

Seznam sekcí a složení komisí

Sekce: **Anorganická chemie**
posluchárna B06, 9.00 hod.

Komise:

Předseda: Doc. Dr. Ing. David Sedmidubský

Členové: prom. chem. Ivan Jirka, CSc. (ÚFCH-JH AV ČR)

Ing. Kateřina Rubešová, Ph.D.

Ing. Linda Salavcová

Doc. RNDr. Josef Stejskal, CSc.

Ing. Irena Hoskovcová, CSc. – organizační tajemník

Sekce: **Anorganická technologie**
místnost A32, 9.00 hod.

Komise:

Předseda: Doc. Dr. Ing. Josef Krýsa

Členové: Ing. Ivona Sedlářová

Ing. Sabina Moravcová, Ph.D.

Dr. Ing. Vladimír Navara

Ing. Miloslav Lhotka, Ph.D. - organizační tajemník

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

Komise:

Předseda: Prof. Ing. Josef Matoušek, DrSc.

Členové: Doc. RNDr. Ondřej Gedeon, Ph.D.

Ing. Antonín Lisý, CSc.

Doc. RNDr. František Škvára, DrSc.

Ing. Eva Gregorová, CSc. - organizační tajemník

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

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Stanislav Kasa, CSc.

Členové: Doc. Ing. Jaroslav Kutzendörfer, CSc.

Doc. Dr. Dipl.- Min. Willi Pabst

Dr. Ing. Martin Míka

Ing. Miroslav Rada, CSc. - organizační tajemník

Sekce: **Chemická technologie restaurování památek**
místnost budova A, II. patro (A226-A228), 8.30 hod.

Komise:

Předseda: Prof. Ing. Pavel Novák, CSc.

Členové: Doc. Ing. Petr Kotlík, CSc.

Ing. Jiří Děd, CSc.

Ing. Kateřina Doubravová, Ph.D.

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

Ivan Houska (restaurátor)

Ing. Irena Kučerová, Ph.D.

Ing. Dana Rohanová

Ing. Markéta Škrdlantová, Ph.D.
Ing. Petra Vávrová – organizační tajemník

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

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Vladimír Maroušek, CSc.

Členové: Doc. Ing. Irena Prokopová, CSc.

Doc. Ing. Petr Hron, CSc.

Doc. Ing. Antonín Kuta, CSc.

Ing. Zdeněk Hrdlička – organizační tajemník

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

Komise:

Předseda: Doc. RNDr. Tomáš Vaněk, CSc.

Členové: Anna Součková, PhDr.

Ing. Miloslav Nič, Ph.D.

Ing. Bedřich Košata, Ph.D.

Ing. Jiří Jirát, Ph.D. – organizační tajemník

Sekce: **Kovové materiály
ústav kovových materiálů a korozního inženýrství, 9.00 hod.**

Komise:

Předseda: Prof. Ing. Pavel Lejček, DrSc.

Členové: Prof. Ing. Pavel Novák, CSc.

Doc. Ing. Jitka Jandová, CSc.

Doc. Ing. Luděk Joska, CSc.

Ing. Jan Šerák, Ph.D. – organizační tajemník

Sekce: **Materiálové inženýrství
místnost B360 (studovna), 9.00 hod.**

Komise:

Předseda: Prof. Ing. Jindřich Leitner, DrSc.

Členové: Doc. Ing. Petr Macháč, CSc.

Ing. Barbora Doušová, CSc.

Ing. Olga Kubová

Ing. Petr Slepíčka – organizační tajemník

Sekce: **Organická chemie II A
posluchárna A20, 9.00 hod.**

Komise:

Předseda: Prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.

Členové: Doc. Ing. Igor Linhart, CSc.

Ing. Petr Holý, CSc.

Ing. Hanuš Slavík (Hexion Sokolov)

Ing. Václav Kříž (Atotech – M.A.G. CZ Jablonec n.N.)

Ing. Bc. Michal Himl – organizační tajemník

Sekce: **Organická chemie II B**
místnost A250, 9.00 hod.

Komise:

Předseda: Doc. Ing. František Hampl, CSc.

Členové: Prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

Ing. Václav Kozmík, CSc.

Ing. Miroslav Havránek, Ph.D. (Re&D VÚFB)

Ing. Tomáš Tobrman, Ph.D. – organizační tajemník

Sekce: **Organická chemie I**
posluchárna A11, 8.30 hod.

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Členové: Prof. Ing. Ivan Stibor, CSc.

Dr. Ing. Jana Hodačová (ÚOCHB AV ČR)

Ing. Rudolf Smrž, CSc. (Synthon)

Ing. Miroslav Špaček, MBA (NeraPharm)

Ing. Pavel Šebek (Zentiva)

Ing. Jan Budka, Ph.D. – organizační tajemník

Sekce: **Organická technologie**
posluchárna A01, 9.00 hod.

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Bohumír Dvořák, CSc.

Členové: Doc. Ing. Vratislav Tukač, CSc.

Ing. Ladislav Kurc, CSc.

Ing. Petr Zámotný, Ph.D.

Ing. Lenka Přibyllová

Ing. Pavel Čapek, CSc. – 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.)

Doc. Ing. Zdeněk Bělohav, CSc.

Ing. Eliška Leitmannová

Ing. Petr Kačer, Ph.D. – organizační tajemník

Sekce : Anorganická chemie

Užití metod sol-gel při přípravě bismutových supravodičů

Autor: Eva Májová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav anorganické chemie
Školitel: Doc. Ing. Olga Smrčková, CSc.

Bismutové supravodiče jsou keramické materiály, jejichž vlastnosti lze měnit jak chemickým složením, tak změnou v technologii přípravy. Cílem práce bylo zjistit, jak se budou měnit magnetické a elektrické vlastnosti (kritická teplota, kritická proudová hustota, magnetická susceptibilita) standardů stechiometrického složení $\text{Bi}_{1,6}\text{Pb}_{0,4}\text{Sr}_2\text{Ca}_{2,5}\text{Cu}_{3,5}\text{O}_x$ užitím různých postupů přípravy. Snahou bylo zvýšení homogenity výchozího materiálu, které by mělo vést ke snazší tvorbě supravodivé fáze Bi-2223 ($T_c = 110\text{K}$) a kladně ovlivnit transportní vlastnosti supravodiče.

Ze zvolených prekurzorů byly připraveny vzorky supravodiče reakcí v pevné fázi a kombinacemi metod sol-gel s reakcí v pevné fázi. Použité metody sol-gel byly: postup založený na Pechiniho metodě, metoda citrátového gelu a metoda polyethylenimidového roztoku. U takto připravených vzorků byly změřeny hodnoty kritických proudových hustot a teplotní závislosti magnetických susceptibilit. Fázové složení vzorků bylo určeno pomocí RTG fázové analýzy.

Aktivní optické vlnovody obsahující Er^{3+} a Cu^+

Autor: Hana Malichová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav anorganické chemie
Školitel: Ing. Pavlína Třešňáková, Ph.D.

Aktivní optické vlnovody jsou jednou z velmi nadějných možností použití tenkých vrstev ve skleněných substrátech. Jako velice atraktivní pro přípravu kvalitních, nízkoztrátových vlnovodů s luminiscencí v modrozelené oblasti se v poslední době jeví lokalizovaná dotace měďných iontů.

V této práci byl řešen problém přípravy tenkých optických vrstev obsahujících Er^{3+} a měď v oxidačním stavu I, která by měla zajistit jak aktivní funkci (silná modrozelená luminiscence a emise při 1550 nm), tak pasivní funkci (zvýšení indexu lomu a vznik vlnovodu). Experimentální vzorky byly připravovány termickými iontovými výměnami z tavenin obsahujících CuI do povrchu silikátových skel. Základním problémem řešeným v této části projektu bylo studium možnosti difúze Cu^+ do silikátových skel dotovaných erbiem, která jsou podstatně méně propustná pro difundující ionty (ve srovnání s odpovídajícími nedotovanými skly); a potlačení oxidace Cu^+ na Cu^{2+} . Vlastnosti připravených vzorků byly studovány vidovou spektroskopií (vlnovodné vlastnosti), SEM-EDAX (složení povrchových vrstev) a měřením fotoluminiscenčních spekter ve viditelné (přítomnost a koordinace Cu^+) a IČ oblasti ($^4\text{I}_{13/2} \rightarrow ^4\text{I}_{15/2}$, emisní pás Er^{3+}).

Kobaltity s nesouměřitelnou strukturou – materiály pro termoelektrické aplikace

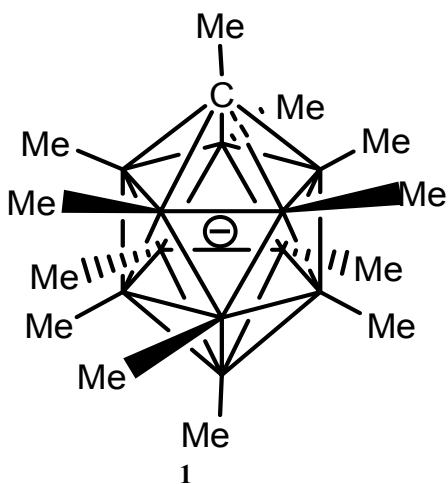
Autor: Jakub Stárek
Ročník: 3.
Ústav: Ústav anorganické chemie
Školitel: Doc. Ing. PhD. David Sedmidubský

Směsné oxidy kobaltu v systémech Bi-Sr-Co-O a Ca-Co-O jsou v poslední době předmětem intenzivního výzkumu jednak díky své anomální struktuře vykazující nesouměřitelnost mezi hexagonálními bloky $-\text{CoO}_2-$ a halitovými bloky $-\text{Bi}_2\text{SrO}_3-$ resp. $-\text{Ca}_2\text{CoO}_3-$, jednak díky potenciálním aplikacím jako konstrukční materiály pro termoelektrické baterie. Pro konstrukci takové baterie je zapotřebí seriového zapojení dvou typů materiálů s kladnou a zápornou termosílou. Kobaltity vykazují příznivou kombinaci vlastností - relativně vysokou kladnou termosílu, nízký měrný odpor a nízkou tepelnou vodivost. Pro optimalizaci těchto vlastností je zapotřebí měnit koncentraci nositelů náboje, tedy poměr formálních valencí $\text{Co}^{3+} / \text{Co}^{4+}$. Vedle heterovalentní substituce (např. $\text{Sr}^{2+}-\text{Bi}^{3+}$, $\text{Ca}^{2+}-\text{Na}^{+}$) se jako druhá možnost nabízí modifikace parametru nesouměřitelnosti mezi oběma bloky. V případě studované fáze $\text{Ca}_3\text{Co}_4\text{O}_9$ to představuje změnu stechiometrie v řadě $\text{Ca}_3\text{Co}_{4-x}\text{O}_{9-z}$. Cílem předkládané práce je prověřit tuto možnost syntézou a strukturní charakterizací vzorků s různým x .

Syntéza aniontu dodekametylkarba-c/oso-dodekaboranu(-), $\text{CB}_{11}\text{Me}_{12}^-$ a jeho využití v makromolekulární chemii

Autor: Radim Dostál
Ročník: 5.
Ústav: Polymerů a makromolekulární chemie / ÚACH AVČR Řež u Prahy/
Colorado University at Boulder, USA
Školitel: Ing. Zbyněk Janoušek, CSc.

Polyhedrální anion dodekametylkarba-c/oso-dodekaboranu(-), $\text{CB}_{11}\text{Me}_{12}^-$ (**1**), patří mezi tzv. slabě nukleofilní anionty¹. Vyznačuje se značnou rozpustností v organických rozpouštědlech a stálostí vůči silným organickým i anorganickým bázím. Pro svoji symetrii a delokalizaci záporného náboje po celém ikosahedrálním skeletu, tedy vlastností charakteristické pro aromatické uhlovodíky, může být přirovnáván k benzenu. Tyto přednosti mu dávají velkou perspektivu pro potenciální využití v průmyslu. Slabě nukleofilní anionty tohoto typu již našly uplatnění při polymerizaci olefinů a jsou také perspektivní komponentou pro výrobu lithiových baterií.



V předkládané práci je popsána několikastupňová syntéza aniontu (**1**),²⁻⁵ vycházející z borohydridu sodného, NaBH_4 a z etherátu fluoridu boritého, $\text{BF}_3\text{Et}_2\text{O}$. Všechny meziprodukty i produkty získané při této syntéze byly charakterizovány pomocí ^1H , ^{11}B a $[^{11}\text{B}-^1\text{H}(\text{decoupled})]$ NMR spektroskopie.

Lithná sůl aniontu (**1**) byla použita jako katalyzátor v některých radikálových polymerizacích a kopolymerizacích.

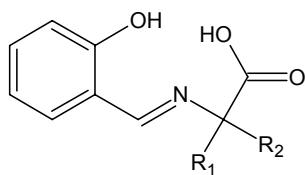
Poděkování: Práce byla vypracována za podpory NSF-MŠMT Grant Č. 1416322

Literatura:

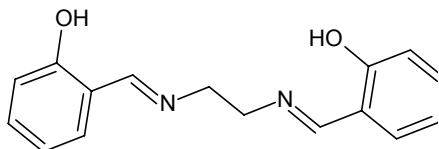
1. Strauss, S.H.; *Chem.Rev.* **1993**, 93, 927
2. Gary. B.; Dunks.; Kathy Palmer Ordonez.; *Inorganic Chemistry*, Vol. 17, No.6, **1978**.
3. Franken. A.; King. B.T.; Rudolph. J.; Rao. P.; Noll. B.C.; Michl.; *Collect. Czech. Chem. Commun.* **2001**, 66, 1238.
4. Jelinek. T.; Patricia Baldwin.; W. Robert Schmidt.; Christopher A. Reed.; *Inorganic Chemistry*, Vol. 32, No.10, **1993**.
5. King. B.T.; Janoušek. Z.; Grüner. B.; Trammell. M.; Noll. B.C.; Michl.; *J. Am. Chem. Soc.* **1996**, 118, 3313-3314.

Studium vlastností komplexů Fe(III) s ligandy typu Schiffových bází

Autor: Radka Zvěřinová
Ročník: 4.
Ústav: Ústav anorganické chemie
Školitel: Ing. Irena Hoskovcová, CSc.



Obr. 1 H₂L



Obr. 2
N,N'-bis(salicyliden)ethylenediamin

Komplexy, obsahující ligandy typu Schiffových bází, mají uplatnění ve farmacii, v modelování biomolekul nebo při přípravě komplexů s definovanými elektronovými vlastnostmi. Železité komplexy s ligandy typu N-salicylidenaminokyselina, které jsme měli k dispozici spolu s jejich infračervenými spektry a cyklickými voltamogramy, nemají složení odpovídající předpokládanému obecnému vzorci $M[FeL_2]$, ale jedná se o nejméně čtyřjaderné sloučeniny. Abychom mohli určit jejich strukturu, syntetizovali jsme komplex s definovanou strukturou, $(\mu\text{-oxo})\text{-bis}[N,N'\text{-ethylenediamin-bis(salicylaldiminato)železitý}]$. Tento dvoujaderný komplex jsme prozkoumali spektroskopickými a elektrochemickými metodami a výsledky těchto měření jsme srovnali s výsledky zjištěnými pro výše zmíněné vícejaderné komplexy.

Dotace erbia do porézních skel pro fotonické aplikace

Autor: Stanislav Rubáš
Ročník: 5.
Ústav: Ústav anorganické chemie
Školitel: Ing. Pavlína Třešňáková, Ph.D.

Jednou z velmi perspektivních možností použití tenkých vrstev ve skleněných podložkách jsou aktivní optické vlnovody obsahující laserově aktivní ionty. Pro přípravu aktivních vlnovodů s nízkými optickými ztrátami a co největším optickým ziskem je žádoucí, aby „aktivní“ dopanty byly obsaženy pouze v oblasti vlnovodu. Je-li aktivním dopantem Er^{3+} , pak tyto tenké vrstvy mohou být základními součástmi optických zesilovačů nebo vlnovodných laserů pracujících na telekomunikační vlnové délce 1530 nm. Tato práce je složená ze dvou základních částí: (i)

syntézy vhodných komplexních sloučenin a (ii) difúze komplexních sloučenin do porézních silikátových skel a následné postupné sintrování vzorku.

Pro toto studium byly navrženy a syntetizovány komplexní sloučeniny erbia neobsahující hydroxylové skupiny, které by významným způsobem zkracovaly doby života excitovaných stavů dopantu. Dotace byla prováděna při laboratorní teplotě difuzí z nevodného roztoku obsahujícího erbitou koordinační sloučeninu, následně byly připravené vzorky sintrovány při vyšší teplotě pro dosažení homogenního povrchu. Po dotaci byly skleněné vzorky naleštěny a charakterizovány řadou metod se zaměřením na složení připravených optických vrstev a na jejich spektroskopické vlastnosti.

Likvidace odpadních vod po výrobě třaskavin

Autor: Štěpán Huber
Ročník: 4.
Ústav: Ústav anorganické chemie
Školitel: ing. Libor Mastný, CSc.
ing. Zlatko Šrank, CSc.

Odpadní vody z výroby výbušnin jsou velmi nebezpečným odpadem nejen pro možnost exploze, ale i pro toxické látky, které často jejich likvidací vznikají. Je mnoho teoretických a praktických způsobů, jak tyto látky likvidovat, většina s sebou však přináší další problémy spojené s účinností či ekologií likvidace, případně korozivní vlivy na používané vybavení.

V práci byla testována možnost likvidace tohoto typu odpadu s využitím fotokatalytické oxidace na tenké vrstvě fotoaktivního TiO_2 Degussa P-25. Vzorky odpadních vod z výroby azidu olovnatého, pikraminátu olovnatého a trinitroresorcinátu olovnatého, stejně jako vody modelové byly exponovány UV záření výbojky s dominantní vlnovou délkou 254nm. Postupné odbourání třaskavin v odpadních vodách bylo vyhodnocováno na základě barevných změn roztoků nebo intenzity změny zabarvení po přidání indikační látky spektrofotometrem ColorQuest XE. Bylo rovněž posuzováno, do jaké míry lze tento proces ještě urychlit přidáním dalšího oxidačního reagentu.

Vliv substituce Ba za Ca, Sr na vlastnosti supravodiče Bi-2223

Autor: Tomáš Gruber
Ročník: 4.
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 pro tuto práci byla hypotéza, že náhrada některých atomů ve struktuře za atomy větší ze stejné podskupiny povede ke zvětšení pnutí v mřížce, čímž by měly být ovlivněny transportní vlastnosti supravodiče.

Cílem práce bylo zjistit, jak se změny magnetické a elektrické vlastnosti (kritická teplota, kritická proudová hustota) a poměr množství jednotlivých fází v supravodivém systému Bi – Sr – Ca – Cu – O, pokud v něm provedeme částečnou substituci vápníku, resp. stroncia baryem. Vzorky supravodičů o stechiometrickém složení $\text{Bi}_{1,6}\text{Pb}_{0,4}\text{Sr}_2\text{Ca}_{2,5-y}\text{Ba}_y\text{Cu}_{3,5}\text{O}_\delta$ a $\text{Bi}_{1,6}\text{Pb}_{0,4}\text{Sr}_{2-x}\text{Ca}_{2,5}\text{Ba}_x\text{Cu}_{3,5}\text{O}_\delta$, kde $y = 0; 0,4; 0,8; 1,2; 1,6$ a $x = 0; 0,4; 0,8; 1,2$ byly připraveny standardní reakcí v pevné fázi (technologický postup – mletí 10 minut, 1. kalcinace při teplotě 800°C po dobu 24 hodin, mletí 10 minut, 2. kalcinace při teplotě 800°C po dobu 24 hodin, mletí 10 minut,

lisování tablet 30 sekund při tlaku 800 MPa a slinování tablet při teplotě 840°C po dobu 168 hodin). U takto připravených vzorků byla naměřena teplotní závislost elektrického odporu a kritické proudové hustoty. Fázové složení vzorků bylo určeno RTG fázovou analýzou.

Sekce: Anorganická technologie

Příprava elektrod pro nízkoteplotní palivové články

Autor: Petr Mazúr
Ročník: 4.
Ústav: Ústav anorganické technologie
Školitel: Ing. Martin Paidar PhD.

