovázen při nižším zaplnění pohybem sesuvným a při vyšším zaplnění pohybem kaskádovým. Výsledky práce naznačily, že pro rychlejší a kvalitnější promísení první směsi je výhodnější nižší stupeň zaplnění, naopak pro druhou směs zaplnění vyšší. První, velmi špatně tekoucí směs, nepodléhala segregaci a poměr aktivní a statické mísící zóny byl při nižším zaplnění příznivý. Nižší stupeň zaplnění homogenizátoru při mísení druhé, průměrně tekoucí směsi, poskytoval sice dostatečný volný dynamický prostor v zařízení, který však podpořil segregaci mísené směsi.

Sekce: Výroba, analýza a využití léčiv

Studium homogenity farmaceutických směsí s více účinnými látkami

Autor: Jana Krulíková
Ročník: 5.
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Lucie Jezerská

Klasické pevné lékové formy se vyrábějí buď přímým lisováním práškové směsi účinných látek (API) a pomocných látek nebo lisováním jejich granulátu. Některé moderní přípravky se připravují kombinací uvedených metod, a to především v případech, kdy tablety obsahují kromě základní účinné látky i druhou synergicky působící API. Předmětem studia byla farmaceutická směs obsahující první účinnou látku (paracetamol) ve formě granulátu a druhou účinnou látku (kofein) ve formě prášku. Při mísení granulátu s práškem však dochází k nežádoucí obsahové nestejnomyšlnosti účinných látek v tabletovině. Proto byl sledován vliv distribuce velikosti a průměrné velikosti částic paracetamolového granulátu a jemného kofeinu na homogenitu tabletoviny. Jednotlivé kombinace mísení přesítovaných resp. nepřesítovaných API byly realizovány v mísicím zařízení Hotic. Na základě experimentů bylo zjištěno, že při mísení studovaných směsí se významně uplatňuje segregace práškového kofeinu.

Sekce: Výroba, analýza a použití léčiv

Supramolekulární design flobufenu

Autor: Markéta Kubátová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav chemie pevných látek
Školitel: Ing. Jan Čejka, Ph.D.

S-(-)- a R-(+)-flobufen (4-(2',4'-difluorobifenyl-4-yl)-methyl-4-oxobutanová kyselina) patří do skupiny nesteroidních antiflogistik a působí, podobně jako aspirin, analgeticky, antipyreticky a antiflogisticky. Špatná rozpustnost této skupiny látek je způsobena tím, že vytvářejí velmi stabilní dimery, ve kterých jsou molekuly vzájemně spojeny dvěma silnými vodíkovými vazbami mezi karboxylovými skupinami. Změny rozpustnosti a fyzikálních vlastností lze dosáhnout přípravou solí s diaminy, u kterých dojde ke tvorbě zcela odlišné sítě vodíkových vazeb a částečně nebo zcela odlišného prostorového uspořádání molekul. Do budoucna je to jedna z možných cest přípravy moderních sloučenin s modifikovanými vlastnostmi (změna farmakokinetického profilu, snížení agresivity např. vůči tkáním zažívacího traktu). Cílem projektu je připravit nový supramolekulární design flobufenu, u kterého se dá předpokládat lepší rozpustnost. Doposud se podařilo připravit pouze nový metastabilní polymorf flobufenu, který degraduje na známou fázi.

Sekce: Výroba, analýza a použití léčiv

Méně rozpustné soli lisuridu

Autor: Hana Marková
Ročník: 5.
Ústav: Ústav chemie pevných látek
Školitel: Ing. Jan Čejka, Ph.D.

Lisurid je semisyntetický námelový alkaloid. Námelové alkaloidy patří mezi farmakologicky významné sloučeniny s širokospektrálním účinkem. Účinek můžeme ovlivnit modifikací primární struktury a dosáhnout tak vyšší biologické aktivity a specifity.

V organismu lisurid působí jako serotoninový antagonist a dopaminový agonista D1 a D2 receptorů.

Lisurid se používá mimo jiné jako antiparkinsonikum. Při léčbě Parkinsonovy choroby se lisurid používá v první fázi tohoto onemocnění. Pro terapii je výhodné podávat agonisty s delším poločasem rozpadu. Za tímto účelem připravujeme soli stericky náročnějších kyselin, u kterých očekáváme zpomalení rychlosti rozpouštění.