Nízkoteplotní palivové články patří již řadu let mezi velice perspektivní zdroje elektrické energie a proto je ve světě věnováno značné úsilí na jejich výzkum a zdokonalování. Cílem práce bylo reprodukovatelně připravit elektrodu do vodíko-kyslíkového palivového článku typu PEM. Katalyzátor Pt byl vylučován elektrochemickou depozicí z roztoku na uhlíkový substrát GDL®. Množství vyloučené platiny bylo kontrolováno pomocí protečeného náboje. Následně bylo rovněž provedeno spektroskopické stanovení úbytku platiny v roztoku. Na vyloučenou platinu byl dále nanášen iontově vodivý polymer Nafion®, ve snaze zvýšit stupeň využití katalyzátoru. Vlastnosti připravených elektrod byly poté testovány v palivovém článku.

Studium elektrochemických vlastností polykrystalické platinové elektrody v roztocích kyseliny sírové

Autor: Petr Mazúr
Ročník: 4.
Ústav: Ústav anorganické technologie
Školitel: doc. Dr. ing. Josef Krýsa, Dr. Sydney White, prof. A. A. Wragg

Polykrystalická platina se běžně používá jako elektroda pro funkční elektrostimulaci nervových tkání. Na tuto elektrodu, umístěnou v těle živého organismu, jsou uplatňovány vysokofrekvenční proudové pulsy a odezvy neuronů jsou sledovány a zaznamenávány. Tato metoda by v budoucnu mohla pomoci lidem s poškozeným nervovým systémem, např. páteří.

Elektrolytem jsou v tomto případě tělní tekutiny, tedy směsi mnoha organických a anorganických sloučenin (např. chloridových iontů), které se mohou oxidovat nebo redukovat na platinovém povrchu, za vzniku produktů, mnohdy i toxických pro organismus. Při stimulaci je proto třeba pracovat pouze v oblasti potenciálů, kdy na povrchu probíhají pouze nefaradayické děje (nabíjení dvojvrstvy, adsorpce, desorpce).

Cílem této práce bylo prozkoumat chování platinové elektrody v 0,5 molární kyselině sírové metodou cyklické voltametrie. Byl sledován vliv katodických a anodických limitů, rychlosti změny potenciálu a kontaminace roztoku chloridy a kyslíkem.

Tvarování oxidu titaničitého do formy kuliček

Autor: Lucie Ondryášová
Ročník: 2.
Ústav: Ústav anorganické technologie
Školitel: Ing. Miloslav Lhotka, Ph.D.

Oxid titaničitý se používá nejenom jako pigment, ale i jako katalyzátor pro celou řadu procesů. Jedním z důležitých parametrů tohoto katalyzátoru je jeho tvar. Předkládaná práce se proto

zabývá tvarováním oxidu titaničitého do formy kuliček metodou přikapávání suspenze daného oxidu do roztoku. Podle literatury lze touto metodou kuličkovat velkou řadu anorganických materiálů. Podstatou procesu je přidavek 1-2% polysacharidu do suspenze a tvorba kuliček ve vodném roztoku dusičnanu dvojmocného nebo trojmocného kovu. Dávkování je pak prováděno přes speciální trysky upevněné do teflonové matrice. Celý proces tvorby kuliček byl odzkoušen laboratorně a následně v poloproduktu na speciální lince pro výrobu kuliček ve firmě Eurosupport Manufacturing Czechia s.r.o. s cílem zvětšit průměr výsledných kuliček. Na základě těchto experimentů pak byla navržena nová teflonová hlava s tryskami a upravena technologie kuličkování.

Příprava a charakterizace částicových vrstev oxidu titaničitého

Autor: Patrick Kimutai Tum
Ročník: 4.
Ústav: Ústav anorganické technologie
Školitel: Ing. Martin Zlámal, doc. Dr. Ing. Josef Krýsa

Práce se zabývá přípravou a charakterizací částicových vrstev oxidu titaničitého. K nanesení vrstev byly použity tři různé typy fotokatalyzátoru: P25 (Degussa) a AV-01 a AV-03 (Precheza). Vrstvy byly nanášeny elektroforeticky na vodivou podložku (nerezový plech) ze suspenze práškového TiO_2 v metanolu. Vložené napětí bylo 4 V a doba elektroforézy 5-60 s. Bylo zjištěno, že množství naneseného TiO_2 je přímo úměrné době elektroforézy. Dalším parametrem byla předúprava suspenze TiO_2 v metanolu v ultrazvukové lázni po dobu 30 minut. K charakterizaci vrstev byla použita řádkovací elektronová mikroskopie a ke stanovení fotokatalytické aktivity modelová látka Oranž II.

Z výsledků měření je patrné, že s rostoucím množstvím naneseného fotokatalyzátoru stoupá rychlost fotodegradace modelové látky. Vrstvy tvořené částicemi P25 mají nejvyšší fotoaktivitu ze všech použitých materiálů. Dále bylo zjištěno, že předúprava TiO_2 suspenze v ultrazvukové lázni před elektroforetickým nanášením nemá pozitivní vliv na fotoaktivitu výsledné vrstvy.

Does mercury have an influence on the PEM fuel cell lifetime?

Author: Sven Stammwitz
Academic year: 3.
Department: Department of Inorganic Technology
Supervisor: Ing. Sabina Moravcová, PhD.

Simultaneously with the increase of the world population and its life standard the energy demand of the mankind is increasing. In this way the fuel cell became a promising alternative to the recent technologies of the energy production based on the fossil fuels. One reason for that is the high fuel cell efficiency. It is because it converts chemical energy directly to the electrical one without a heat machine step. Another point is, that the fuel cell produces locally practically no pollution. It is because the only product of the reaction in the PEM fuel cell is water. Recently various fuel cells applications are proposed, between others computers, mobile phones, cars or local energy sources.

The presented fuel cell research is targeted in one of these directions. It is a part of the broader project aiming to establish in city Neratovice demonstration public fuel cell city bus. The excessive hydrogen produced by the brine electrolysis using amalgam technology in Spolana Neratovice will be used as a fuel. Because of its origin, hydrogen is contaminated by the traces of mercury in concentration of approximately $20 \mu\text{g m}^{-3}$. Surprisingly, no information can be obtained from the literature on the influence of the traces of mercury on the PEM type fuel cell

lifetime. The aim of this project is to provide an answer on this question and to identify the contamination level, which may result in amalgamation of the anode catalyst and thus significant reduction of the fuel cell lifetime.

Využití CFD při návrhu a optimalizaci cely pro permeační měření na planárních membránách

Autor: Jan Kubata
Ročník: 4.
Ústav: Ústav anorganická technologie
Školitel: Dr. Ing. Vlastimil Fíla

Separace plyných směsí obsahujících methan, některé lehké uhlovodíky, oxid uhličitý a dusík je v posledních letech předmětem zájmu, neboť se tyto složky vyskytují v zemním plynu, případně v plynu vznikajícím při anaerobním zpracování biomasy. Pro další zpracování tohoto plynu v chemických technologiích nebo pro energetické účely je třeba oddělit zejména uhlovodíky od oxidu uhličitého a dusíku.

Cílem této práce je navrhnout a následně optimalizovat konstrukci cely s vestavěnou planární membránou. Takto navržený systém bude dále použit pro určení permečních charakteristik mikroporézních membrán při separaci uhlovodíků a oxidu uhličitého. K tomuto návrhu a následným výpočtům je použito CFD programů Gambit (návrh konstrukce) a Fluent (samotný matematický model).

Sekce : Anorganické nekovové materiály I

Systém analýzy cementářského slínku

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

Analýza slínku je nedílnou součástí kontroly při výrobě portlandského cementu. V současné době je slínek charakterizován chemickým složením (především CaO , Al_2O_3 , SiO_2 , Fe_2O_3 a dalších) a mineralogickým složením (mikroskopicky na nábrusech). Tento systém analýzy slínku však v současné době postrádá některé důležité informace. V práci je navrhován rozšířený systém hodnocení cementářského slínku a to: mikroskopickou analýzou (nábrus) rtg. fluorescenční analýzou (celkové chemické složení), rtg. difrakční analýzou (kvalitativní a kvantitativní mineralogické složení). Mikroskopická analýza nábrusů je prováděna na optickém mikroskopu s digitálním analyzátozem obrazu systému Lucia G, kdy lze zjistit habitus případně i obsah jednotlivých fází. Klíčovou otázkou pro provádění mikroskopické analýzy digitálním analyzátozem je způsob přípravy nábrusů. Rtg. difrakční prášková analýza využívá vyhodnocovacího programu High Score X'pert Plus ve spojení s databází minerálů PDF2, jenž umožňuje kvalitativní stanovení jednotlivých modifikací slínkových minerálů. Dále je prováděna kvantitativní analýza slínkových minerálů (Rietveld).

Projekt systému je podporován Svazem výrobců cementu ČR.

Kompozitní žárovzdorné materiály s přidavkem metakaolinu

Autor: Jakub Fiala
Ročník: 5
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: doc. Ing. Jaroslav Kutzendörfer, CSc.

Metakaolin v současné době patří mezi nedostatečně využitě suroviny a je důležité hledat jeho další uplatnění. Tato práce předkládá jednu z možných cest využití této suroviny a to ve speciálních běžných žárobetonech (RCC), kde je snaha ho použít jako plastifikátor směsi. Tyto speciální RCC materiály se od běžných žárobetonů liší nízkým obsahem hlinitanového cementu. Cílem této práce bylo zlepšit zpracovatelnost těchto směsí při zachování stejného vodního součinitele a zjistit ovlivnění žárových vlastností. Byly sledovány dva hlavní směry jednak vliv přidavku metakaolinu (1 až 5 hm. %) a vliv částečné náhrady hlinitanového cementu metakaolinem (1 až 2 hm. %) s ohledem v obou případech na zpracovatelnost těchto směsí a dále na mechanické a termomechanické vlastnosti. Ukázalo se, že nízké přidavky (max. do 3 hm. %) zlepšují plastičnost těchto speciálních RCC žárobetonů. Vliv u těchto přidavků na mechanické a termomechanické vlastnosti nebyl prokázán. Vedle toho se podařila pouze náhrada 1 hm. % hlinitanového cementu metakaolinem, aniž by došlo ke zhoršení mechanických vlastností. Lze konstatovat, že pouze malé množství metakaolinu, ať už jako přídatek nebo náhrada cementu v žárobetonové směsi, je žádoucí pro zlepšení plastičnosti při zachování stejného vodního součinitele těchto sledovaných speciálních RCC žárobetonů.

Vliv PVA na vlastnosti vodné suspenze ZrO₂

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

Práce se zabývá stabilizací organické pórotvorné přísady ve vodné suspenzi ZrO₂ určené k přípravě ZrO₂ keramiky s řízenou pórovitostí.

Z dosavadních poznatků plyne, že přidavkem PVA lze ovlivnit kinetickou a koloidní stabilitu suspenze s přidanou pórotvornou přísadou a dále, že přidavek PVA rovněž příznivě ovlivňuje mechanické vlastnosti (pevnosti) těles po vysušení. Připravené suspenze o složení 75 až 77 hm% pevné fáze a 0 až 0,8 hm% PVA a dále suspenze o konstantním obsahu pevné fáze 77 hm% s proměnným obsahem PVA v intervalu 0 až 0,4 hm% byly proměřeny na rotačním viskozimetru. Z měření reologických vlastností připravených suspenzí vyplývá, že pro zachování stability u suspenzí s proměnným obsahem pevné fáze a PVA je limitujícím složení 76 hm% ZrO₂ a 0,5 hm% PVA a u suspenzí s konstantním obsahem pevné fáze 77 hm% ZrO₂ je maximální možný přídavek 0,3 hm% PVA. Byl potvrzen pozitivní vliv přidavku PVA na mechanickou pevnost po vysušení u připravených těles. Dále bylo vyhodnoceno, že přidavek PVA nemá významný vliv na mikrostrukturu, resp. objemovou hmotnost připravených těles. Byla vyhodnocena optimální koncentrace PVA v suspenzi s obs. 77 hm% ZrO₂ vhodná pro stabilizaci přidávané pórotvorné přísady.

Kvantová simulace křemičitých struktur

Autor: Soňa Charvátová
Ročník: 4.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: O. Gedeon, J. Macháček

Molekulové simulace patří k jednomu z hlavních nástrojů zkoumání struktury a vlastností materiálů. Tato práce se zabývá výpočtem meziatomového potenciálu na malém klastru molekuly Si(OH)₄, který lze následně použít pro simulace velkých neuspořádaných systémů s několika tisíci atomy.

Pro nabitování parametrů meziatomových potenciálů se vybrala základní strukturní jednotka křemičitých systémů, (SiO₄)⁴⁻, na kterou se navázaly čtyři vodíky. Optimalizace geometrie byla provedena pomocí ab-initio simulace, založená na teorii funkcionálu elektronové hustoty (DFT) s použitím simulačního programu VASP. Tento přístup je v současnosti jediný, který umožňuje simulace velkých amorfních systémů. Zkracováním a prodlužováním jedné vazby Si-O a provedením následné elektronové relaxace byla vytvořena potenciálová funkce, která charakterizuje závislost vazebné energie na meziatomové vzdálenosti. Proměřením energie vazebných úhlů se získaly další výsledky, jež umožňují srovnat výsledky VASPU se sofistikovanějšími kvantovými výpočty. V neuspořádaných systémech se vyskytují různě deformované klustry a tedy prezentované výsledky nabízejí základní náhled na energetickou bilanci těchto strukturních jednotek. Získané výsledky budou převedeny na vytvoření empirické potenciálové funkce v programu GULP.

Vliv tvaru dávkovacího žlabu na chemickou homogenitu

Autor: Rostislav Lošot
Ročník: 4.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Doc. Ing. Stanislav Kasa, CSc.

Chemická a teplotní homogenita skloviny na výstupu z dávkovacího žlabu (DŽ) jsou považovány za základní atributy, které by měla sklovina splňovat, protože mají přímý vliv na následující tvarovací proces. Prostřednictvím matematického modelování pomocí CFD-Computational Fluid Dynamics programu FLUENT, byla zjišťována chemická homogenita v lomených pravoúhlých dávkovacích žlabech, které se lišily geometrií ohybu. Skelnou nehomogenitou, tj. šířkou na vstupu do dávkovacího žlabu byla sklovina obohacena o ZrO_2 a Al_2O_3 .

Hodnotícím kritériem homogenizačního účinku byla koncentrace směsi c_{mix} , která nabude hodnoty 1 právě tehdy, když dojde k úplné homogenizaci skloviny a šířky. Výstupy z matematického modelu ukázaly, jakým způsobem ovlivňuje geometrie ohybu homogenitu skloviny na výstupu z dávkovacího žlabu a jak zásadní význam má poměr hustot šířky a základní skloviny, neboť přímo na něm závisí difúzní procesy, které jsou řídicími ději chemické homogenizace.

Vliv obsahu Er a Yb na fotoluminiscenci křemičitých skel o vlnové délce 1,5 μm

Jméno: Petra Mesteková
Ročník: 3.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Dr. Ing. Martin Míka

S ohledem k rostoucímu zájmu o efektnější a rychlejší přenos digitálních dat se hledá co nejúčinnější cesta k dosažení tohoto cíle. Ideálním řešením je užití zcela optického systému místo nedokonalé OEO (optic-elektric-optic) struktury. Integrované komponenty z aktivně optických skel jsou na rozdíl od současných komponent vláknové techniky menší, jednodušší, a tím i levnější na výrobu. Pro přípravu aktivních optických vlnovodů se v naší laboratoři vyvíjejí křemičitá skla na bázi Na_2O - ZnO - SiO_2 s přidavkem atomů Er a Yb ve formě oxidů. Pro toto základní složení hledáme optimální koncentraci Er a Yb s cílem dosáhnout maximální intenzity luminiscence v oblasti kolem 1,5 μm , při maximální šířce emisního pásu a při době života excitovaného stavu alespoň 5 ms. Plánovaným experimentem byla navržena a utavena skla s různým obsahem Er a Yb. Vzorky skel byly nařezány a opticky vyleštěny. U takto připravených skel byla změřena jejich absorpční a emisní spektra. K excitaci emisních spekter byl použit laser o vlnové délce 980 nm. V práci je diskutován vliv koncentrace Er a Yb na zmíněné optické vlastnosti.

Protonově vodivé membrány pro středně teplotní H_2/O_2 palivové články

Jméno: Jakub Michal
Ročník: 4.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Dr. Ing. Martin Míka

Středně teplotní kyslíko-vodíkové palivové články představují alternativní zdroj elektrické energie, který by mohl v budoucnu umožnit náhradu spalovacích motorů motory elektrickými. Palivové články využívají přímé přeměny chemické energie na elektrickou. Výhody spočívají ve vyšší účinnosti a především v šetrnosti k životnímu prostředí, neboť odpadem je čistá voda. Klíčovou složkou článku je hybridní anorganicko-organická fosforečno-křemičitá membrána s vysokou protonovou vodivostí, která umožňuje pohyb protonů mezi anodou a katodou. Současné protonově vodivé membrány musí být udržovány v hydratovaném stavu atmosférou s vysokou relativní vlhkostí, aby byla zachována jejich vysoká protonová vodivost. Pro použití v automobilech se předpokládá pracovní teplota palivového článku v intervalu 120-130 °C. Při teplotách nad 100°C je však udržování membrán v hydratovaném stavu technicky velmi náročné a drahé. Proto pracujeme na syntéze membrán, která jsou protonově vodivé při teplotách od 100°C do 130°C za velmi nízké relativní vlhkosti. Složení membrán upravujeme vzhledem k dosažení optimálních elektrochemických, mechanických a chemických vlastností. Protonovou vodivost měříme impedanční spektroskopií a výsledné chování membrány testujeme přímo na kyslíko-vodíkovém palivovém článku.

Příprava leucitových dentálních kompozitů

Autor: Martin Pallich
Ročník: 5
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Alexandra Kloužková

V současnosti je v dentální implantologii úspěšně používáno spojení nosných kovových čepů a vrchních kovokeramických korunek. Hlavní krystalickou fází keramické části kovokeramických náhrad je leucit ($KAlSi_2O_6$). Snadná spájitelnost keramického kompozitu s kovovou konstrukcí je způsobena vysokou hodnotou koeficientu teplotní roztažnosti tetragonálních leucitových zrn rozptýlených v amorfní matrici. Dosavadní přípravy leucitových dentálních kompozitů byly založeny na krystalizaci leucitu z taveniny v průběhu chlazení z teploty výpalu nebo na oddělené vysokoteplotní syntéze leucitu. Oba děje jsou časově dosti náročné, proto jsou zkoumány nové technologie přípravy dentálních surovin. V nedávné době byla vyvinuta metoda hydrotermální syntézy tetragonálního leucitu, která umožňuje přípravu monodisperzního leucitového prášku.

Cílem této práce je pomocí technologie hydrotermální syntézy leucitového prekurzoru připravit dentální surovinu s přesně definovaným podílem krystalické fáze a amorfní matrice. Následným tepelným zpracováním takto připravené suroviny obsahující 20% tetragonálního leucitu byl získán leucitový kompozit jehož hodnota koeficientu teplotní roztažnosti je blízká hodnotám kovové konstrukce.

Vliv oxidů vzácných zemin na vlastnosti skel

Autor: Anna Petrželová
Ročník: 5
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Miroslav Rada, CSc.

Skupina prvků velmi podobných chemických a fyzikálních vlastností, které v periodické tabulce následují za lanthanem, se nazývají lanthanoidy. Sem se řadí tyto prvky: cer, praseodym, neodym, promethium, samarium, europium, gadolinium, terbium, dysprosium, holmium, erbium, thulium, ytterbium a lutecium.

Použití oxidů vzácných zemin ve sklářském průmyslu se v současné době značně rozrůstá, protože se rok od roku zvyšuje produkce lanthanoidů, a tím klesá i jejich cena. Bylo zjištěno, že už i malé přídavky těchto oxidů výrazně ovlivňují vlastnosti skloviny. Pro jejich použití v masových výrobcích je nutno znát, jak obsah těchto oxidů ovlivňuje důležité parametry využitelné v technologické praxi – měrný elektrický odpor, viskozitu, RMS, povrchové napětí, krystalizační a dilatometrické veličiny, hydrolytickou odolnost, spektrální propustnost a L^* - a^* - b^* souřadnice.

Výše uvedené údaje se v literatuře objevují pouze sporadicky, proto tento úkol pro oxidy neodymu, praseodymu, thulia a lutecia s aplikací na 24%ní olovnatý křišťál bude předmětem diplomové práce. Zde předkládaná práce pak zpracovává první část tohoto úkolu – vliv obsahu oxidu neodymu na některé z výše uvedených parametrů.

Sekce : Anorganické nekovové materiály II

Vliv podmínek kalcifikačního procesu na tvorbu bioaktivního povrchu na Ti slitině

Autor: Petra Haufová
Ročník: 4.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Dr. Ing. Dana Rohanová

Titanové slitiny jsou používány jako náhrady tvrdých tkání lidského těla (endoprotézy, dentální náhrady) díky svým mechanickým vlastnostem. Části inertního materiálu, které musí s kostí srůst (být bioaktivní) je potřeba upravit pomocí silných kyselin (HF, HCl) a zásad (NaOH). Pro zajištění rychlého srůstu s minimem negativních reakcí organismu je vhodné povrch implantátu dále upravit tzv. prekalciфикаcí. Při tomto kroku se chemicky upravený povrch vzorku exponuje v roztoku, který je silně přesycen vůči kalcium-fosfátům, precipitujících přímo na jeho povrchu. Prekalciфикаční roztok (SCS) je nestabilní a ihned po jeho přípravě se v něm začínají srážet kalcium fosfáty ve formě bílých vloček. Na povrchu Ti slitiny se tvoří jehlicovité krystalky sféroliticky uspořádané (TCP – trikalciumfosfátu) v průměru od 10 do 100 μm nebo fáze, která se v optickém mikroskopu jeví jako amorfní. Cílem práce bylo zjistit, jakým způsobem může teplota (37°C a 20°C) a stáří (čerstvý a týden starý) roztoku SCS ovlivnit velikost krystalků a kvalitu fází tvořících se na povrchu Ti slitiny. Byly měřeny hodnoty pH roztoku, koncentrace Ca^{2+} i $(\text{PO}_4)^{3-}$ iontů, pozorován povrch pomocí optické mikroskopie. V druhé části práce in vitro testem v SBF (Simulated Body Fluid) je pozorován vliv jednotlivých fází vytvořených prekalciфикаčními roztoky na tvorbu HAp.

Vliv povrchových sil na chování sklářského kmene

Autor: Lucie Hrušková
Ročník: 5.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. František Novotný, CSc.
Konzultant: Doc. Ing. Stanislav Kasa, CSc.

V prvních stádiích tavení sklářského kmene dochází ke vzniku různých meziproductů. I když v závěrečné fázi tavení všechny meziproducty zreagují, jejich přechodné fyzikální a chemické vlastnosti mají významný vliv na průběh technologického procesu tavení.

Prvotní děje ve sklářském kmeni jsou velkou měrou ovlivněny povrchovými jevy, jako je povrchové napětí tavenin a úhel smáčení jednotlivých zrn surovin těmito taveninami. Především chování karbonátových tavenin, které mají nízkou viskozitu je silně ovlivněno povrchovými jevy. Předem utavené karbonátové taveniny sody s proměnným obsahem vápence byly vkládány do žárového mikroskopu a sledována jejich interakce s různými povrchy. Bylo také zjištěno, že přítomnost atmosféry CO_2 má závažný vliv na vznik povrchových jevů.

Nalezené výsledky přispívají k objasnění průběhu tavení a mohou sloužit k doplnění a upřesnění dat potřebných k matematickému modelování kmene, tj. matematickému modelu přeměny sklářského kmene ve sklovinu.

Fotosenzitivní skla pro optické vlnovody

Autor: Věra Jandová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Dr. Ing. Martin Míka

V dnešní době se optické sklo stává velmi důležitým materiálem pro moderní fotonická zařízení, která jsou klíčová pro rychlý přenos a zpracování optického signálu v telekomunikační technologii. Významné postavení zde zaujímají fotosenzitivní skla vhodná pro výrobu miniaturních vlnovodných struktur přímým zápisem laserem. Potřebná dlouhotrvající změna indexu lomu se vyvolá působením záření o specifické vlnové délce. Změna indexu lomu fotosenzitivních skel na bázi GeO_2 je úměrná koncentraci paramagnetických center $E'(Ge)$. Podařilo se nám připravit sérii fotosenzitivní sodno-germaničito-křemičitých skel. Skla byla ozařována Hg výbojkou o $\lambda = 240 \text{ nm}$. Nárůst koncentrace těchto center byl sledován EPR (elektronová paramagnetická rezonance) spektroskopií. Po vypnutí výbojky byla měřena jejich stabilita. Koncentrace paramagnetických center $E'(Ge)$ narůstala ve vzorcích podle funkce $y = A + B \cdot [1 - \exp(-t / t_0)]$, kde t je čas a A , B a t_0 jsou konstanty. Nárůsty byly od 10 – 530 % v závislosti na složení skla a relaxační doby t_0 se pohybovaly od 500 do 1800 s. Po vypnutí UV záření byly pozorovány poklesy do 15 %. Nejcitlivější skla použijeme jako substrát pro přípravu optických vlnovodů přímým zápisem laserovým paprskem.

Dynamika teplotních polí plynové nahřívací pece

Autor: Helena Kočárková
Ročník: 4.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Doc. Ing. Stanislav Kasa, Csc.

Homogenní prohřátí mačkácí tyče je pro přesnost lisovaného výrobku velmi důležité. Matematické modelování je jednoduchá a poměrně přesná metoda umožňující zjistit optimální umístění mačkácí tyče v peci pro konkrétní požadavky prohřátí. Výsledky této práce pomohou nalézt vhodnou polohu mačkácích tyčí v nahřívací peci, která byla dosud určována na základě provozních zkušeností. Vstupní hodnoty k výpočtu matematického modelu byly získány měřeními na reálné peci v provozu sklárny. Práce byla rozdělena do dvou částí. Nejprve byl vytvořen matematický model proudění spalin v peci bez mačkácí tyče. Na základě výsledků zmíněného matematického modelu a skutečných postupů ve sklárně bylo navrženo 6 dalších matematických modelů, které se lišily polohou mačkácí tyče v nahřívací peci, za účelem zjištění technologicky vhodného ohřevu mačkácí tyče.

Výsledky práce ukázaly, že umístění mačkácí tyče v nahřívací peci vůči poloze hořáku v peci je velmi důležité, neboť ovlivňuje rozložení teplot v tyči tak, že tyč umístěná ve větší vzdálenosti od hořáku je lépe prohřátá. To je dáno rozložením proudění spalin v peci ovlivněné geometrií vyhřívaného prostoru. Poněkud menší vliv na celkové prohřátí tyče má hloubka zasunutí tyče do pece.

Využití infračervené spektroskopie ke studiu stárnutí keramických materiálů

Autor: Jaroslava Křížková
Ročník: 4.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Jana Andertová, CSc.
Školitel specialista: Ing. Vladimír Machovič, CSc.

Práce se zabývá studiem stárnutí a degradace keramického materiálu, konkrétně studiem fenoménu nevratné vlhkostní roztažnosti materiálu pro přípravu obkladových prvků. Byl studován vliv surovinového složení vstupních směsí na tendenci keramického materiálu podléhat objemovým změnám v důsledku hydrotermální expozice. Kromě fyzikálního stanovení objemové roztažnosti keramického materiálu, tj. stanovení délkových změn po normované hydrotermální expozici, byla pro detekci vazebných změn ve střepu využita infračervená spektroskopie. Potvrzení změny charakteru –O-H vazeb, resp. změny obsahu hydroxylových skupin v důsledku hydrotermální expozice je v přímé korelaci se stanovenými hodnotami objemových změn.

Příprava a charakterizace porézních keramických vrstev

Autor: Alena Kunertová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Eva Gregorová, CSc.

Porézní keramika může plnit funkci filtrů, nosičů katalyzátorů nebo membrán. Jednou z možností jak řídit velikost pórů je využití biopolymerních přísad.

Pro přípravu porézních keramických vrstev byly použity korundové vodné suspenze s obsahem pórotvorného činidla 25 obj.% (vztaženo na pevnou fázi). Jako pórotvorné činidlo byl použit bramborový, kukuřičný a rýžový škrob s velikostí částic $D_{50} = 50, 14$ a $5 \mu\text{m}$. Porézní vrstvy byly připraveny jednak litím suspenzí na sádrový blok (škrob má funkci pórotvorného činidla) a jednak škrobovým litím (škrob jako pórotvorné a tělesotvorné činidlo) do kovové formy. Po výpalu na 1570°C byly zhotoveny leštěné nábrusy, pořízeny snímky mikrostruktur a provedena obrazová analýza vzniklých porézních struktur. Pro srovnání s velikostí původních škrobových zrn bylo počtově vážené rozdělení velikosti pórů přepočteno na objemově vážené rozdělení. Bylo provedeno vzájemné srovnání velikosti pórů keramik připravených dvěma různými technologiemi a prokázáno, že v případě škrobového lití závisí velikost pórů na stupni bobtnání použitého škrobu, zatímco u tradičního lití odpovídá prakticky velikost pórů velikosti částic škrobu. Oba navržené způsoby umožňují přípravu vrstevnaté keramiky s dobrou soudržností jednotlivých vrstev.

Velikostní a tvarová charakterizace destičkovitých částic

Autor: Monika Nováková
Ročník: 5.
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Doc. Dr. Dipl.-Min. Willi Pabst

U částic nekulovitého tvaru není pojem velikost jednoznačně definován. V praxi se tento problém obchází zavedením tzv. ekvivalentních průměrů. Problémem však zůstává, že ekvivalentní průměry naměřené různými metody (např. sedimentační analýzou, laserovou difrakcí, obrazovou analýzou) se liší, a sice tím výrazněji, čím více jsou částice anizometrické. Pro tyto částice je tedy vhodné až nezbytné kombinovat velikostní analýzu s analýzou tvarovou. V této práci je odvozena rovnice, která dovoluje výpočet tvarového faktoru (aspect ratio) pokud známe rozdělení velikosti ze sedimentační analýzy (tzn. Stokesovy průměry) a rozdělení velikosti skutečných průměrů destiček, které lze získat např. pomocí mikroskopické obrazové analýzy. Na druhé straně je konečným cílem aplikovat tuto rovnici přímo na výsledky sedimentační analýzy a laserové difrakce. K tomu je však nutná informace o orientaci částic vzhledem k laserovému paprsku (která může být buď kolmá nebo nahodilá). Tuto informaci, která je pro aplikaci odvozené rovnice rozhodující, lze získat pouze srovnáním výsledků obrazové analýzy a laserové difrakce. V této práci je toto srovnání provedeno pro systém destičkovitých částic (SiC). Klíčovým krokem pro srovnání s laserovou difrakcí je přitom transformace výsledků obrazové analýzy na objemově vážené rozdělení.

Vliv oxidů vzácných zemin na některé vybrané parametry průmyslově vyráběných skel

Autor: Miroslav Polák
Ročník: 3.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Miroslav Rada, CSc.

Doposud se ve sklářství využívaly vzácné zeminy hlavně jako odbarviva, k výrobě brýlových skel, skel pro optické přístroje, skleněných vláken a elektrod. Některé prvky (především cer a jeho sloučeniny) se používají i pro mechanické leštění skel.

V poslední době byl zaznamenán prudký pokles cen těchto látek, což otevírá nové možnosti využití lanthanoidů v průmyslové praxi.

Na základě předchozích výzkumů bylo zjištěno, že sloučeniny těchto prvků příznivě ovlivňují vlastnosti skel. Zkoumání vlivu daného množství oxidu vzácné zeminy, u kterého se ovlivňování parametrů již dříve jevilo jako nejpříznivější, se záměrem ukázat na možnost jeho širšího průmyslového využití při stěžejní aplikaci z hlediska jeho příznivého působení na čedičový proces je hlavním cílem předkládané práce.

V současné etapě práce je zkoumán vliv tohoto oxidu na výsledný stupeň vyčištění a povrchové napětí. Zkoumán ale bude i vliv na další významné technologické a užité parametry.

Pozorování je prováděno na 100g vzorcích těchto průmyslově vyráběných skel: float, bílá a zelená obalová sklovina, sodnovápenatý křišťál, barnatý křišťál a olovnaté křišťálové skloviny s obsahem 24 a 30 hmotnostních procent oxidu olovnatého.

Mrazuvzdornost keramiky

Autor: Jaroslava Polednová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Alexandra Kloužková, CSc.

Mrazuvzdornost je schopnost keramického výrobku vydržet za daných podmínek určený počet cyklů zmrazování a rozmrazování bez následného vzniku závad na střepu. Materiál instalovaný venku (déšť, sníh, led) je vždy vystaven mechanismu společného působení mrazu a vody. Když voda přechází z kapalného do pevného stavu, dochází k nárůstu objemu, v pórech vznikne mechanické namáhání, které může způsobit prasknutí materiálu. Zkoušky mrazuvzdornosti jsou přesně definovány příslušnou normou a k jejich měření je třeba dosti náročné technické vybavení. Existuje vztah mezi odolností vůči mrazu a nasákavostí keramického střepu, který lze v laboratorních podmínkách vyjádřit pomocí penetračního koeficientu vody. Jde o metodu jednoduchou, bez náročného zařízení.

Cílem práce bylo stanovit standardní vlastnosti střepu pálených tašek a porovnat jejich pórovou strukturu se stanovenou mrazuvzdorností a možnostmi jejího orientačního výpočtu. Měření bylo provedeno na vzorcích střešní krytiny po A) provozním výpalu, B) po normových mrazících cyklech. Zároveň byly hodnoceny vzorky pálené střešní keramické krytiny, která nevyhověla mrazícím testům a došlo k odprýsknutí vrchní vrstvy.

Mikrospektroskopická strukturní charakterizace keramických materiálů

Autor: Vendula Vítová
Ročník: 4.
Ústav: Ústav skla a keramiky
Školitel: Ing. Jana Andertová, CSc.
Školitel specialista: Ing. Vladimír Machovič, CSc.

Práce je pilotní studií možnosti využití mikrospektroskopických metod k analýze funkčně gradientních keramických materiálů. Ramanova spektroskopie je v poslední době široce používaná metoda pro strukturní charakterizaci kompozitních keramických materiálů. Práce je zaměřena na stanovení lokálního koncentračního poměru oxidů ve směsné keramice na bázi $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$. Metodou lití suspenzí do porézních forem byly připraveny dvojvrstvé vzorky standardů a provedena kalibrace poměru $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{ZrO}_2$ a mikroskopické stanovení koncentrace jednotlivých složek v kroku 1 μm . Pro měření byl použit disperzní Ramanův spektrometr fy Jobin Yvon model Labram HR vybavený konfokálním mikroskopem Olympus s objektivy 10x, 20x, 50x a 100x. Jako excitační zdroj byl využit laser o vlnové délce 532.2 nm o vstupním výkonu 50 mW. Vyvinutá technika by měla sloužit ke koncentračnímu mapování mezi jednotlivými přechodovými zónami vrstev $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$.

Sekce: Chemická technologie restaurování památek

Elektrochemické odstraňování chloridů z korozních produktů

Autor: Tereza Fuksová
Ročník: 5.
Ústav: ÚKMKI
Školitel: Ing. Jiří Děd, CSc.

Práce se zabývá metodami odstraňování chloridů z korozních produktů archeologických nálezů se zřetelem na elektrochemické postupy. Vysvětleny jsou příčiny, proč je účinnost elektrochemických metod malá. Experimenty na dvou typech zařízení v různém uspořádání nepotvrdily urychlující vliv průchodu stejnosměrného proudu na odsolování korozních produktů železa ani v případě, kdy odsolované předměty nebyly v kontaktu s katodou. Možná příčina v malé účinnosti použité migrační metody je v typu experimentálního materiálu, který byl uměle zasolen a pokles obsahu chloridů difúzí byl dominantní. Migrační odsolování s použitím dialýzy vrstvy slabě vodivého elektrolytu, ve kterém jsou umístěny odsolované předměty, je třeba ověřit na předmětech s původním obsahem chloridů.

**Průzkum kovových materiálů ze sousoší Trig
na Národním divadle**

Autor: Petra Guhlová
Ročník: 3.
Ústav: ÚKMKI
Školitel: Ing. Jiří Děd, CSc.

V rámci probíhající třetí etapy restaurování sousoší Trig na Národním divadle byla provedena metalografická analýza technikou klasické optické i elektronové mikroskopie výbrusů vzorků kovu z bronzového pláště koní z východního i západního sousoší a dále vzorků oceli nosné konstrukce z nábrežního koně západního sousoší. V rámci tohoto průzkumu bylo UZ metodou provedeno detailní proměření tloušťky bronzového pláště prvního koně z východního sousoší a na vytypovaných bodech i u všech zbývajících koní obou Trig. U odebraného vzorku ocelové nosné konstrukce byly určeny základní mechanické vlastnosti – pevnost v tahu, prodloužení a kontrakce, vrubová houževnatost pro potřeby dalších spolupracujících pracovišť, provádějících statické i dynamické posouzení restaurovaných plastik a rovněž byla identifikována výrobní technologie oceli pro nosnou konstrukci – zkujňování surového železa v Bessemerově konvertoru.

Použití dekalcifikované opuky jako pucolánové přísady

Autor: Lenka Kučerová
Ročník: 5.
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Kateřina Doubravová, Ph.D.

Práce je zaměřena na ověření možnosti použití dekalcifikované opuky jako pucolánové přísady. Ze vzdušného vápna se přidavkem pucolánů, tj. látek reagujících s Ca(OH)_2 , stává hydraulické pojivo. Hydraulická pojiva odolávají vodě a jsou pevnější, než je čistě vápenná malta.

Takovouto pucolánovou příměsí je i metakaolinit. Metakaolinit vzniká z jílového minerálu kaolinitu, který při teplotách 500-600°C mění svou strukturu na metakaolinit. Také opuka obsahuje jílové minerály. Lze předpokládat, že jejím vypálením při teplotách 500 – 600°C v ní vznikají struktury podobné metakaolinitu. Takto upravená dekalcifikovaná opuka by mohla být používána jako pucolánová přísada do vápenné malty.

Ze směsi jemně rozemleté dekalcifikované opuky, nepálené nebo vypálené při různých teplotách, a vápna byla připravena zkušební tělíska. Po 14 dnech byla sledována přítomnost C-S-H fází.

Použité metody analýzy: rentgenová difrakční analýza (XRD), termická analýza (DTA/TG), elektronový mikroskop.

Proces přípravy a umělé stárnutí albuminové fotografie

Autor: Linda Mišková
Ročník: 3.
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Petra Vávrová

Příprava albuminových fotografických papírů je známá od 2. poloviny 19. století. Touto technikou bylo vyrobeno velké množství fotografií, které podléhají degradačním faktorům. Abychom mohli navrhnout konkrétní restaurátorské a konzervátorské postupy pro tento druh fotografií, je nutné znát informace o chemickém složení materiálu a také technologický postup jejich vzniku. Ve své práci jsem se zabývala přípravou těchto fotografií podle historických postupů. Fotografie připravené touto technikou mají charakteristické sépiové zabarvení.

U takto připravených fotografií jsem sledovala vliv množství použitých chemických látek při jejich přípravě, dobu expozice a koncentraci ustalovací lázně pomocí CIELAB systému, který umožňuje sledování barevných změn. Dále jsem pozorovala změny při degradaci fotocitlivé vrstvy vyvolané umělým stárnutím fotografií.

Dekorace skla zlatými listy

Autor: Linda Mišková
Ročník: 3.
Ústav: Skla a keramiky
Školitel: Dr. Ing. Dana Rohanová
Konzultant: Doc. Ing. Martin Maryška, CSc.