Prodloužením poločasu rozpadu léčiva v organismu se prodlouží doba jeho užívání a oddálí se DOPA terapie, která přináší řadu vedlejších účinků.

V současné době se při terapii používá snadno rozpustná sůl lisurid maleinát.

V rámci práce se podařilo připravit monokrystaly hydroxynaftolátu lisuridu 1/3 hydrátu a embonátu lisuridu 2 THF solvátu. Výsledky a interpretace rentgenové strukturní a práškové analýzy budou součástí prezentace.

Sekce: Výroba, analýza a využití léčiv

Vývoj disoluční metody pro Triamcinolon

Autor: Lenka Uhlířová
Ročník: 5. ročník magisterského studia
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Doc. Ing. P. Zámotný, PhD.

Cílem práce bylo vyvinout disoluční metodu, pro Triamcinolon 4 mg (Zentiva) ve formě tablet k perorálnímu podávání. Triamcinolon patří mezi léčiva s okamžitým uvolňováním účinné látky. Základním měřeným parametrem specifikovaným v českém lékopise je proto podíl účinné látky uvolněný během 45 minut, který by měl u vyhovujícího vzorku dosáhnout alespoň 75%.

Zkouška disoluce se prováděla na přístroji Sotax AT 7 v manuálním režimu. Obsah účinné látky v odebíraných vzorcích se stanovil měřením jejich absorbance UV spektrometrem při 238 nm oproti čistému disolučnímu médiu. Množství uvolněné účinné látky se počítalo podle kalibrační přímky získané měřením série standardů. Kvůli porovnání různých přípustných variant metody byly měřeny kompletní disoluční profily uvolňování účinné látky v čase, charakterizované osmi vzorky odebíranými během 2 hodin.

Bylo testováno několik variant uspořádání disoluční zkoušky s košíčkovou i pádelkovou metodou při frekvenci otáčení míchadel 50 a 75 ot.min⁻¹. Jako disoluční média byly použity roztok HCl v destilované vodě o pH = 1,2 a fosfátový pufr o pH = 3,0. Košíčková i pádelková metoda byly při vhodné rychlosti otáček diskriminativní. U pádelkové metody však měly hodnoty měřené za nízkých otáček poněkud větší rozptyl.

Sekce: Výroba, analýza a využití léčiv

Simvastatin, stálice mezi statiny

Autor: Michaela Pudilová
Ročník: 3.
Ústav: Ústav chemie pevných látek
Školitel: Prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc.

Simvastatin je hypolipidemické léčivo patřící do skupiny farmaceutických substancí zvaných statiny. Statiny jsou inhibitory syntézy kyseliny mevalonové a tím i cholesterolu, používají se jako léčiva pro snižování hladiny cholesterolu a krevních lipoproteinů. Jedná se o nejdéle používaná, a tedy také nejvíce vyzkoušená, hypocholesterolemika. Stejně tak jako v České republice patří tyto látky i v zahraničí k velmi rychle rostoucí skupině léčiv. Celosvětová spotřeba statinů ve finančním vyjádření je více než 21 Mld. USD s meziroční dynamikou těsně pod 10 %. I v následujících letech zůstanou statiny zřejmě (s téměř 90 % podílu) dominantní skupinou mezi hypolipidemiky.

Ač byl simvastatin ve svém prvenství na žebříčku nejprodávanějších léků vystřídán před třemi roky atorvastatinem, stále se řadí mezi žádané a často předepisované léky.

Cílem této referátové práce je shromáždit dostupné chemické, farmaceutické a zčásti i ekonomické a lékařské informace o simvastatinu a pokusit se objasnit, proč je simvastatin stálíci mezi ostatními statiny.

Sekce: Výroba, analýza a využití léčiv

Vývoj software pro nelineární regresní analýzu a jeho užití ve farmacii

Autor: Miroslav Surma
Ročník: 5.
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Doc. Ing. Petr Zámotný, Ph.D.

Regresní analýza je souborem statistických metod používaných k odhadování hodnot neznámé náhodné veličiny (např. parametru modelu) na základě jiných náhodných veličin (např. experimentálních dat). U nelineárních modelů představuje největší úskalí nutnost použití některého z iteračních postupů. V řadě oblastí se proto nelineární problémy neúměrně zjednodušují jen kvůli technickým problémům reprezentovaným nelineární regresí. Cílem této práce byl proto vývoj počítačové aplikace usnadňující provedení nelineární regresní analýzy ve standardním výpočetním prostředí jazyka MATLAB a demonstrace jejího užití na příkladech z oblasti farmaceutických procesů. Funkce vyvíjené aplikace je založena na využití osvědčeného algoritmu adaptivního náhodného hledání k odhadu optimálních hodnot parametrů i hodnocení jejich spolehlivosti v algebraických i diferenciálních systémech.