Aplikace listů na sklo a keramiku je známá již po staletí. Naši předchůdci netušili, že vynalezli dekorační techniku, která přetrvá tisíciletí a v dnešní době se zařadí k tzv. nano-technologím. To, že tato technologie je převratná, dokazuje i dnešní výzkum v oblasti aplikací tenkých vrstev nanášených na různé typy materiálů, kdy dochází k úpravě vlastností původních materiálů. Nanesením vrstvy „nosiče“ (sol-gelu, rezinátu nebo jílu) s obsahem kovových prvků (nejčastěji Ag, Au, Cu, Bi, Pb, Sn) totiž docílíme nejenom barevné změny (vyredukované kovy tvoří

koloidní částice, které pohlcují světlo v oblasti VID a my vnímáme odražené světlo o určité vlnové délce jako barevný efekt), ale navíc mohou dosti významně upravit i chemickou odolnost nebo dodat povrchu materiálu antibakteriální vlastnosti (v případě použití Ag iontu). V práci jsme se zabývaly vlastnostmi listru s obsahem Au iontu (jako hlavní barvící složky) naneseným na sklo typu barnatého křišťálu, za účelem barevného dekorování povrchu skla do fialového odstínu. Listry jsou rezináty pryskyřičných mýdel, jejich chemie je dosti složitá a více či méně založená na empirických zjištěních. Listr aplikovaný na sklo se choval nestandardně a vybarvoval se do třech barevných odstínů (od žluté přes růžovou až po tmavě fialovou). Na základě navržených laboratorních testů (vliv ředění listru, dealkalizace povrchu skla a simulace redukčních podmínek povrchu skla) spolu se studiem morfologie povrchu, chemickou mikroanalýzou (SEM/EDS) a měřením absorpance vytvořených vrstev bylo zjištěno, že kvalita výsledného listru je citlivá na obsah alkálií v povrchové vrstvě skla nebo na redukčním chování skla pouze v případě nízké koncentrace (neboli tloušťky) nanesené vrstvy listru způsobeném jeho přílišným naředěním před jeho aplikací.

Degradace poměděného povrchu zinkových odlitků lvů ze zámku Zbiroh

Autor: Veronika Procházková
Ročník: 4.
Ústav: ÚKMKI
Školitel: Ing. Jiří Děd, CSc.

Na základě metalografické analýzy výbrusů vzorků z restaurovaných plastik lvů ze zámku Zbiroh byl stanoven rozsah korozního poškození poměděného zinkového odlitku pláště, především stav a stupeň zachování původní vrstvy pomědění. Dále bylo určeno složení a struktura použité zinkové slitiny a také byla identifikována technologie pomědění jednotlivých dílů plastik. Zjištěný stav korozního poškození a degradace vrstvy pomědění byl východiskem pro zpracování návrhu technologického postupu ošetření původního povrchu restaurovaných plastik – odstranění korozních produktů, konzervace a konečná povrchová úprava plastik po opravě necelistvostí a dalších mechanických poškození odlitků.

Vliv železoduběnkového inkoustu na pergamen

Autor: Tereza Pilousová
Ročník: 4.
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Martina Ohlidalová

V minulosti autoři pro psaní rukopisů, hudebních skladeb a grafických kreseb často používali různé druhy železoduběnkových inkoustů. Tento typ inkoustů je k těmto historickým dokumentům velmi korozivní, což může vést až k úplnému rozpadu papírové nebo pergamenové podložky. Z tohoto důvodu, jsme se zaměřili na sledování vlivu železoduběnkového inkoustu na pergamen. V práci jsou porovnávány 3 různé druhy pergamenů stárnuté po dobu 11 dní. Ke srovnání průběhu stárnutí jsou využity následující metody: mikroskopie, spektrofotometrie, skenovací elektronová mikroskopie, stanovení teplot smrštění a hodnot pH. Na základě získaných výsledků je diskutováno chování inkoustu během stárnutí.

Směsi polymerů a křemičitanových nanočástic jako ochrana povrchů kamenných památek

Autor: Blanka Kolinkeová
Ročník: 5.
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Panagiotis Manoudis, Department of Chemical Engineering, Aristotele University of Thessaloniki, 54124, Thessaloniki, Greece

Pokles povrchové energie minerálního substrátu (obdobného těm používaným u množství kamenných památek), způsobený aplikací ochranného polymerního povlaku, a současně zdrsňení povrchu nanočásticemi, může výrazně zvýšit jeho voděodolnost. V této práci jsme sledovali vliv uměle zvýšené hrubosti povrchů minerálních substrátů na voděodpudivost. Zároveň nás zajímal její vliv na propustnost pro vodní páru. Jako minerální substráty jsme použili vzorky přírodních mramorů a námi připravené tablety uhličitanu vápenatého. Zvýšení hrubosti povrchu jsme dosáhli vytvořením dvousložkového „nanofilmu“. K vytvoření tohoto filmu jsme aplikovali polymery PMMA, PFPE a PDMS v kombinaci s různě velkými křemičitanovými nanočásticemi. Porovnáváním výsledků AFM, profilometrie a velikostí kontaktních úhlů pro vodu na chráněném a nechráněném povrchu, byl jasně prokázán vliv hrubosti povrchu na odpudivost vody. Takto ošetřené povrchy se stávají „super-hydrofobickými“. Výsledky ukazují, že návrh dvousložkového „nanofilmu“, který je charakteristický svou jednoduchostí a nízkou cenou, je vhodný na ochranu kulturních památek z kamene vůči škodlivým vlivům vody.

Studium možností použití enzymů pro odstraňování klihoškrabových adheziv

Autor: Jakub Havlín
Ročník: 5.
Ústav: Chemické technologie restaurování památek
Školitel: Ing. Martina Hucková
Konzultanti: Ing. M. Novotná, Ing. V. Spiwok

Dnes již překonaná klihoškrabová adheziva byla k rentoaláži závěsných obrazů používána již od 16. století. Jejich nevýhodou ale bylo botnění a častá biodegradace. Proto se v poslední době přistupuje k jejich odstraňování. Jednou z nejšetrnějších metod odstraňování klihoškrabových adheziv používanou zejména v zahraničí je použití enzymů.

Cílem naší práce je přinést takové vědecké poznatky, které by pomohly převést tuto metodu i do širší restaurátorské praxe. Na základě srovnání infračervených spekter historických vzorků adheziv se spektry modelových směsí připravených podle starých receptur, chceme získat standardy klihoškrabových adheziv, na nichž bude možno stanovit aktivitu enzymů vybranými instrumentálními metodami.

Vyústěním těchto měření bude vytvoření co možná nejúčinnější směsi enzymů pro odstraňování klihoškrabových adheziv.

Sekce : Polymery

Recyklace použitých pneumatik působením vysoké teploty a tlaku

Autor: Miluše Cettlová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav polymerů
Školitelé: Doc. Ing. Antonín Kuta, CSc.; Ing. Zdeněk Hrdlička

V dnešní době je velkým problémem likvidace odpadu, jehož značná část je tvořena plasty a pryžemi. Naskytá se otázka co s nimi. Termoplasty mohou být vícenásobně taveny a následně zpracovány na nový výrobek. U pryží toto nelze. Možnosti jejich využití jsou recyklace, regenerace nebo energetické zhodnocení.

V literatuře byl nalezen článek, ve kterém autoři uvádějí, že lze pryžovou drť z odpadních pneumatik zpracovat na nový materiál pouhým lisováním za vysokého tlaku a teploty bez přídavku aditiv.

Ve své práci se zabývám srovnáváním vlastností původního vulkanizátu a materiálu získaného z jeho drtě (recyklátu). Tyto vlastnosti byly studovány na modelových směsích z přírodního kaučuku (NR) a butadienstyrenového kaučuku (SBR) s různými vulkanizačními systémy.

Vysoce větvené polyimidy na bázi 4,4',4''-triaminotrifenylnmethanu (část II)

Autor: Radana Čechová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav polymerů
Školitel: Doc. Ing. Petr Sysel, CSc.

Polyimidy jsou polymery, které si udržují svou mechanickou, chemickou a dielektrickou stabilitu v rozmezí teplot -150 až 200 °C. Jsou využívány zejména v (mikro)elektronice, letectví a v poslední době i jako membrány v separačních technologiích. Další cestou ke zlepšení relace mezi propustností a dělicí schopností pro některé směsi plynů by mohly být membrány na bázi vysoce větvených polyimidů. Vysoce větvené struktury zahrnují kromě velkého počtu větvicích míst a koncových funkčních skupin i přístupné kavity přibližně atomární velikosti. V práci byla studována příprava a základní vlastnosti vysoce větvených polyimidů na bázi komerčně dostupných monomerů 4,4',4''-triaminotrifenylnmethanu a 4,4'-oxydi(ftalan)anhydridu použitých v molární poměru 1:1 a 1:2. Byl specifikován obsah monomerů (sušiny) a způsob jejich dávkování vedoucí k přípravě roztoků polyimidových prekurzorů, polyamidkarboxylových kyselin, v N-methyl-2-pyrrolidonu. Prekurzory byly transformovány na polyimidy v podobě tenkých vrstev termickou expozicí, finálně 1h při 230 °C. Hodnocena byla jejich filmotvornost, rozpustnost, termická stabilita a transportní vlastnosti. Bylo provedeno porovnání s polyimidem na bázi dianhydridu kyseliny pyromellitové a 4,4',4''-triaminotrifenylnmethanu, který byl studován v předešlém období.

Vliv podmínek hnětení na přípravu termoplastického škrobu

Autor: Klára Čichovská
Ročník: 4.
Ústav: Ústav polymerů
Školitelé: Ing. Jan Šimek, CSc.; Ing. Veronika Dočkalová

Pro zpracování škrobu k technickému využití je nutné jeho nativní formu destrukturalizovat působením tepla, mechanického namáhání, případně kombinací obojího. Teplota tání „suchého“ nativního škrobu (s obsahem vlhkosti do 20%) se blíží jeho teplotě rozkladu. K vyloučení možné degradace škrobu během jeho tepelného zpracování je třeba snížit teplotu měknutí vlivem přísady plastifikátoru. V tomto případě byl využit jako změkčovaadlo glycerol. Byly připraveny binární směsi glycerolu a škrobu v hmotnostním poměru glycerol/škrob 2/8 a 3/7. V práci byly hodnoceny podmínky mísení těchto binárních směsí (doba míchání, otáčky rotoru a teplota) v Plastographu Brabender na vlastnosti vznikajícího plastifikovaného škrobu. Mechanické vlastnosti připravených materiálů tzn. pevnost a tažnost byly měřeny na přístroji Instron 1122 a morfologie byla vyhodnocena pomocí snímků lomových ploch vzorků získaných pomocí skenovací elektronové mikroskopie.

Anaerobní biodegradace alifaticko-aromatického kopolyesteru na bázi PETP

Autor: Zuzana Hyniová
Ročník: 4.
Ústav: Ústav polymerů
Školitel: Doc. Ing. Irena Prokopová, CSc.

Vzhledem k velmi rozsáhlému použití polyethylentereftalátu v obalové technice je nezbytné zabývat se hledáním variant nakládání s obalovým odpadem, zejména s použitými „PET“ lahvemi. Ukázalo se, že PETP z použitých lahví je možno využít také pro přípravu biologicky rozložitelných alifaticko-aromatických kopolyesterů. Ve své práci jsem se zaměřila na studium anaerobní biodegradace kopolyesterů na bázi PETP a kyseliny mléčné. Folie tohoto kopolyesteru byly vystaveny působení anaerobních mikroorganismů v kalech z čistíren odpadních vod. Byly použity tři typy kalů: psychrofilní při teplotě 20 °C, mezofilní při teplotě 35 °C a termofilní při teplotě 55 °C. Stupeň biodegradace byl posuzován na základě změny redukované viskozity roztoků degradovaných vzorků. Degradované polymery byly dále charakterizovány pomocí NMR a DSC. K nejvýraznější degradaci dochází v termofilním kalu. S termofilními kaly obsahujícími produkty rozkladu kopolymeru byl proveden test ekotoxicity založený na klíčivosti semene *Sinapis alba*. Pro srovnání byl působení anaerobních mikroorganismů vystaven i nemodifikovaný PETP z nápojové lahve. Alifaticko-aromatický kopolyester byl podroben také abiotické hydrolýze při pH 7 a teplotě 60 °C po dvou týdnech.

Příprava exfoliovaného nanokompozitu polyamid 6-montmorillonit

Autor: Zuzana Kadlecová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav polymerů
Školitel: Doc. Ing. Jiří Brožek, CSc.

Nanokompozitní materiály na bázi polymerní matrice a vrstevnatého silikátu poutají pozornost již od 80. let minulého století. Zvládnutí techniky přípravy polyamidových nanokompozitů vede ke zlepšení mechanických vlastností jako jsou modul pružnosti a pevnost.

Cílem naší práce je příprava nanokompozitu polyamid 6 / montmorillonit (MMT) aniontovou polymerací. Jako disperzní medium pro nemodifikovaný montmorillonit bylo využito vodní prostředí, což přispívá k zvládnutí exfoliace a rovnoměrné distribuci plniva v ϵ -kaprolaktamu. Před vlastní aniontovou polymerací byla voda ze směsi odstraněna. Připravené materiály byly charakterizovány termickými metodami (TGA, DSC) a mechanickými vlastnostmi. Exfoliace plniva a struktura materiálu byla dokumentována WAXD.

Porovnání vlastností nevulkanizovaného přírodního kaučuku, jeho směsí a vulkanizátů

Autor: Libor Kobera
Ročník: 5.
Ústav: Ústav polymerů
Školitel: Doc. Ing. Antonín Kuta, CSc.

Cílem práce bylo zjistit, zda existuje korelace mezi reologickými vlastnostmi nevulkanizovaného přírodního kaučuku (NR), reologickými vlastnostmi jeho směsí a fyzikálně mechanickými vlastnostmi vulkanizátu.

K tomu byly využity dodávky NR pocházejícího z různých oblastí (5 vzorků Pobřeží Slonoviny, Vietnam, Nigérie, Indonesie, Kongo). Měření reologických vlastností NR probíhalo za ustálených (Mooney) i dynamických podmínek (RPA). Na viskozimetru Mooney s velkým rotorem (ML) byla měřena viskozita v širokém rozmezí smykových rychlostí (otáček) rotoru. Dynamické vlastnosti byly měřeny na přístroji RPA 2000 opět v širokém rozmezí smykových rychlostí (frekvence a amplituda kmitů rotoru).

Z kaučuků byly zamíchány sazemi plněné směsi stejného složení a opět změřeny jejich reologické vlastnosti. Ze směsí byly připraveny vulkanizáty a stanoveny jejich fyzikálně mechanické vlastnosti.

Získané hodnoty reologických parametrů byly korelovány navzájem a s fyzikálně mechanickými vlastnostmi vulkanizátů.

Modifikace poly(3-hydroxybutyrátu) ϵ -kaprolaktonem

Autor: Marie Kutáčová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav polymerů
Školitel: Doc. Ing. Jiří Brožek, CSc.

Poly(3-hydroxybutyrát) (PHB) je biodegradovatelný semikrystalický polymer. Jako řada dalších přírodních polymerů vykazuje vysoký stupeň stereoregularity. PHB je produkován řadou mikroorganismů, které jej využívají jako zásobník energie. Průmyslově se pak vyrábí fermentačním procesem v bioreaktorech.

Rozšíření aplikací samotného PHB zatím brání jeho vysoká cena. Problémem je též fyzikální stárnutí (tj. výrazná změna jeho mechanických vlastností s časem) a rychlá termická degradace v blízkosti jeho teploty tání. Jednou z možností jak zlepšit fyzikálně-chemické a mechanické vlastnosti PHB je jeho modifikace.

Předkládaná práce studuje možnosti chemické modifikace PHB začleněním ϵ -kaprolaktonových jednotek do struktury řetězců PHB. Modifikace byla prováděna v prostředí toluenu za zvýšené teploty. K iniciaci polymerace ϵ -kaprolaktonu v přítomnosti PHB byly využity sloučeniny Sn^{2+} . K charakterizaci připravených materiálů bylo použito termických metod (DSC, TGA).

Urychlené stárnutí polyamidů

Autor: Marie Machutová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav polymerů
Školitel: Doc. Ing. Irena Prokopová, CSc.

S využitím veterometru Q-Sun bylo sledováno urychlené povětrnostní stárnutí vybraných vzorků polyamidů.

Bylo prokázáno, že u vzorku polyamidu 12 dochází po 1000 hodinách stárnutí v režimu „Florida test“ k významnému poklesu viskozity roztoku degradovaného polymeru v porovnání se vzorkem původním. Změny v molekulové struktuře testovaného polyamidu se odrážejí ve značném poklesu pevnosti v tahu a v tažnosti vzorku. U nepigmentovaných vzorků aniontově syntetizovaného polyamidu 6 byla sledována změna barevnosti v závislosti na době expozice ve veterometru. U černě pigmentovaných vzorků byla analyzována bílá vrstva, která se během expozice vylučuje na povrchu. Bylo prokázáno, že ani v povrchové vrstvě nedochází po 1500 hodinách expozice k destrukci sesíťované struktury.

Zvolený režim stárnutí byl předem ověřován na sadě vzorků polypropylenu a vlastnosti zkušebních vzorků byly porovnány s polymerem analogicky testovaným na certifikovaném pracovišti ITC Zlín.

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

Autor: Lenka Malinová
Ročník: 3.
Ústav: Ústav polymerů
Školitel: Doc. Ing. Jiří Brožek, CSc., Ing. Jan Budín, Ph.D.

Poly(3-hydroxybutyrát) (PHB) je biodegradovatelný termoplast. Faktory bránící rozšíření jeho aplikací jsou fyzikální stárnutí, nízká termická stabilita v okolí teploty tání a i vysoká cena. Vlastnosti PHB lze ovlivnit fyzikální a chemickou modifikací. V předkládané práci byla pozornost zaměřena na fyzikální modifikaci spočívající v přípravě směsí PHB s biologicky odbouratelnými polymery.

Byly připraveny směsi poly(3-hydroxybutyrátu) (PHB) a poly(L-mléčné kyseliny) (PLLA) odlitím z roztoku. Mísitelnost byla vyhodnocena na základě vyhodnocení DSC záznamů směsí. Směsi PHB s nízkomolekulární PLLA vykazovaly jednu teplotu skelného přechodu, která závisela na složení směsi, tzn., že oba polymery jsou kompatibilní. Při použití vysokomolekulární PLLA nelze jednoznačně vyvodit závěry o kompatibilitě směsí.

Směsi PVC a kopolyesteramidů

Autor: Luděk Markvart
Ročník: 5.
Ústav: Ústav polymerů
Školitel: Ing. Radka Kalousková, CSc.

Jednou z výhodných vlastností PVC je dobrá mísitelnost s řadou aditiv, které mohou výrazně ovlivnit užité vlastnosti konečného výrobku. V této práci byly připraveny směsi PVC a polyesteramidu (PEA). Konkrétně byl použit biologicky rozložitelný, statistický kopolymer poly[(ε-kaprolaktam)-co-(ε-kaprolakton)] syntetizovaný na Ústavu polymerů. Směsi byly připraveny na dvouválci při teplotě 180 °C. Jejich vlastnosti byly hodnoceny z hlediska obsahu kopolyesteramidu ve směsi a z hlediska poměru kaprolaktam/kaprolakton v samotném kopolymeru. U vzorků byla stanovena tepelná a barevná tepelná stabilita, T_g metodou DSC a vrubová houževnatost (Sharpý).

Dielektrická analýza siloxanových sloučenin

Autor: Václav Smrček
Ročník: 4.
Ústav: Ústav polymerů
Školitel: Doc. Ing. Petr Hron, CSc.

Dielektrická analýza se v průběhu posledních dvou desetiletí osvědčila jako instrumentální metoda pro monitorování průběhu vytvrzování epoxidových, fenolformaldehydových a polyestermelaminových reaktoplastů a jejich kompozitů. V současné době jsou již pro oblast uvedených typů materiálů vypracovány postupy průmyslového využití této metody. Předkládaná práce si klade za cíl ověření použitelnosti dielektrické analýzy ke sledování průběhu vytvrzování siloxanových pryskyřic a ke zjištění kinetiky počátečních fází vytvrzování. Průběh počáteční fáze síťování siloxanových pryskyřic byl definován jednak změnami dielektrických vlastností a zároveň měřením obsahu silanolových skupin, jejichž koncentrace v důsledku vzájemné kondenzace během síťování klesá. V předcházejících pracích bylo zjištěno, že použití IR spektrometrie nebo ESCA není ke zjišťování změn koncentrace silanolových skupin vhodné, proto byla pro stanovení absolutních hodnot koncentrace silanolových skupin použita metoda

přímé titrace lithium aluminium di-n-butylamidem v inertní atmosféře s použitím vizuálního indikátoru.

Urychlené stárnutí PVC (Q – Sun test)

Autor: Magda Švarcová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav polymerů
Školitel: Ing. Radka Kalousková, CSc.

Odolnost proti znehodnocení vlivem vnějšího prostředí je jednou z nejdůležitějších vlastností polymerních materiálů, která podstatně ovlivňuje životnost výrobku. K znehodnocení polymeru může dojít účinkem kyslíku, ozonu, světelného záření, střídání teplot, deště atd. Předmětem práce bylo testování nového přístroje Weatherometer Q-Sun.

Urychlené stárnutí PVC (resp. PE - LD a PP) probíhalo za teploty 65°C, při vlnové délce 340-420 nm a za použití sprchovacího režimu. Degradované vzorky byly hodnoceny z hlediska mechanických vlastností, tepelné stability a změny optických parametrů.

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

Autor: Martina Traxmandlová
Ročník: 4.
Ústav: Ústav polymerů
Školitel: Doc. Ing. Petr Sysel, CSc.

Polyimidy se vyznačují dobrou mechanickou, chemickou a dielektrickou odolností i při zvýšených teplotách (přibližně do 200 °C). Využití nacházejí v (mikro)elektronice, leteckém průmyslu a v posledním období také jako membrány v separačních technologiích. Propustnost plynů závisí především na schopnosti jejich difúze skrze membránu. Difúzní koeficient daného média je ovlivněn zejména mírou volného objemu polymeru a velikostí separovaných částic. Z pohledu říditelného volného objemu se jeví jako perspektivní vysoce větvené polyimidy. V této práci byly studovány vysoce větvené polyimidy na bázi dvojfunkčního aromatického anhydridu 3,3',4,4'-benzofenontetrakarboxydianhydridu a trojfunkčního nearomatického aminu tris(2-aminoethyl)aminu. Byl vyhodnocen vliv molárního poměru uvedených vstupních komponent na charakter polyimidových prekurzorů, polyamidkarboxylových kyselin. Prekurzory byly transformovány na polyimidy termickou expozicí. Struktura připravených polymerů byla sledována metodami infračervené spektroskopie a nukleární magnetické rezonance. Finální produkty byly dosud testovány zejména z hlediska jejich termické a chemické stability. U těch, které jsou filmtvorné, budou v nadcházejícím období proměřeny jejich transportní charakteristiky.

Směsi syntetických kopolymerů se škrobem a jejich biologická rozložitelnost

Autor: Martin Votrubec
Ročník: 4.
Ústav: Ústav polymerů
Školitel: Doc. Ing. Irena Prokopová, CSc.

Příprava směsí syntetických polymerů se sníženou odolností k biologickému prostředí se škrobem, snadno dostupným a levným biopolymerem, je postupem, kterým je možno potlačit nevýhodné vlastnosti škrobu samotného – vysokou hydrofilitu a malou mechanickou pevnost a na druhé straně usnadnit postup biodegradace syntetického polymeru.

Byl syntetizován kopolymer hexano-6-laktamu s dodekano-12-laktamem (kopolyamid 6/12) a ze získaného kopolyamidu byla připravena směs s pšeničným škrobem, plastifikovaným glycerolem. Sledováním lomové plochy směsi za pomoci skenovací elektronové mikroskopie byla posouzena homogenita směsi. Biologická rozložitelnost připravené směsi byla testována za anaerobních podmínek v kalech z čistíren odpadních vod. Průběh biodegradace indikoval vznik bioplynu. Změny v molekulové struktuře materiálu po degradaci byly zjišťovány pomocí elementární analýzy a na základě viskozimetrických měření roztoků polymerů. Biodegradovatelnost směsi kopolyamidu 6/12 se škrobem byla porovnána s biodegradovatelností směsí alifaticko-aromatického kopolyesteru se škrobem.

Sekce : Informatika a chemie

Law-Ref – Elektronická databáze mezinárodních smluvních dokumentů

Autor: Kryštof Dibusz
Ročník: 3.
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Miloslav Nič

Hlavním cílem práce bylo založit volně přístupnou databázi mezinárodních konvencí, smluv, protokolů a dalších typů mezinárodních smluvních dokumentů a umístit je do jedné elektronické databáze Law-Ref, a vytvořit tak systém, ve kterém by se uživatelé dobře orientovali a dokázali rychle získat potřebné informace. Smlouvy, resp. jejich jednotlivé kapitoly a články jsme propojili pomocí systému klíčových slov a křížových odkazů. Smluvní dokumenty jsou doplněny o výkladový slovník právních pojmů a definic. Většina smluv je doplněna o tzv. metadata, tedy přehled základních informací o dané smlouvě či protokolu. Law-Ref byl vytvořen pomocí technologií XML a programovacích jazyků XSLT a Python, které se jeví jako nejvhodnější pro tvorbu obdobných systémů. Systém je a bude i nadále zpracováván v anglickém jazyce, takže bude využitelný jak českou, tak zahraniční odbornou veřejností. Doposud byl výběr zpracováváných dokumentů spíše nahodilý. V budoucnu se bude Law-Ref více zaměřovat na chemickou legislativu Evropské unie a především na implementaci projektu REACH do databáze.

Prostorová grafika organických molekul

Autor: Martin Filip
Ročník: 2.
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 jsem se také historií a objevy, které byly od prvního objevení uspořádání atomů v prostoru uskutečněny.

Zároveň jsme prozkoumali možnosti programů, které jsou nabízeny pro zpracování databázových dat (PDB).

Vytvořili jsme také návod jak s molekulami pracovat, ve kterém programu je práce nejjednodušší a nejlevnější, a také jsme zjistili, kde se nachází úskalí a problémy.

Elektronické studijní opory pro výuku analytické chemie

Autor: Iva Forstová
Ročník: 3.
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Jiří Jiráť

Cílem práce je vytvořit moderní interaktivní pomůcky pro výuku analytické chemie jak v elektronické, tak tištěné podobě, které jsou určeny především pro středoškolské studenty. Účelem těchto studijních opor je objasnit studentům analytickou chemii a pomoci jim při výuce

tohoto předmětu. V současné době jsou zpracovány tři oblasti analytické chemie – důkazy kationtů a aniontů, laboratorní vybavení a přístroje a spektroskopické metody. U kationtů a aniontů jsou uvedena činidla, se kterými reagují, a průběh reakce popsán rovnicemi. Laboratorní vybavení a přístroje jsou zpracovány jako seznam, ve kterém je ke každé položce přiřazen jak český, tak anglický název a obrázek příslušného předmětu. Spektroskopické metody jsou popsány v krátkých článcích, které obsahují základní informace o spektroskopích. Zpracování dat je založeno na XML-technologiích a transformačním jazyce XSLT, který převádí dokumenty XML na dokumenty jiného formátu, v tomto případě na HTML.

České pivovary

Autor: Kohout Václav
Ročník: 1.
Ústav: FCHI – Ústav počítačové a řídicí techniky
Školitel: Košata Bedřich

Česká republika již řadu let patří mezi tradiční producenty piva a svou spotřebou na hlavu se řadí na přední příčky na světě. Tento fakt se odráží i v množství pivovarů a jejich produktů na našem trhu. Proto jsem se rozhodl prostřednictvím prezentovaného projektu seskupit a setřídit informace o českých pivovarech a jejich produkci do přehledné formy internetového portálu.

Nejdůležitější součástí projektů byl sběr dat a jejich následné zpracování a organizace. Informace byly získány převážně z internetu a tištěných publikací, ale také z jiných zdrojů (např. návštěva Pivovarnického muzea v Plzni nebo exkurze v pivovaru Krušovice). Pro uložení získaných dat byl navržen vlastní formát založený na technologii XML a šitý na míru konkrétním potřebám projektu. Z dat uložených ve formátu XML byly výsledné HTML stránky generovány pomocí šablon XSL.

Vytvořený portál obsahuje přehled všech českých pivovarů s produkcí nad 9000 hl/rok. Pro každý pivovar jsou kromě přehledu vyráběných piv uvedeny také kontaktní a některé doplňkové informace. Piva jsou roztržena nejen podle jejich výrobců, ale také podle stupňovitosti, druhu a dalších kritérií. Portál obsahuje také některé obecné informace o výrobě piva.

Portál je v současné době přechodně umístěn na adrese <http://web.vscht.cz/kohoutv/pivo/html/>

Portál elektronických studijních opor VŠCHT Praha

Autor: Lucie Šmídová
Ročník: 3.
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Jiří Jiráť

Portál elektronických studijních opor VŠCHT Praha (ESO) vznikl před rokem ve spolupráci zaměstnanců Vydavatelství VŠCHT Praha, pedagogů oboru Informatika a chemie a několika jejich studentů. Jeho hlavním cílem je zpřehlednit narůstající množství studijních materiálů, které jednotlivé ústavy a katedry celé školy vystavují na svých webových stránkách a které i informovaný student hledá mnohdy obtížně. V současné době poskytuje setříděné odkazy na téměř 400 dokumentů. Příspěvek zmíní okolnosti vzniku portálu, jeho strukturu a možnosti vyhledávání podle různých hledisek. Dále pak technologické řešení, které využívá XML, ale zejména se bude zabývat obsahovou náplní a problematikou katalogizace elektronických dokumentů vznikajících na půdě VŠCHT, což je oblast, za kterou je autorka v tomto projektu zodpovědná.

Elektronická encyklopedie biochemie

Autor: Jiří Znamenáček
Ročník: 3.
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Bedřich Košata

Cílem práce je připravit novou verzi knihy „Biochemické pojmy – výkladový slovník“, a to jak její elektronickou, tak tištěnou podobu.

Prvním ze dvou hlavních úkolů je doplnit slovník o opravy a nová data, jakož i dodat nové uživatelské možnosti stávajícímu aplikačnímu rozhraní. Podstatnou část práce představuje provázání enzymologických odkazů obsažených ve slovníku se světovými databázemi enzymů. Druhým úkolem je prozkoumat možnosti přípravy sazby tištěného vydání z těchto nových, ve formátu XML uložených dat. Nalezení rozumné cesty jak tohoto dosáhnout umožní, aby budoucí produkce Vydavatelství VŠCHT Praha nebyla stále vázána na velice pracné převádění podkladů mezi nejrůznějšími formáty, z nichž zatím žádný není vhodný pro publikování v tištěné i elektronické formě zároveň.

Sekce : Kovové materiály

Recyklace odpadních Zn-stěrů

Autor: Tereza Bělková
Ročník: 5.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Petr Dvořák

Cílem předložené práce bylo ověřit možnosti využití Zn-stěrů k neutralizaci odpadní H_2SO_4 ze zpracování odpadních AKU baterií za současného zkoncentrování zinku do komerčně využitelných sloučenin. Zn-rafinační stěry vznikají při oxidačním odstraňování Zn ze surového olova. Stěry obsahují cca 76% Pb hlavně ve formě PbO a 12% Zn jako ZnO a zbytkový NaOH. V současné době se skládkují, což je nejen ekologicky náročné, ale i neekonomické vzhledem k rostoucím cenám Zn a Pb. To samé platí o využití odpadní H_2SO_4 . Základem navrženého a laboratorně ověřovaného hydrometalurgického zpracování Zn-stěrů je jejich loužení v odpadní H_2SO_4 za podmínek téměř selektivní extrakce Zn a přechodu nečistot, zejména Fe do Pb-loužence. Po oddělení loužence, který obsahuje cca 85% Pb, se zinek získává z výluhů jako směs uhličitanu a zásaditých uhličitánů s obsahem cca 42% Zn. Produkty navrhované recyklace jsou přímo využitelné pro výrobu surového Pb a jako výchozí surovina pro elektrolytickou výrobu Zn nebo jeho sloučenin.

Struktura a vlastnosti slitiny AlMn5 vyrobené postupem práškové metalurgie

Autor: Juda Čížkovský
Ročník: 4.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Alena Michalcová

Rychle ztuhlé slitiny hliníku s přechodnými kovy mají nanokrystalickou až amorfni strukturu. Tyto materiály se vyznačují výbornými mechanickými vlastnostmi a zejména výrazně vyšší tepelnou stabilitou v porovnání s konvenčními tvářenými a slévárenskými hliníkovými slitinami. Cílem této práce bylo popsat strukturu a základní mechanické vlastnosti slitiny AlMn5 vyrobené technologií práškové metalurgie. Slitina byla nejprve připravena ve formě rychle ztuhlého pásku metodou melt spinning. Pásek byl poté extrudován za tepla. U vyrobeného materiálu byly rovněž sledovány změny mechanických vlastností za zvýšených teplot.

Využití vápencové metody pro extrakci Li z cinwalditových koncentrátů

Autor: Lubomír Havlák
Ročník: 4.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Hong Vu, Ph.D.

Cílem práce bylo aplikovat vápencovou metodu pro extrakci Li z lithiových cinwalditových koncentrátů získaných z gravitačních odpadů po těžbě Sn-W rud na Cínovci. Bylo zkoušeno spékání Li-cinwalditového (slídkového) koncentráту s uhličitánem vápenatým při teplotním rozmezí od 775 - 925°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=5:1 nebo 10:1 po dobu 3 h. Z naměřených výsledků vyplynulo, že nejvyšší účinnosti přechodu Li do roztoku při k:p=5:1, tj. 79 %, se dosáhne při loužení rozemletých rychle ochlazovaných spečenců připravených při teplotě 850°C (poměr CaCO₃: Li-koncentrát = 5:1). Zvýšením poměru k:p na 10:1 lze dosáhnout zvýšení účinnosti přechodu Li do roztoku na 81 % pro rychle ochlazené spečence připravené ze směsi CaCO₃:Li-koncentrát = 5-6:1. Vzhledem k následnému nutnému zahuštění Li-výluhů před separací Li₂CO₃ bude z ekonomického hlediska účelnější loužit spečence při k:p = 5:1.

Struktura a vlastnosti rychle ztuhlých slitin Mg-Ni

Autor: Jan Hruška
Ročník: 3.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Ing. Dalibor Vojtěch, Ing. Magda Morťaniková

Slitiny hořčíku a niklu jsou perspektivními materiály pro uchovávání vodíku pro palivové články díky své schopnosti absorbovat jeho relativně velký objem. Vedle klasických krystalických slitin Mg-Ni se uvažuje i o slitinách s jemnozrnnou až amorfní strukturou připravených metodami ultrarychlého chlazení, např. metodou melt spinning. Takové materiály se vyznačují příznivější kinetikou absorpce a desorpce vodíku.

Cílem této práce je popsat mikrostrukturu a fázové složení rychle ztuhlých tenkých pásků slitin MgNi₂₁ a MgNi₁₄ připravených metodou melt spinning.

Optimalizace podmínek uchovávání vodíku ve slitině Mg-Ni

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

V současné době je vodík považován za vhodné ekologické palivo budoucnosti, které je mimo jiné použitelné i v dopravě. Pro jeho praktické rozšíření je nutné nalézt jednoduchý způsob bezpečného uchovávání vodíku. Jako velmi perspektivní varianta se jeví reversibilní uchovávání vodíku v hydridech lehkých kovů a to hořčíku nebo lithia. Hořčík se vyznačuje schopností pojmout velké množství vodíku (7 hm.%), avšak kinetika vzniku hydridů i uvolňování vodíku je nepříznivá. Pro zlepšení kinetiky je třeba vyrobit slitinu hořčíku s kovem, který působí jako katalyzátor adsorpce a desorpce vodíku. V případě slitin hořčíku s niklem dochází k ukládání vodíku do intermetalických fází Mg₂Ni za vzniku ternárních hydridů Mg₂NiH_x.

Cílem této práce bylo optimalizovat podmínky uchovávání vodíku ve slitině MgNi₄₈, připravené indukčním tavením, obsahující fáze α-Mg a Mg₂Ni. Sycení vodíkem bylo prováděno elektrolyticky v prostředí KOH. Volitelné parametry byly teplota elektrolytu, napětí a doba sycení. Byla vyhodnocena závislost mřížkových parametrů přítomných fází na podmínkách sycení.

Soudržnost zinkované oceli s betonem

Autor: Štěpán Krtička
Ročník: 4.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Milan Kouřil, Ph.D.

Soudržnost oceli s betonem je považována za základní požadavek pro zajištění plné funkčnosti železobetonové konstrukce z hlediska nosnosti. V případě použití zinkované oceli vzniká nebezpečí ztráty soudržnosti. Příčinou je vodík, který se vyvíjí v první fázi expozice zinkované oceli v alkalické betonové směsi. Prezentovaná práce kriticky hodnotí způsoby testování soudržnosti oceli s betonem a realizuje nové způsoby testování a pomocí nich porovnává objektivně soudržnost zinkované oceli a uhlíkové oceli bez povrchové úpravy. Z dosažené výsledky ukazují, že mezi soudržnostmi zinkované a uhlíkové oceli s betonem není významný rozdíl.

Využití mikroelektrochemických technik k hodnocení strukturních změn v ocelích

Autor: Jakub Mlnařík
Ročník: 5.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Ing. Jaroslav Bystrianský, CSc.

Cílem semestrální práce bylo navrhnout několik uspořádání mikroelektrod pro lokální elektrochemická polarizační měření. Byly vytvořeny tři varianty mikroelektrod: neprůtočná mikroelektroda, průtočná mikroelektroda s integrovanou referentní elektrodou a průtočná mikroelektroda s referentní elektrodou v elektrolytickém můstku. Jejich funkce byla ověřována na korozivzdorných ocelích FeCr18 a FeCr18Ni10 – obě po rozpouštěcím žhání a oceli FeCr18Ni10 po modelovém zcitlivujícím žhání. Výsledky dosažené pomocí mikroelektrod jsou dobře reprodukovatelné a srovnatelné se standardními elektrochemickými postupy.

Struktura směrově krystalizovaného kompozitu in-situ na bázi Ti-Al-Si

Autor: Michal Novák
Ročník: 5.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Dalibor Vojtěch

Slitiny na bázi Ti-Al-Si se vyznačují velmi vysokou tvrdostí a odolností proti oxidaci za zvýšených teplot. Jejich nevýhodou je velmi nízká houževnatost způsobená přítomností náhodně orientovaných křehkých fází silicidů. Očekává se, že přípravou směrově krystalizovaného in-situ kompozitu na bázi Ti-Al-Si lze připravit materiál, jehož mechanické vlastnosti budou výrazně lepší.

Cílem práce je popsat strukturu směrově krystalizovaného in-situ kompozitu tvořeného fázemi Ti_3Al + Ti_5Si_3 . Za tímto účelem byla vyhodnocena morfologie silicidů tvořících vyztužující fázi, v závislosti na podmínkách krystalizace.

Kovové elektrody pro měření změny pH na povrchu katodicky chráněného potrubí

Autor: Aleš Pelikán
Ročník: 5.
Ústav: 106
Školitel: Ing. Milan Kouřil, Ph.D., prof. Ing. Pavel Novák, CSc.

Práce pojednává o měření pH kovovými elektrodami pro potřeby sledování změny pH v oblasti vady organického povlaku potrubí při zapojené katodické ochraně. Pro měření byly k dispozici titanové elektrody aktivované různými kombinacemi oxidů iridia a ruthenia, dále iridiové elektrody aktivované oxidy iridia. Specifickým parametrem pro použití u katodické ochrany se ukázalo být vysoké pH, které nejsou všechny elektrody schopné prokazatelně změřit. Ze zkoušených elektrod nejlepších výsledků dosahovaly elektrody na bázi iridia aktivované oxidy iridia vyrobené metodou „carbon melting“. Z elektrod na titanovém substrátu by se patrně daly použít elektrody aktivované oxidy iridia a ruthenia s přihlédnutím k možné odchylce ve vysokých hodnotách pH.

Struktura a vlastnosti slitin hořčíku pro uchovávání vodíku

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

Je uváděno, že za předpokladu současného objemu těžby vystačí známé zásoby ropy pouze na dalších 43 let. Toto tvrzení vede k hledání jiných zdrojů energie, mezi kterými zaujímá přední místo vodík. Pro praktické použití je nezbytné vyvinout bezpečné metody uchovávání vodíku pro různé aplikace. Jednou z technologicky významných variant je uchovávání vodíku formě kovových hydridů.