V praktické části práce je funkce této aplikace demonstrována na zpracování dat ze dvou procesů. První z nich je zaměřen na vyhodnocení teplotní závislosti transportu derivátů antracyklinů přes buněčnou membránu a porovnání nelineárního a linearizovaného řešení. Druhý demonstruje možnost charakterizace disolučních profilů kinetickým modelem rozpouštění.

Sekce: Výroba, analýza a využití léčiv

Příprava diagnostické imunomagnetické molekulární sondy

Autor: Kamila Syslová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Petr Kačer Ph.D.

Včasná diagnostika plicních onemocnění je důležitá z hlediska zahájení účinné terapie a minimalizace poškození pacienta. V současné době v praxi používané diagnostické metody spočívají v kombinaci invazivních a *semi*-invazivních metod, které jsou pro pacienta zatěžující a v případě dětí až stresující záležitosti. Analýza kondenzátu vydechovaného vzduchu (KVV) je poměrně novou metodou, která představuje alternativní cestu, kterou lze charakterizovat jako zcela neinvazivní. Princip metody spočívá v kvantifikaci specifických látek - „biomarkerů“ vyskytujících se v KVV. Koncentrační hladina biomarkerů v uvedené matici je v důsledku probíhajících patologických dějů v dýchacích cestách a plicích významně zvýšena (oproti fyziologickému stavu). Předkládaná práce se zabývá vývojem molekulární sondy pro rychlou separaci, identifikaci a kvantifikaci řady významných biomarkerů obsažených v KVV a to cysteinylolvaných leukotrienů - LTC₄, LTD₄, LTE₄ (*Asthma bronchiale*), leukotrienu B₄ - LTB₄ (zánětlivá reakce) a 8-isoprostanu (marker oxidativního stresu). Princip metody kombinuje vysoce specifickou separaci biomarkerů založenou na reakci monoklonální protilátky zakotvené na magnetické částici s příslušným markerem a jeho izolaci ve vnějším magnetickém poli. Detekce je následně realizována vysoce citlivou a selektivní metodou na bázi hmotnostní spektrometrie. Vyvinutá metoda je charakterizovatelná vysokou citlivostí, nízkou chybou stanovení (<9%) a možností vícenásobného použití připravené molekulární sondy. V neposlední řadě v sobě zahrnuje i možnost vývoje biočipu pro automatické, rychlé a na obsluhu nenáročné řešení uvedeného diagnostického principu pro molekulární profil a multimarkerový screening dechového kondenzátu.

Sekce: Výroba, analýza a využití léčiv

Řešení fázového problému v RTG difrakci metodou charge-flipping na procesoru grafické karty

Autor: Bc. Vojtěch Šádek
Ročník: 1. magisterského studia
Ústav: Ústav chemie pevných látek
Školitel: Dr. Ing. Michal Hušák

RTG strukturní analýza je účinná technika pro určování absolutní struktury krystalických materiálů, výhodná např. pro organické molekuly. Metoda spočívá v interakci periodické struktury monokrystalu se RTG zářením. V závislosti na rozložení elektronové hustoty v látce se ohnuté paprsky buď zesilují, nebo zeslabují. Záření se dál šíří jen v několika diskrétních směrech. Intenzita je úměrná čtverci absolutní hodnoty strukturních faktorů, které jsou fourierovy koeficienty elektronové hustoty. Pro výpočet elektronové hustoty jsou třeba komplexní strukturní faktory, ale z intenzit lze přímo vypočítat pouze jejich velikost. Fáze lze určovat například hrubou výpočetní silou algoritmem charge-flipping. Algoritmus funguje tak, že se strukturním faktorům přiřadí náhodné fáze, spočítá se elektronová hustota, výsledek se

upraví tak, aby elektronová hustota nebyla záporná, a z upraveného výsledku se spočítají nové fáze. Mnohonásobným opakováním celého postupu se dostaneme ke správným fázím. Výpočet lze urychlit rozdělením do mnoha drobných nezávislých výpočtů, které lze vykonávat paralelně na GPU. Řádově až stonásobné zrychlení a robustnost metody např. umožní využít přístup pokus-omyl pro různé symetrie a indexace u jinak těžko řešitelných struktur farmaceuticky zajímavých látek, případně i řešení struktur z prášku. Tato práce se zabývá možnostmi a implementací uvedeného postupu v prostředí CUDA pro grafické karty typu GeForce8.

Sekce: Výroba, analýza a použití léčiv

Studium monohydrátu laktosy

Autor: Lenka Seilerová
Ročník: 3.
Ústav: Ústav chemie pevných látek
Školitel: Ing. Hana Brusová (Petříčková), Ph.D.

Léky jsou tvořeny látkou účinnou a farmaceutickými pomocnými látkami. Účinnou látku podáváme za účelem stanovení lékařské diagnózy nebo k obnově, úpravě či ovlivnění jejich fyziologických funkcí. Až na výjimky není podáván koncentrát účinné látky, ale směs účinné látky s látkami pomocnými. Pomocné látky usnadňují zpracování, stabilitu popř. podávání léčivé látky. Často tvoří většinu lékové formy tvoří právě pomocné látky, proto jejich vlastnosti výrazně ovlivňují chování léčivého přípravku.

Mezi pomocné látky patří i laktosa monohydrát (4-O- β -D-galaktopyranosyl-D-glukopyranosa, mléčný cukr). Ve styku s mnoha léčivy je velmi stálá. Laktosa je častým plnivem jako bezvodá, hydrát i aglomerovaná. Může měnit barvu, zlepšuje tokové vlastnosti a napomáhá přímému lisování. Léky obsahující mléčný cukr se dobře rozpadají a léčivo se rychle uvolňuje. Často tvoří až 50% tabletoviny.

Byly porovnány vždy tři šarže laktosy monohydrátu od tří různých výrobců s využitím různých pevnofázových technik. Budou prezentovány výsledky porovnání z rentgenové práškové difrakce, laserové difrakce, optické mikroskopie a pravé disoluce. Potvrzení shody nebo rozdílnosti studovaných šarží ukáže na možnost využití i alternativních dodavatelů laktosy.

Sekce: Informatika a chemie

Databáze MedisAlarm

Autor: Kryštof Dibusz
Ročník: 1. magisterské studium
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Ing. Miloslav Nič, Ph.D.

Hlavním cílem projektu byla transformace již zastaralé databázové struktury toxikologické databáze MedisAlarm společnosti Medistyl, s.r.o., s využitím technologií XML a programovacích jazyků XSLT a Python. V rámci optimalizace dat a zefektivnění práce s databází byl vytvořen interaktivní editor umožňující snadné a uživatelsky přívětivé zadávání nových toxikologických dat do systému. Díky novému editoru bylo možno do databáze přidat stovky nových chemických sloučenin s jejich kompletní toxikologickou specifikací. Projekt navíc ukázal nové možnosti a cesty pro další – např. webové – zpracování celé databáze.

Sekce: Informatika a chemie

Prostorová grafika organických molekul

Autor: Martin Filip
Ročník: 3.
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Bohdan Schneider (ÚOCHB AV ČR)

Cílem naší práce bylo ukázat poslední vývoj v počítačové technice, který nám napomáhá se získáváním informací o makromolekulárních organických látkách a umožňuje také jejich zobrazení ve formě prostorových obrazů.

Zabývali jsme se zdroji informací a struktur, možnostmi zpracování a úpravy jednotlivých databázových dat. Věnovali jsme se struktuře datového typu PDB, formě a překladu informací z něj, dále zpracování dat a převedení do grafického režimu.

Práce zahrnovala úpravu a využití možností programu UCSF Chiméra (software pro interaktivní vizualizaci a analýzu molekulárních struktur aj.) a také zkoumání možností jeho použití pro výuku a další zpracování dat. Jedním z výsledků je návod jak s molekulami pracovat.

Sekce: Informatika a chemie

Chemie pro zrakově postižené

Autor: Iva Forstová
Ročník: 1. magisterské studium
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Ing. Miloslav Nič, Ph.D.

Hlavním cílem práce je vytvoření studijních pomůcek pro výuku chemie zrakově postižených na vysokých školách. V současné době jsou vytvářeny materiály pro studium Obecné a anorganické chemie. Materiály jsou většinou vytvářeny ve formátu Wiking a dále zpracovávány systémem LCG (Learning Content Generator). Při sběru a zpracování dat jsou využívány XML-technologie, včetně transformačního jazyka XSLT. Připravené materiály jsou testovány nevidomým studentem.