Cílem této práce bylo popsat mikrostrukturu a fázové složení vybraných slitin hořčíku (MgNi48, MgCu57, MgCu30Al20), které budou testovány jako možné systémy pro uchovávání vodíku. Byla studována mikrostruktura a fázové složení slitin připravených vakuovým indukčním tavením. Součástí práce je rovněž porovnání chování těchto slitin při elektrolytickém sycení vodíkem v prostředí KOH.

Struktura a vlastnosti slitiny AlCr6Fe2Ti1 vyrobené postupem práškové metalurgie

Autor: Filip Šaněk
Ročník: 2.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: Ing. Alena Michalcová

Rychle ztuhlé slitiny hliníku s přechodnými kovy mají nanokrystalickou až amorfni strukturu. Tyto materiály se vyznačují výbornými mechanickými vlastnostmi a zejména výrazně vyšší tepelnou stabilitou v porovnání s konvenčními tvářenými a slévárenskými hliníkovými slitinami. Mezi prvky, které se nejvíce podílejí na zvýšení tepelné stability patří chrom, železo a titan. Cílem této práce bylo popsat strukturu a základní mechanické vlastnosti slitiny AlCr6Fe2Ti1 vyrobené technologií práškové metalurgie. Slitina byla nejprve připravena ve formě prášku

rozstřikováním taveniny. Tento prášek byl poté extrudován za tepla. U vyrobeného materiálu byly rovněž sledovány změny mechanických vlastností za zvýšených teplot.

Vlastnosti křemíkových vrstev na titanu

Autor: Václav Šefl
Ročník: 3.
Ústav: Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství
Školitel: doc. Dr. Ing. Dalibor Vojtěch, Ing. Magda Morťaniková

Titan je díky dobrému poměru pevnosti a hustoty perspektivním materiálem pro použití v leteckém, kosmickém i chemickém průmyslu. Použití titanu je však omezeno zejména jeho špatnou odolností proti vysokoteplotní oxidaci nad 550°C. Jeden ze způsobů povrchové ochrany titanu jsou tenké vrstvy obohacené křemíkem vyrobené kombinací postupu PVD a tepelného zpracování.

Cílem práce je popsat vliv podmínek tepelného zpracování na strukturu a vlastnosti povrchových vrstev obohacených křemíkem.

Sekce : Materiálové inženýrství

**Měření teplotní závislosti vodivosti senzorů (3Tscan)-
automatizace pomocí LabView**

Autor: Antonín Doupal
Ročník: 5.
Ústav: Ústav inženýrství pevných látek
Školitel: Doc. Ing. Vladimír Myslík, CSc.

Práce se zabývá měřením teplotní závislosti vodivosti chemických senzorů připravených pulsní laserovou deposicí (PLD). Teplotní závislost se měří v rozsahu teplot 80 - 350°C při pravidelném střídání měřeného a referenčního plynu (oxidující resp. redukující atmosféry). Cílem práce je automatizace měření, sběru dat a jejich zpracování včetně regulace pracovní teploty senzoru. Aparatura bude ověřena změřením funkčních vzorků chemických senzorů připravených metodou PLD. K řízení experimentu se použije přídavná PCI karta, ovládací program bude vytvořen v prostředí LabView. Metodika měření umožní průběžně odečítat rezistivitu senzoru při zvolené atmosféře a zvoleném průběhu teploty. Na základě změřených dat bude vyhodnocena závislost citlivosti senzoru na teplotě. Výsledky měření budou zpracovány graficky v programu MS Excel.

**Adsorpce oxoaniontů Se(IV) a Se(VI) na modifikované jílové
minerály**

Autor: Lenka Herzogová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav chemie pevných látek
Školitelka: Ing. Barbora Doušová, CSc.

Cílem této práce bylo proměření sorpčních řad Se(IV) a Se(VI) na upravené a neupravené odpadní jílové materiály. Byly použity 2 kalcinované kaoliny z oblasti Horní Břízy, které se lišily zastoupením základních stavebních minerálů. Sorpce Se(IV) a Se(VI) z vodných roztoků byly prováděny jednak na původních jílových minerálech při sníženém pH roztoků Se(IV) 5,5 a Se(VI) 4,3, jednak na modifikovaných jílech upravených ionty Fe(II) (sycení 0,6M FeSO₄·7H₂O), Fe(III) (úprava pomocí Fe(NO₃)₃) a Al(III) (úprava pomocí AlCl₃·6H₂O). Sorpční kapacity byly stanoveny při pH roztoku Se(IV) okolo 5,5 a Se(VI) okolo 4,3. Navážka sorbentů, při které dochází k účinné sorpci, se pohybovala v rozmezí od 5 do 20g/l. Doba ustanovení rovnováhy mezi pevnou a kapalnou fází byla 72 hodin.

Příprava uhlíkových nanovrstev

Autor: Tomáš Hubáček
Ročník: 4.
Ústav: Ústav inženýrství pevných látek
Školitel: Prof. Ing. V. Švorčík, DrSc.

Deponované uhlíkové vrstvy, by mohli najít uplatnění jako substrát pro pěstování buněk např. při léčbě ztráty kožního krytu. V této práci byly tyto vrstvy připraveny deposicí z uhlíkových vláken v napařovacím zařízení. U těchto vrstev byla studována jejich homogenita a tloušťka pomocí profilometru při různých podmínkách napařování, vrstvy byly připraveny na rozdílných

substrátech sklo, křemík, polyethylentereftalát. Po nanesení uhlíku např. na sklo byla naměřena homogenní deponovaná vrstva do vzdálenosti cca. 1,5 cm od středu vzorku. Při zvyšující se vzdálenosti od zdroje uhlíku klesá tloušťka nanesené vrstvy.

Termodynamická predikce fázových diagramů ternárních systémů Ga – Mn – N a Ga – Cr – N

Autor: Dušan Kovač
Ročník: 5.
Ústav: Ústav inženýrství pevných látek
Školitel: Prof. Ing. J. Leitner, DrSc.

GaN a další sloučeniny typu A_3B_5 při dotaci prvkem ze skupiny 3d přechodných kovů (např. Cr, Mn nebo V) vykazují feromagnetické vlastnosti s relativně vysokými hodnotami Curieovi teploty. Tyto tzv. zředěné magnetické polovodiče jsou zkoumány s ohledem na jejich možné využití v oblasti spintroniky. Důležitými faktory pro tyto systémy jsou: rozpustnost kovů v GaN, schopnost koexistence a možnost precipitace různých fází v systému. Práce je zaměřena na výpočet fázových diagramů ternárních systémů Ga – Mn – N a Ga – Cr – N, které slouží k posouzení termodynamický předpokladů přípravy těchto fází. Pro výpočet byla použita data převzatá z literatury, odhadnutá na základě empirických postupů a v případě ternárních nitridů Mn_3GaN a Cr_3GaN vypočtena pomocí *ab initio* výpočtů. Vypočtené údaje byly porovnány s experimentálními výsledky.

Příprava a růst monokrystalů PbI_2

Autor: Robert Král
Ročník: 5.
Ústav: Ústav chemie pevných látek
Školitel: prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, CSc.
Ing. Marie Matuchová, CSc.

Cílem naší práce je vypěstování monokrystalů PbI_2 , u kterých chceme následně sledovat jejich detekční vlastnosti, především u energeticky bohatých záření jako jsou RTG a γ záření.

Pro dosažení větší čistoty si potřebný materiál sami připravujeme přímou syntézou z prvků Pb(l) a $I_2(g)$ v reakční křemenné ampuli za reakčních podmínek $t = 700^\circ C$.

I tak je získaný materiál stále ještě značně znečištěný, proto je nutné ho ještě přecistit zonálním tavením.

Z takto přecišťeného materiálu pak pěstujeme monokrystaly PbI_2 metodou Bridgman – Stockbarger.

Na získaných vzorcích pak studujeme a kontrolujeme složení a strukturu pomocí RTG fluorescence a difrakce.

Selen v životním prostředí

Autor: Stanislava Krejčová
Ročník: 3.
Ústav: Ústav chemie pevných látek
Školitel: Ing. Barbora Doušová, CSc.

Selen je 34. prvkem periodické soustavy prvků. Řadí se mezi polokovy a chemickými vlastnostmi se podobá arsenu a síře, s nimiž sousedí v periodické tabulce prvků. V přírodě se vyskytuje jak volný, tak vázaný ve sloučeninách, v oxidačních stavech 0, -II, IV a VI. Objevuje se ve dvou modifikacích, jako amorfni červený selen nebo jako krystalická šedá forma.

Selen je prvkem jak esenciálním, pro život organismů nezbytným, tak toxickým. V organismu má antioxidační vlastnosti, jeho nedostatek může vést ke snižování imunity a vzniku některých závažných nemocí. Současně se však v organismu kumuluje, je karcinogenní a např. zpomaluje metabolismus.

Pro životní prostředí je nebezpečný hlavně odpadní selen, který se do přírody dostává zejména při spalování fosilních paliv (v nich často nahrazuje síru), při spalování městských odpadů, dále pak při různých chemických výrobcích (měď, nikl, sklo, polovodiče, plasty, barviva a keramika). V české republice je v současnosti asi 16 subjektů nakládajících se selenem a jeho sloučeninami. Některé tyto podniky se selenem přímo pracují, jiné ho jen zpracovávají jako odpadní surovinu.

Vlastnosti metalických nanovrstev

Autor: Radek Nožička
Ročník: 5.
Ústav: Ústav inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. Jakub Siegel

Kovové vrstvy se uplatňují v elektronice jako pasivní (kondenzátory) či aktivní (součásti logických obvodů, propokovací vrstvy, biočipy) součástky. V potravinářském průmyslu pak zejména jako obalový materiál nebo folie pro mikrovlnný ohřev. Tato práce se zabývá charakterizací vrstev Au, Ag, Pt a Pd připravených metodou katodového naprašování. Vrstvy byly deponovány na substráty křemíku, skla a PET (polyethylentereftalát) v závislosti na době naprašování. Studována byla tloušťka a plošná rezistance vrstev. Tloušťky byly měřeny profilometrem Hommel Tester a metodou AFM (atomic force microscopy). S rostoucí dobou depozice roste tloušťka naprášené vrstvy a klesá plošná rezistance a tento výsledek závisí na substrátu a deponovaném kovu.

Hydrotermální aktivita suevitu

Autor: Michaela Petříčková
Ročník: 5.
Ústav: Ústav inženýrství pevných látek
Školitel: Ing. D. Koloušek CSc.

Zeolity jsou mikroporézní krystalické aluminosilikáty, které v přírodních podmínkách vznikají ze sklovitých materiálů po dopadu meteoritů. V předkládané práci byly studovány optimální podmínky mineralizace suevitu (skla) pocházejícího z impaktního kráteru Ries v Německu. Cílem práce bylo nalézt obdobné podmínky zeolitické mineralizace, jaké panovaly v kráteru Ries při formování zeolitů. Byly sledovány kvalitativní změny v zeolitových populacích v závislosti na poměru koncentrací NaOH a KOH, resp. NaOH a zdroje Li (lithného vodního

skla). Fázové složení hlavních produktů v systému NaOH:KOH se měnilo od analcimu k merlinoitu a phillipsitu ve směru rostoucí koncentrace K^+ iontů. Přidávky Li^+ iontů ve formě lithného vodního skla k roztoku NaOH nevedly ke vzniku zeolitů, které by Li obsahovaly jako hlavní komponent. Ve vzorcích byly charakterizovány Na-zeolity s pouze nevýrazným obsahem Li, konkrétně analcim a zeolit P. Hydratovaný kation Li^+ zřejmě působil jen jako mineralizátor. Přebytké Li se hromadilo v amorfní gelové fázi, resp. v krystalcích silinaitu $(LiNaSi_2O_5) \cdot 2H_2O$. Bylo prokázáno, že je možno aplikovat postupy, které jsou běžné v experimentální mineralogii, na procesy probíhající desítky let v přírodě.

Dvojité perovskity $La_{1-x}Sr_{1+x}CoRuO_6$

Autor: Petr Tomeš
Ročník: 5.
Ústav: Ústav inženýrství pevných látek
Školitel: Prof. Ing. David Sedmidubský Dr., Dr. Ing. Jiří Hejtmánek, Csc.

Dominantní vliv na elektrické a magnetické vlastnosti dvojitých perovskitů obecného vzorce $A_{1-x}A'_{1+x}BB'O_6$ (kde A je lantanoid, A' je kov alkalických zemin, B, B' jsou dva různé přechodové kovy) má elektronová konfigurace kovů B a B'. V případě studovaného systému $La_{1-x}Sr_{1+x}CoRuO_6$ se otevírá veliký prostor pro diskusi o typu interakcí mezi kationty Co a Ru. Po teoretické a experimentální stránce se ukazuje, že převažující roli v tomto systému mají antiferomagnetické interakce a nejpravděpodobnější možné spinové stavy jsou Ru^{5+} a Co^{2+} ve stavu vysokého spinu. Cílem této práce bylo připravit sadu vzorků o $x = <0,1>$ a zjistit vliv změny formální valence (BB') pomocí heterovalentní substituce (AA'). Tyto vzorky byly připraveny klasickým keramickým postupem a jejich fázové složení bylo zkoumáno rentgenovou difrakční analýzou. Představu o elektrickém transportu máme z měření měrného elektrického odporu, který vykazuje polovodičové chování, dále tepelné vodivosti a Seebeckova koeficientu, který popisuje jev generace elektrického napětí při přiloženém tepelném gradientu. Magnetické chování bylo charakterizováno na základě měření magnetického momentu v proměnlivém poli do 5T a magnetické susceptibility v poli 0.1T.

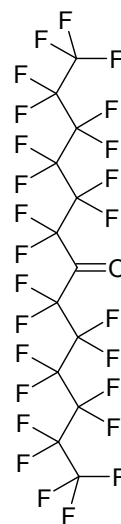
Sekce: Organická chemie II A

Perfluorované rozvětvené stavební bloky

Autor: Mario Babuněk
Ročník: 3.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Cílem mé práce je syntéza vysoce fluorovaných rozvětvených sekundárních a terciárních kyslíkatých stavebních bloků jako intermediátů pro fluorofilní ligandy. Nejprve jsem transformoval perfluorhexyljodid na klíčový meziprodukt, perfluorhexylmagnesium-jodid, stálý pouze za nízkých teplot. Jeho působením na chlortrimethylsilan jsem připravil trimethyl(perfluorhexyl)silan, reakcí s diethylkarbonátem vznikl perfluortrideka-7-on. Tento keton neposkytuje reakcí s výše uvedenými fluorovanými intermediáty odpovídající terciární alkohol, pravděpodobně z důvodu jejich nízké stability a sterického bránění reakčního centra. Perfluortrideka-7-on reagoval s KF za vzniku perfluoralkoxidu, jehož alkylace v současné době studuji.

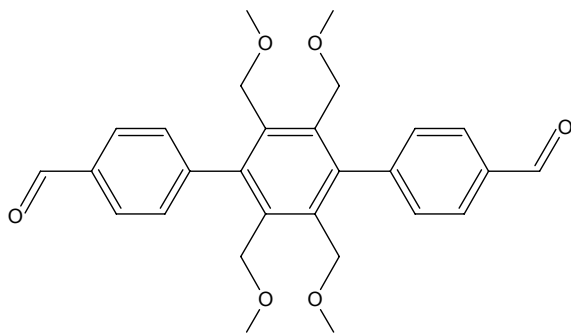
Jako první krok v teoretickém studiu reakcí různých typů vysoce fluorovaných alkoxidů jsem pomocí *ab initio* a DFT metod analyzoval rozdíly v jejich geometriích a elektronové distribuci.



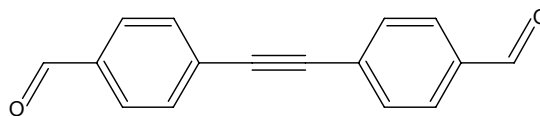
Syntéza rigidních polyaromatických dialdehydů a jejich následná [3+3]-cyklokondenzace s *trans*-1,2-diaminocyklohexanem

Autor: Jiří Hlinka
Ročník: 3.
Ústav: Ústav organické chemie (ÚOCHB AV ČR)
Školitel: Dr. Ing. Jana Hodačová

V literatuře popsaná kondenzace tereftaldehydu s *trans*-1,2-diaminocyklohexanem poskytuje takřka kvantitativně makrocyclickou hexa-Schiffovu bazi trojúhelníkového tvaru. Cílem této práce je studium cyklokondenzační reakce s dalšími rigidními aromatickými dialdehydy. Pomocí Suzuki-Miyaura cross-couplingu byl připraven triaryldialdehyd **1**, jehož [3+3]-kondenzací byla získána Schiffova báze, která byla dále redukována na makrocyclický hexaamin. Jako druhý byl syntetizován diarylacetyldialdehyd **2**. Při jeho syntéze byla ověřována možnost využití Sonogashirova couplingu i klasických postupů organické syntézy.



1

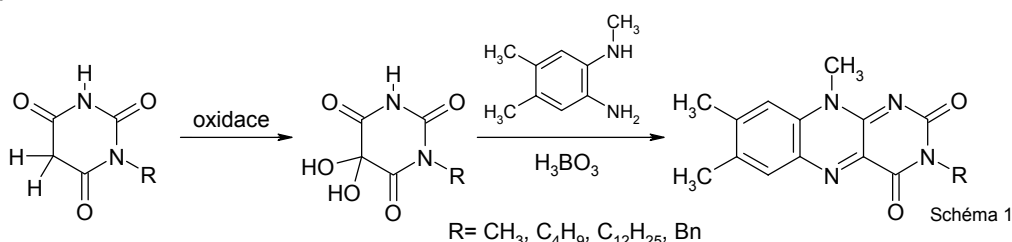


2

Syntéza *N*-substituovaných alloxanů pro přípravu lipofilních 3-alkylflavinů

Autor: Viktor Mojr
Ročník: 3.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Ing. Radek Cibulka, Ph.D.

Lipofilní deriváty flavinu představují potenciální oxidační činidla pro reakce v organizovaných prostředích (micely, vesikly apod.). Vhodným postupem pro syntézu flavinů s lipofilní skupinou v poloze 3- by mohla být kondenzace *N*-alkylalloxanů s příslušným benzen-1,2-diaminem (Schéma 1). Doposud však nebyla publikována obecná metoda pro přípravu monoalkylalloxanů.

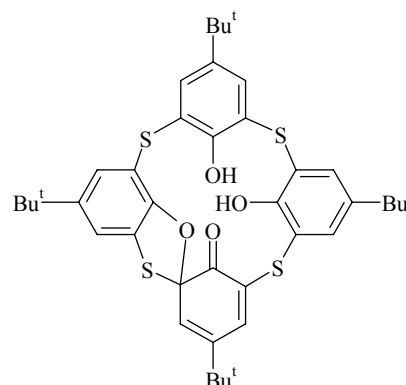


V práci byl navržen obecný postup pro přípravu *N*-alkylalloxanů založený na oxidaci *N*-alkylbarbiturové kyseliny oxidem chromovým (Schéma 1). Substituované barbiturové kyseliny byly získány kondenzací příslušné monoalkylmočoviny s kyselinou malonovou, resp. diethylmalonátem.

Využití spirosloučenin v chemii thiacalix[4]arenů

Autor: Kateřina Polívková
Ročník: 3.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Prof. Ing. Pavel Lhoták, CSc.

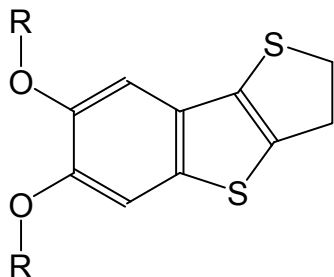
Cílem této práce je připravit spirosloučeniny thiacalixarenů, ze kterých lze následně dvoustupňovou syntézou připravit thiacalixareny s jednou hydroxylovou skupinou na spodním okraji substituovanou amino skupinou. Reakcí *p*-*tert*-butylthiacalix(4)arenu s chloraminem-T se nám podařilo získat nejen monospiro, ale v menším množství i dispiro sloučeniny. Proto je naší příští snahou změnit reakční podmínky tak, aby vznikala převážně dispirosloučenina. Spirosloučeniny jsme bohužel nezískali obdobnou reakcí s thiacalixarenem bez *tert*-butylových skupin na horním okraji. Při výměně hydroxy skupiny za amino skupinu bylo použito jako výchozí látky monospirothiacalixarenu. Problémem v této syntéze je mezistupeň, představovaný tvorbou hydrazonu, který se i přes stejné reakční podmínky nepodařilo vždy zopakovat.



Syntéza nových monomerů na bázi 6,7-dialkoxythieno-[3,2-b]benzothiofenu pro vodivé organické polymery

Autor: Jan Púchovský
Ročník: 2.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

V návaznosti na dřívější výsledky studia elektropolymerace různých thienobenzothiofenů a thienoindolu jsme navrhli rozšířit uvedenou skupinu o sérii 6,7-dialkoxy substituovaných thieno[3,2-b]benzothiofenů.



Cílem této práce bylo vypracovat syntézu vhodného meziprojektu, jehož derivatizací budou získány cílové materiály.

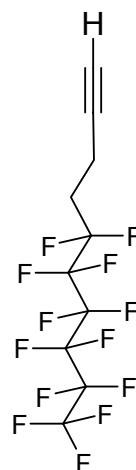
Studium cykloadičních reakcí polyfluorovaných alkynů.

Autor: Martin Schindler
Ročník: 3.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Předmětem mé práce je příprava polyfluoralkylovaných alkynů a studium jejich cykloadičních reakcí, vedoucích k substituovaným benzenům a cyklopentadienům.

Nejprve jsem připravil ethyn chráněný fenyldimethylsilylovou skupinou reakcí ethynylmagnesiumbromidu s chlor(fenyl)dimethylsilanem. Tento ethyn jsem reagoval s BuLi a poté s 2-(perfluorhexyl)ethyl-triflátem za vzniku odpovídajícího chráněného polyfluorovaného alkynu. Jeho reakce s Negishiho činidlem (Bu_2ZrCp_2) nevedla k odpovídajícímu zirkonacyklopentadienu. Deprotekcí tohoto alkynu KF jsem dále připravil odpovídající terminální polyfluoralkyn. V současné době studuji jeho alkylační reakce.

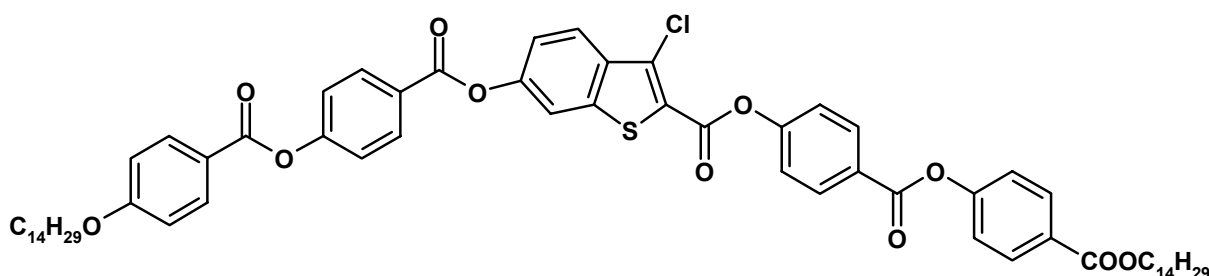
V teoretické části jsem porovnal pomocí *ab initio* a DFT výpočetních metod elektronové hustoty polyfluoralkylovaných alkynů na trojně vazbě v závislosti na délce nefluorované spojky.



Banánovité kapalně krystalové na bázi derivátů 3-chlor-6-hydroxybenzo[b]thiofen-2-karboxylové kyseliny

Autor: Petr Špaček
Ročník: 3.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

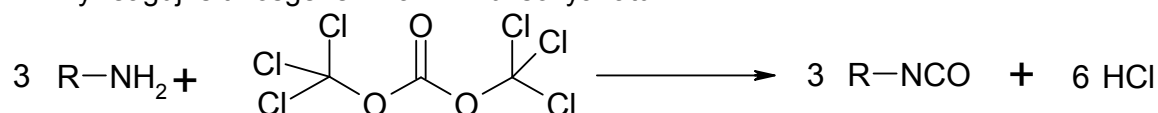
Cílem této práce je design a syntéza nových nesymetrických banánovitých kapalných krystalů, u nichž je jako centrálního jádra využita 3-chlor-6-hydroxybenzo[b]thiofen-2-karboxylová kyselina. Bude diskutována syntéza centrálního jádra i výstavba cílové struktury.



Studium přípravy isokyanátů z aminů pomocí trifosgenu

Autor: Zuzana Vobecká
Ročník: 3.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Mgr. Roman Holakovský, Ph.D.

Aminy reagují s trifosgenem za vzniku isokyanátů.



Při této reakci se trifosgen rozpadá na tři molekuly fosgenu a ten pak dále reaguje s aminem. Použití samotného fosgenu ($\text{Cl}_2\text{C=O}$) je nebezpečné a nepraktické, a proto se hledaly jeho náhrady. Naopak krystalická, stabilní pevná látka trifosgen ($\text{Cl}_3\text{C-O-C(O)-O-CCl}_3$) se přepravuje a skladuje jednoduše, díky její relativně nízké těkavosti nejsou nutná zvýšená bezpečnostní opatření a její množství se lépe odměřuje.

Vzhledem k tomu, že provedení reakce popsaná v literatuře se výrazně liší, cílem práce je optimalizovat reakční podmínky a rychlost reakce v závislosti na nich.

Reakci bychom rádi sledovali pomocí NMR spektroskopie, kterou si můžeme měřit sami, a jako alternativní způsob zjištění postupu reakce jsme zvolili IČ spektroskopii, kterou nám měří centrální laboratoře VŠCHT.

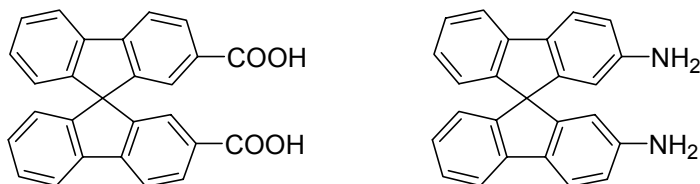
Substituent R je butyl, 2-butyl, *tert*-butyl, fenyl, benzyl, 3,5-bis(trifluormethyl). Získané poznatky budou dále využity pro přípravu isokyanátů z aminů na bázi binaftalenů, porfyrinů a calixarenů.

Sekce : Organická chemie II B

Syntéza derivátů 9,9'-spirobis(fluorenu)

Autor: Michal Buchta
Ročník: 3.
Ústav: Ústav organické chemie (ÚOCHB AV ČR)
Školitel: Ing. Petr Holý, CSc.

Konstrukci kovalentních čtvercových struktur je možno uskutečnit s využitím rigidních uzlových stavebních prvků, které nesou ortogonálně orientované funkční skupiny využitelné pro kovalentní propojení uzlů ve dvou kolmých směrech. Tyto požadavky splňují deriváty 9,9'-spirobis(fluorenu), jehož rigidní skelet v důsledku centrální spiroanelace orientuje aromatická jádra do dvou kolmých rovin. Úkolem práce bylo syntetizovat výchozí 9,9'-spirobis(fluoren) reprodukcí známých postupů a dále ověřit regioselektivitu substitučních reakcí především při disubstituci základního skeletu. Acetylací a následnou haloformovou reakcí byla připravena 2,2'-[9,9'-spirobis(fluoren)]dikarboxylová kyselina **1** a nitrací a redukcí nitroskupin 2,2'-diamino-[9,9'-spirobis(fluoren)] **2**.



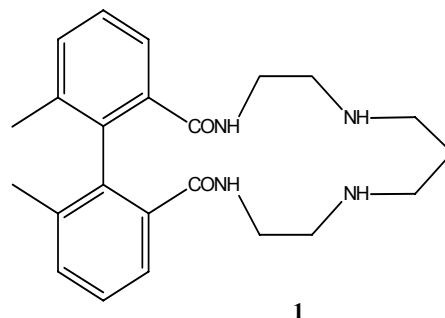
Ověření syntetické dostupnosti derivátů **1** a **2** v racemické formě je významné pro následné pokusy o jejich optické štěpení.

Axiálně chirální makrocyclické polyaminy

Autor: Kristýna Bürglová
Ročník: 3.
Ústav: Ústav organické chemie (ÚOCHB AV ČR)
Školitel: Dr. Ing. Jana Hodačová

Cílem práce je syntéza nových makrocyclických polyaminů obsahujících axiálně chirální biarylovou jednotku a studium jejich komplexačních vlastností.

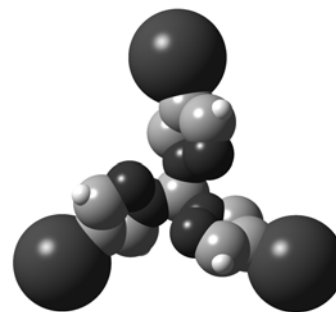
Jako první byl připraven makrocycklus **1** reakční sekvencí, která vychází z N,N'-bis(2-aminoethyl)propan-1,3-diaminu a kyseliny 6,6'-dimethylbifenyl-2,2'-dikarboxylové. Makrocycklus **1** byl syntetizován jak v racemické, tak opticky aktivní formě. Dále plánujeme redukci amidových skupin a studium komplexačních vlastností makrocyclického laktamu **1** a tetraaminu, který vznikne redukcí laktamu **1**.



Stavební bloky pro přípravu polyfluoralkylovaných tripyrazolymethanů.

Autor: Martin Holan
Ročník: 3.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Doc. Ing. Jaroslav Kvíčala, CSc.

Tripyrazolymethany jsou možnou alternativou cyklopentadienylových ligandů pro komplexaci kovů. Cílem mé práce je příprava polyfluoralkylovaných analogů tripyrazolymethanů jako nového typu fluorofilních ligandů. První varianta syntézy přes perfluoralkylované β -diketony nebyla úspěšná, protože enolát připravený z acetylacetonu nereagoval ani s 2-(perfluorhexyl)ethyljodidem, ani s reaktivnějším 2-(perfluorhexyl)ethyl-triflátem.



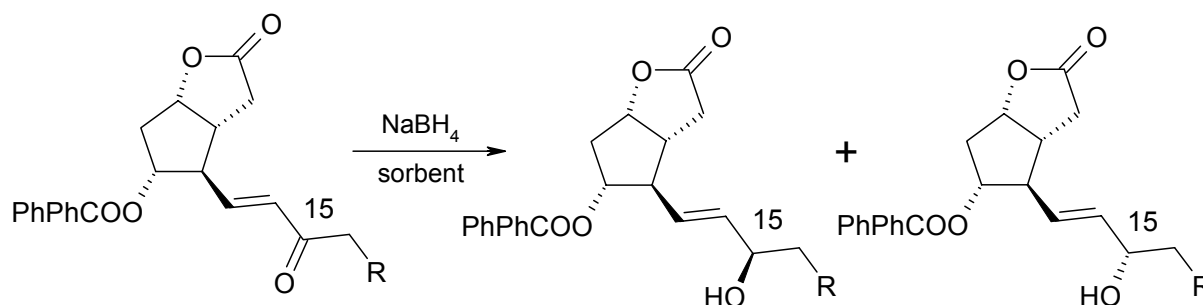
Druhá varianta vychází z funkcionalizace tripyrazolymethanů a následného couplingu katalyzovaného přechodnými kovy. Nejprve jsem podle publikovaných postupů připravil dva výchozí tripyrazolymethany. Jodace tripyrazolymethanu v přítomnosti $(\text{NH}_4)_2\text{Ce}(\text{NO}_3)_6$ poskytla tris(4-jodpyrazolyl)methan. V současné době studuji Heckovu reakci toho substrátu s (perfluorhexyl)ethenem a dalšími alkeny.

Jako první krok ke studiu této reakce pomocí *ab initio* a DFT metod jsem optimalizoval struktury několika jodovaných i nejodovaných tripyrazolymethanů.

Studium stereoselektivní redukce v syntéze prostanoidů

Autor: Eva Holečková
Ročník: 3.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Ing. Václav Kozmík, CSc.

V rámci společného projektu MPO našeho ústavu s firmou Nerapharm Neratovice na inovaci výroby prostanoidů byla studována stereoselektivní redukce C-15 oxoskupiny ve skeletu prostanoidů NaBH_4 na anorganických nosičích.

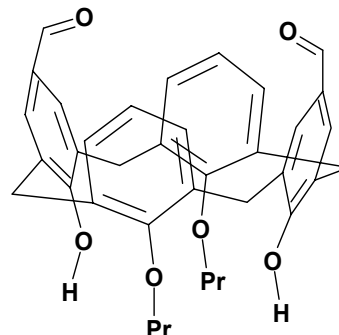


V patentové literatuře je uvedena neobvyklá stereoselektivní redukce tetrahydridoboritanem sodným v přítomnosti silikagelu. Mým úkolem bylo prověřit údaje patentovaných postupů a dále zkoumat vliv různých podmínek a nosičů na průběh této stereoselektivní redukce. Reakce byly prováděny nejen na meziproduktech synteticky vyráběných prostanoidů, ale i na ketonech připravených z výše uvedených enonů.

Příprava aromatických aldehydů a jejich modifikace

Autor: Martin Kotyza
Ročník: 3
Ústav: Ústav organická chemie
Školitel: Ing. Ondřej Kundrát

Tato práce je zaměřena na přípravu a modifikaci aromatických aldehydů, které jsou nepostradatelnými prekurzory pro další moderní organické syntézy (v naší laboratoři např. pro syntézy porfyrinů, jež jsou ceněny především díky svým unikátním komplexačním vlastnostem). Jedno- až několikastupňovými syntézami byly připraveny různě substituované aromatické aldehydy (včetně formylderivátů calixarenů), z nichž některé byly dále modifikovány. Změny byly s úspěchem prováděny jak na vlastní karbonylové funkci, tak i na řetězcích vázaných na aromatické jádro.



Nukleofilní adice na stericky bráněnou karbonylovou skupinu

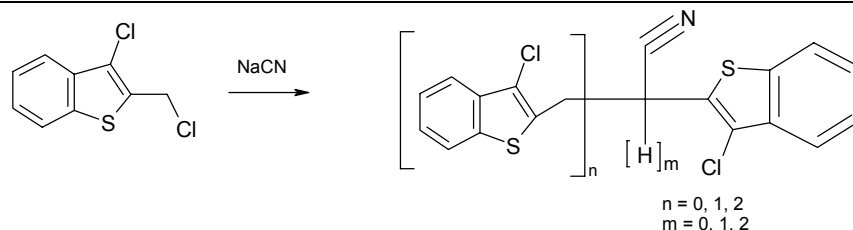
Autor: Michal Mészáros
Ročník: 2.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Ing. Svatava Voltrová, CSc.

Cílem práce je ověření průběhu Deckerovy oxidace u pyridiniových solí nesoucích v para poloze substituentu vázaného na dusík elektronakceptorní skupiny a studium reaktivity stericky bráněného karbonylu produktů. Oxidací 1-aryl-2,4,6-tetrafenylpyridiniových solí byly získány příslušné 1-aryl-2-benzoyl-3,5-difenylpyrroly, které byly podrobeny reakci s primárními aminy za tvorby příslušných iminů.

Vliv reakčních podmínek na kyanaci 3-chlor-2-chlormethylbenzo[5]thiofenu

Autor: Arnošt Seidler
Ročník: 3.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Ing. Václav Kozmík, CSc.

Při syntéze nových homologických amidů derivátů 2-(benzo[b]thiofen-2-yl)acetamidů, u nichž byl zkoumán jejich protizánětlivý popř. antiasmatický účinek v živém organismu, se vycházelo z methylesterů substituovaných benzo[b]thiofen-2-karboxylových kyselin. Při přípravě nových typů amidů byl překvapivě pozorován nestandardní průběh některých reakcí, např. reakce s kyanidovým aniontem.

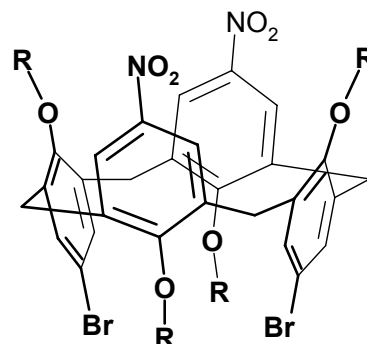


Cílem této práce bylo tyto nestandardní přeměny prověřit v závislosti na reakčních podmínkách.

Nová strategie syntézy distálních dinitroderivátů calix[4]arenu

Autor: Filip Šembera
Ročník: 3.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Ing. Jan Budka, Ph.D.

V naší laboratoři se mj. zabýváme designem a syntézou receptorů aniontů na bázi calix[4]arenu. Jako velmi efektivní se ukázaly distální bis(ureido) deriváty v 1,3-alternující konformaci. Základním problémem jejich syntézy je příprava dinitroderivátu, který se redukcí převádí na odpovídající diaminoderivát. Dinitroderivát se připravuje nitrací dialkylderivátu a následnou alkylací na 1,3-alternující dinitroderivát. První reakce probíhá s nízkým výtěžkem, druhá reakce poskytuje kromě 1,3-alternujícího derivátu také více než dvojnásobné množství částečně kónického – požadovaný produkt je nutno separovat pomocí sloupcové chromatografie.

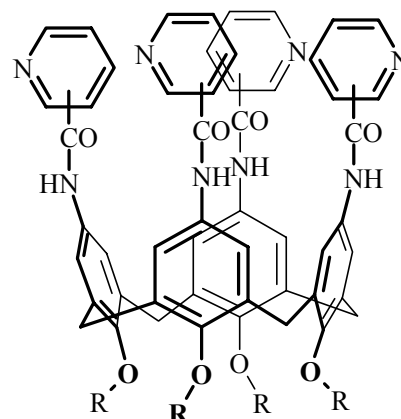


Nová strategie spočívá v přípravě distálního dibromderivátu (dvoustupňová syntéza s dobrými výtěžky, bez chromatografické separace), jeho nitraci na volných benzenových jádrech (viz obrázek) a následném odstranění bromu a redukcí nitroskupin na amin, pokud možno v jednom kroku. Tato syntéza zvýší dostupnost mnoha nových receptorů, zvláště, podaří-li se ji aplikovat i na obdobný kónický derivát.

Syntéza a výzkum vlastností nových derivátů calix[4]arenu

Autor: Oldřich Hudeček
Ročník: 0. (4. ročník MSŠCH Praha)
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Prof. Ing. Pavel Lhoták CSc.

Reakcí tetraaminocalix[4]arenů s pyridinkarboxylovými kyselinami vznikají amidy, jejichž NMR spektra jsou zásadně ovlivněna způsobem substituce pyridinového jádra. Zatímco deriváty 2- a 3- pyridinkarboxylových kyselin mají v NMR spektrech očekávanou C_{4v} symetrii, deriváty isonikotinové kyseliny vykazují komplikované NMR spektrum, naznačující jejich agregaci do složitějších supramolekulárních útvarů. V rámci předložené práce byly připraveny deriváty nesoucí dlouhé alkylové řetězce, které díky zvýšené rozpustnosti umožňují výzkum dynamického chování těchto látek v roztoku.



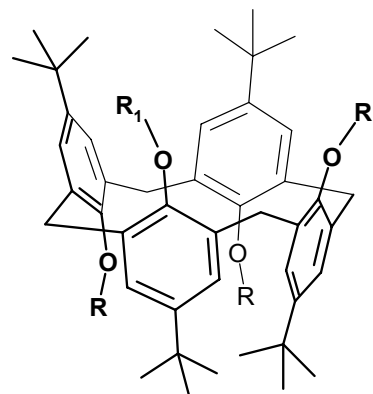
Sekce : Organická chemie I

Nová univerzální metoda syntézy 1,2-alternujících derivátů calix[4]arenu

Autor: Alexandra Bílá
Ročník: 4.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Ing. Jan Budka, Ph.D.

V rámci syntézy nových receptorů byla vyvinuta zcela nová metoda syntézy 1,2-alternujících derivátů *p*-*tert*-butyl-calix[4]arenu. Syntéza spočívá ve dvou krocích: (1) proximální dialkylace základního *p*-*tert*-butyl-calix[4]arenu a (2) následná druhá alkylation prováděná za specifických podmínek, které vedou k 1,2-alternujícímu produktu. První reakce byla optimalizována na 90 % výtěžek, pro druhou byla serií reakcí stanovena vhodná kombinace reakční doby, teploty, báze a rozpouštědla, která vede až k 80 % 1,2-alternujícího tetraalkylderivátu (viz obrázek). Syntéza je zcela univerzální, pro srovnání byly jako alkyly použity propyl, hexyl, benzyl a ethoxykarbonylmethoxy.