Sekce: Informatika a chemie

Informační podpora elektronických databází

Autor: Martin Klimt
Ročník: 1. magisterské studium
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Jiří Jirát

Práce je zaměřena na informační podporu elektronických databází, jež jsou k dispozici na VŠCHT v Praze. V současné době poskytuje knihovna téměř kompletní fond odborné chemické literatury včetně referátových informačních zdrojů a časopisů. Pro realizaci celého systému posloužily jako nástroje jazyky XML a XSL, které disponují při praktickém využití nespornými výhodami. Uvedené prostředky spolehlivě poslouží k přehledné manipulaci s daty v relativně krátkém časovém úseku, který je nutný k jejich zpracování. Bezesporu se jedná o ideální moderní technologii, vhodnou pro práci s velkým objemem dat. Hlavní část práce je zaměřena na návrh souboru XML a další implementační detaily podpůrného informačního systému. Konkrétně se jednalo o způsob naplnění souboru XML podle vytvořené struktury a vyhledání potřebných informací, které byly využity při vzniku této struktury. Podpůrný systém není orientován pouze na přístup k datům, ale též na statistiku četnosti přístupu do databází.

Výsledný projekt Informační podpora elektronických databází bude v elektronické podobě využíván v knihovně VŠCHT Praha a zpráhlední nabídku jejích databází. Zároveň bude uvedený systém dostupný uživatelům také prostřednictvím sítě Internet na webových stránkách VŠCHT Praha.

Sekce: Informatika a chemie

Triviální názvy v organické chemii – webový portál

Autor: Simona Kutná
Ročník: 3.
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Bedřich Košata

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

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

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

Sekce: Informatika a chemie

Převod materiálů serveru Zvon.org do formátu Docbook

Autor: Tomáš Müller
Ročník: 2.
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Ing. Miloslav Nič, Ph.D.

Formát Docbook je používán řadou předních světových technických nakladatelství pro přípravu tištěných publikací. V rámci projektu je vytvářen systém pro automatické generování knih z materiálů serveru Zvon.org. Tento systém vychází z existujících XML dokumentů, které zpracovává s využitím programovacího jazyka XSLT do výsledné podoby DocBook dokumentů. Cílem práce je vytvořit knižní podobu významných materiálů Zvon.org a ty pak nabízet ke stažení uživatelům z celého světa (Zvon.org využije každý rok více než milion čtenářů).

Sekce: Informatika a chemie

Triviální názvy v anorganické chemii – webový portál

Autor: Tomáš Novotný
Ročník: 3.
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Bedřich Košata

Prezentovaný portál byl vytvořen jako pomůcka, která má studentům, pedagogům i laické veřejnosti usnadnit orientaci v běžně používaných triviálních názvech anorganické chemie. Zejména v českém názvosloví mají některé hojně používané sloučeniny několik alternativních názvů, z nichž některé jsou již zastaralé, přesto však stále používané. Portál se snaží shrnout všechny varianty triviálních názvů běžných anorganických sloučenin v přehledné podobě.

Portál vychází z českého názvosloví a obsahuje anglické překlady systematických a – pokud existují – i triviálních názvů. Látky jsou uspořádány do přehledných rejstříků podle jejich triviálního i systematického názvu (českého i anglického), sumárního vzorce a prvků obsažených v jednotlivých sloučeninách. Stránky jednotlivých látek také obsahují odkazy do encyklopedie Wikipedia a chemické databáze PubChem, kde lze nalézt další důležité informace o dané látce.

Sekce: Informatika a chemie

Systém pro tvorbu tištěných materiálů serveru Zvon.org

Autor: Ctibor Škuta
Ročník: 2.
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Ing. Miloslav Nič, Ph.D.

Ve své práci jsem se zabýval převodem materiálů Zvon.org, předního světového serveru v oblasti XML-technologií, do tištěné podoby. Publikační systém je založen na XML-technologiích. Systém využívá existující XML dokumenty, ze kterých jsou generovány současné webové stránky Zvonu. S pomocí transformačního jazyka XSLT jsou automaticky vytvářeny dokumenty XSL-FO, které slouží jako předloha pro generování PDF dokumentů. Výsledné PDF dokumenty budou nabízeny ke stažení uživatelům z celého světa.