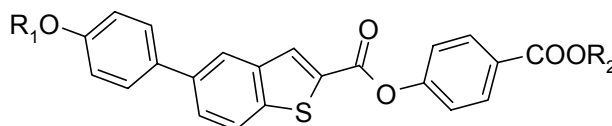
Připravený derivát byl *ipso*-nitrací a následnou redukcí převeden na tetraaminocalix[4]aren, který reakcí s isokyanáty poskytuje tetraureido-receptory, které jsou velmi vhodné a často využívané pro komplexaci aniontů.



Syntéza kapalných krystalů s benzothiofenovým centrálním jádrem

Autor: Adam Henke
Ročník: 5.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Prof. Ing. Jiří Svoboda, CSc.

V rámci přípravy a systematického studia kapalných krystalů lomeného tvaru byl v nedávné době zaveden nový, v těchto materiálech dosud nepoužitý benzothiofenový skelet jako centrální jádro. Jeho 2,6-substituované deriváty vykazovaly vznik nematické, smektické a u chirálních sloučenin vznik ferroelektrické fáze. V rámci našeho studia jsme navrhli a syntetizovali nové typy mesogenů s uvedeným centrálním jádrem, tentokrát odvozené od 2,5-disubstituovaného benzothiofenu, kde heterocyklická část je orientovaná vně zalomení.



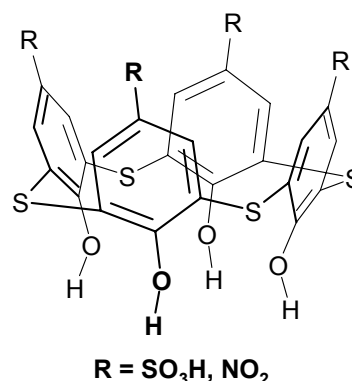
V tomto příspěvku budou prezentovány syntetické přístupy vedoucí k syntéze samotného vhodně substituovaného benzothiofenového jádra a následně pak k jednotlivým novým kapalným krystalům. Dále bude diskutováno mesomorfní chování nově připravených derivátů.

Metody syntézy nitroderivátů a sulfoderivátů thiocalix[4]arenu a chemie sulfonylcalix[4]arenu

Autor: Jiří Jirásek
Ročník: 5.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Ing. Jan Kroupa

Zatímco nitraci klasického calix[4]arenu lze provádět bez podstatných komplikací, v případě thiocalix[4]arenu dochází paralelně k nežádoucí oxidaci sulfidických můstků. Tím jsou možnosti nitrace thiocalix[4]arenu značně omezeny. Na druhé straně sulfonaci thiocalix[4]arenu lze provádět velmi snadno. K této reakci zcela postačuje koncentrovaná kyselina sírová. Snadný průběh této reakce umožňuje provádět i tzv. *ipso*-sulfonaci *terc*-butylové skupiny. Syntézy sulfoderivátů thiocalix[4]arenu lze využít i k nepřímé nitraci thiocalix[4]arenu, která spočívá v náhradě snadno odstupující sulfoskupiny za nitroskupinu.

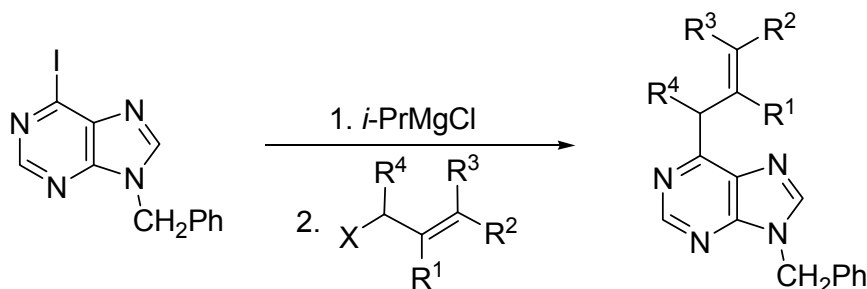
Můstkové atomy síry thiocalix[4]arenu lze podrobit celé řadě oxidačních reakcí, a to na sulfoxid nebo sulfon. Sulfonylcalix[4]aren se však významně liší ve své reaktivitě od thiocalix[4]arenu, takže alkylace hydroxyskupin v případě sulfonylcalix[4]arenu je omezena řadou specifických faktorů.



Nový přístup k syntéze 6-allyl purinových derivátů za Cu(I)-katalýzy

Autor : Martin Klečka
Ročník : 5.
Ústav : Ústav organické chemie
Školitel : Prof. Ing. Dalimil Dvořák, Csc.

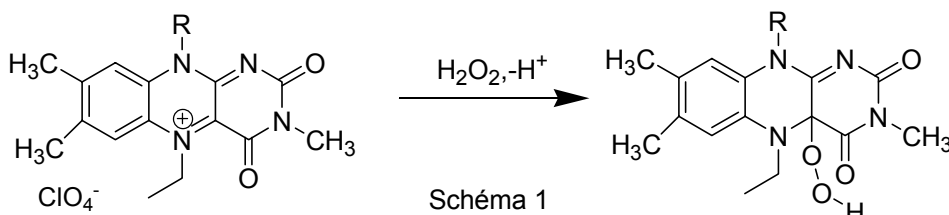
Mnoho strukturně modifikovaných purinových derivátů vykazuje významnou biologickou aktivitu sahající od antivirotik přes antineoplastika až po antileukemika. 6-Allylpurinové deriváty byly připraveny Cu(I)-katalyzovanou reakcí (9-benzyl-9H-purin-6-yl)magnesiumchloridu s allylhalogenidy. V některých případech je reakce prováděna allylovým přesmykem. V kyselém prostředí dochází k přesmyku dvojné vazby do konjugace s purinovým jádrem.



Amfifilní flaviniové soli jako katalyzátory oxidace sulfidů ve vodném prostředí

Autor: Lenka Marková
Ročník: 5.
Ústav: Ústav organická chemie
Školitel: Ing. Radek Cibulka, Ph.D.

Flavin-4a-hydroperoxid vystupuje jako univerzální oxidační činidlo v monooxygenasách, což inspirovalo řadu autorů k jeho využití v organické syntéze. V laboratorii lze flavin-4a-hydroperoxid generovat z příslušných 5-alkylflaviniových solí reakcí s peroxidem vodíku (Schéma 1). Po oxidaci substrátu flavin-4a-hydroperoxidem dochází k opětovnému obnovování flaviniové soli, která tak působí jako katalyzátor.



Flaviniové soli byly doposud testovány jako oxidační činidla v homogenních nevodných prostředích. V naší práci byly připraveny systémy tvořené amfifilními flaviniovými solemi zabudovanými v kationických či anionických micelách, které byly studovány jako katalyzátory oxidace sulfidů za mírných podmínek (laboratorní teplota, vodné prostředí).

Studium selektivity alkylačních reakcí vedoucích ke guaninovým derivátům

Autor: Martin Pluskal
Ročník: 5.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Doc. Ing. Igor Linhart CSc.

Atakem nukleofilních center v DNA vznikají takzvané DNA adukty, jejichž přítomnost může vést k chybě při transkripci nukleové kyseliny, která a v konečném důsledku může vést až ke vzniku rakovinného nádoru. Deriváty nukleových bazí, které vznikají odštěpením z takto modifikované DNA jsou vylučovány v moči a mohou být v ní stanoveny hmotnostní spektrometrií, k čemuž je ovšem zapotřebí autentických standardů.

Mezi nejvýznamnější adukty patří N7-alkylguaniny. Cílem mé práce je tedy porovnat selektivitu alkylací prováděných za pomoci modelových alkylačních činidel (butyl- a allylbromid) na vybraných prekursorech guaninu, tedy 2-amino-6-chlorpurinu, N²-(dimethylaminomethylen)guaninu, 7-methyl-10-oxo-9,10-dihydropyrimido[1,2-a]purinu, 2-[(N,N-dimethylaminomethylen)imino]-6-chlorpurinu, 5-acetyl-6,7-diacetoxy-5,6,7,9-tetrahydro-9-oxo-3H-imidazo[1,2-a]purinu, které lze po alkylaci převést hydrolýzou na guaninové deriváty. Selektivita alkylací byla srovnána s poměrem N7-H a N9-H isomerů prekursorů guaninu zjištěným kvantově chemickým výpočtem.

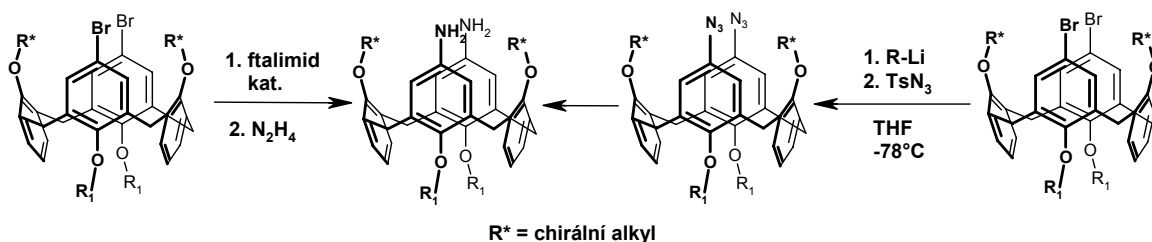
Nový způsob přípravy diaminocalix[4]arenu v 1,3-alternující konformaci

Autor: Veronika Raindlová
Ročník: 4.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Ing. Markéta Šimánová

Calixareny jsou velmi dobře známé makrocycly, používané jako receptory pro rozpoznávání kationtů, aniontů a neutrálních molekul. Efektivní silné interakce s anionty tvoří zejména bis-ureido deriváty v 1,3-alternující konformaci, které se staly předmětem našeho bádání.

Syntéza 1,3-alternujících diaminocalix[4]arenu není jednoduchá. Během procesu se objevují potíže s čištěním reakční směsi a produkt je získáván v relativně nízkých výtěžcích (méně než 20 %). Nová syntéza tedy vychází ze snadno dostupného 1,3-alternujícího dibromcalix[4]arenu, který je transformován na diamino derivát reakcí s ftalimidem v přítomnosti vhodného katalyzátoru (Cu, Cu₂O, CuI). Posledním krokem pro získání požadovaného diaminocalix[4]arenu v 1,3-alternující konformaci je reakce s hydrazinem.

Nyní se věnujeme dalšímu vhodnému způsobu zavedení aminoskupiny na bromderivát pomocí organokovových činidel a *p*-toluensulfonylazidu.



Syntéza a reakce 4-vinyloxepinu

Autor: Jan Scharff
Ročník: 5.
Ústav: Ústav organické chemie
Školitel: Doc. Ing. Igor Linhart, CSc.

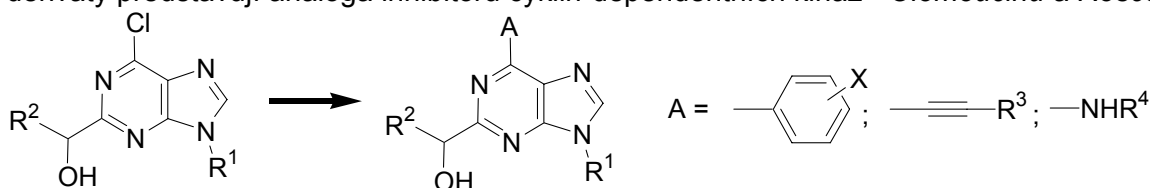
Oxepiny/arenoxidy jsou látky schopné ataku na nukleofilní centra DNA a proteinů. 4-Vinyloxepin /styren-3,4-oxid vzniká pravděpodobně biotransformací styrenu, obdobně jako fenyloxiran. Zatímco reaktivita fenyloxiranu je dobře známá, obtížně dostupný 4-vinyloxepin je prozkoumán pouze minimálně.

Cílem práce byla optimalizace obtížně reprodukovatelné syntézy (Birchova redukce, substituční a adiční bromace, epoxidace a eliminace) a samotné reakce 4-vinyloxepinu, především reakce s methyl-N-acetylcysteinátem jako model reaktivity *in vivo*.

Studium reaktivity substituovaných 6-chlor-2-hydroxymethylpurinů: Syntéza potenciálních inhibitorů cyklin-dependentních kináz.

Autor: Miroslava Šišková
Ročník: 5.
Ústav: Ústava organické chemie
Školitel: Prof. Ing. Dalimil Dvořák, CSc.

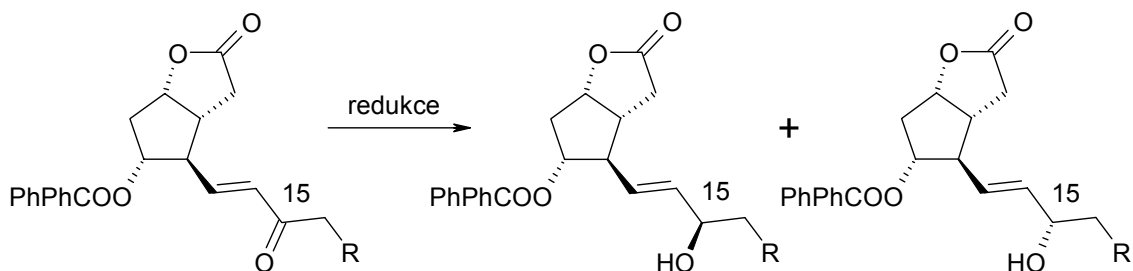
Substituované 6-chlor-2-hydroxymethylpuriny mohou být připraveny reakcí 9-substituovaných 6-chlorpurin-2-ylmagnesiumchloridu s aldehydy. Byla studována reaktivita těchto látek při Suzukiho reakci, Sonogashirově reakci a při nukleofilní substituci aminy. Takto připravené deriváty představují analoga inhibitorů cyklin-dependentních kináz - *Olomoucínu* a *Roscovitínu*.



Stereoselektivní redukce enonů v syntéze prostanoidů

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

V rámci spolupráce našeho ústavu s firmou Nerapharm Neratovice na inovaci výroby prostanoidů byla studována stereoselektivní redukce C-15 oxoskupiny ve skeletu prostanoidů.



Vzhledem k nárokům na stereoselektivitu redukce byl jako redukční činidlo zvolen komplex boranu s chirálním oxazaborolidinem. V příspěvku bude diskutována příprava vhodných katalyzátorů a průběh stereoselektivních redukcí.

Sekce: Organická technologie

Baeyer-Villigerova oxidace cyklických ketonů

Autor: Tomáš Floriš
Ročník: 5.
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Ladislav Kurc, CSc.

Baeyer-Villigerovou (B-V) oxidací se rozumí přeměna látky s karbonylovou skupinou na příslušný ester kyseliny. Substrátem tedy může být alifatický nebo cyklický keton nebo aldehyd, oxidačním činidlem peroxokyseliny nebo peroxid vodíku. Ten představuje ekologickou a ekonomickou alternativu peroxokyselinám. Oxidace peroxidem vodíku vyžaduje působení katalyzátoru. Ten dosud není průmyslově vyráběn, což omezuje praktické využití této reakce.

Cílem práce je testování heterogenních katalyzátorů, kterými jsou zeolity typu beta a MCM-41 modifikované cínem. Jejich příprava byla zajišťována externími pracovišti. Klíčovými problémy byla malá aktivita katalyzátorů pro B-V oxidaci, tedy vysoká koncentrace katalyzátoru v reakční směsi, nežádoucí rozklad H_2O_2 a omezená rozpustnost reagujících složek, tedy tvorba dvou kapalných fází.

Rychlost rozkladu H_2O_2 závisí na jeho koncentraci. Katalyzátor s největším počtem Lewisových center (KBC-1) byl deaktivován za přibližně stejných podmínek nejvíce. Rychlost rozkladu H_2O_2 v závislosti na čase nelze popsat jednoduchým mocninovým modelem. Katalyzátory se vzhledem ke kladným vysokým řádům reakce vlivem působení H_2O_2 pravděpodobně deaktivují. Katalyzátory beta „kočkolir“ byly pro B-V oxidaci cyklododekanonu zcela inaktivní. U reakčních systémů byla vyhodnocována rychlost reakce. Reakce probíhaly zpravidla vždy s nízkou konverzí selektivitou na lakton. Za daných reakčních podmínek jsou testované katalyzátory pro komerční použití zcela nevhodnými.

Zvýšení rychlosti hydrogenace styrenu periodickým dávkováním reakční směsi

Autor: Kateřina Frnochová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Doc. Ing. Vratislav Tukač, CSc.

Při průmyslové ethylenové pyrolýze vzniká kromě hlavních produktů – ethylenu a propylenu i pyrolýzní benzín. Před tím, než je pyrolýzní benzín dále zpracováván, je nutné provést hydrogenaci olefinů, které ho znečišťují, protože olefiny v pyrolýzním benzínu jsou nestálé, polymerují a tvoří smoly, které zanášejí zařízení a deaktivují katalyzátor.

Jako modelová reakce pro hydrogenaci olefinů byla vybrána hydrogenace 10 hm.% styrenu v toluenu na katalyzátoru 0,1% Pd/ Al_2O_3 ve tvaru kuliček o průměru 3 mm typu „egg shell“ v poloprovozním zkrápěném reaktoru. Poloprovozní zkrápěný reaktor je umístěn ve Výzkumné základně Chemopetrolu Litvínov a tam také veškerá měření proběhla. Modelová reakční směs o vstupní teplotě 30°C byla do reaktoru nastříkována kontinuálně nebo pulzně, zatímco vodík o tlaku 200 kPa proudil do reaktoru kontinuálně. Experimentů, které byly provedeny, bylo deset a lišily se parametry modulace nástřiku kapaliny - délkou periody a splitem.

Cílem této práce bylo naměřená data vyhodnotit pomocí programů Excel a Matlab. Určit vliv modulace nástřiku kapaliny na rychlost reakce a tedy výkon reaktoru, na průměrnou teplotu v loži reaktoru, na účinnost smočení povrchu katalyzátoru a na tlakovou ztrátu. Součástí hodnocení bylo též stanovit rychlostní konstantu deaktivace katalyzátoru v průběhu experimentů.

Vliv polohy a počtu methylových substituentů na pyrolýzu isoalkanů

Autor: Soňa Katreniaková
Ročník: 5.
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Lucie Starkbaumová

Cílem práce bylo studovat vliv polohy a počtu methylových substituentů na průběh pyrolýzy isoalkanů. Jako modelová řada látek byla zvolena skupina uhlovodíků se sedmi uhlíky v molekule, které jsou bohatě zastoupeny v benzinových surovinách a jsou komerčně dobře dostupné (methylderiváty o čistotě > 99,5 %). K analýze chování těchto uhlovodíků byla použita pyrolýzní plynová chromatografie. Touto technikou byly stanoveny distribuce primárních produktů (první generace produktů) pyrolýzy testovaných uhlovodíků. Experimenty byly vedeny při různých teplotách (700 a 815 °C) a dobách zdržení v reaktoru (průtok nosného plynu 50 – 250 ml.min⁻¹). Na základě naměřených distribucí primárních produktů byla odvozena reakční schémata pyrolýzy jednotlivých uhlovodíků. Jejich reaktivity byly porovnávány podle celkové konverze dosažené za standardních podmínek. Reaktivita těchto uhlovodíků rostla se zvyšujícím se počtem substituentů, což souvisí s rozdílnými typy uhlíků (primární, sekundární, terciální a kvartérní) a jejich množstvím v testovaných uhlovodících. Byl prokázán výrazný vliv počtu substituentů a jejich polohy na dosaženou konverzi výchozí látky i na distribuci produktů. S rostoucí rozvětveností molekuly například klesal výtěžek ethylenu a výtěžek propylenu byl negativně ovlivněn přítomností kvartérního uhlíku v molekule testovaného uhlovodíku.

Vliv velikosti částic aktivního kovu na stabilitu adsorbovaného komplexu

Autor: Jiří Švrček
Ročník: 5
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Petr Kačer Ph.D.,
Prof. Ing. Libor Červený, DrSc.

Katalytická reakce, interakce katalyzátor – substrát, je ovlivněna řadou faktorů, mezi něž neodmyslitelně patří strukturní vlivy, zejména vliv aktivního místa katalyzátoru a reagující molekuly. Na řadě platinových nosičových katalyzátorů lišících se svou velikostí aktivního kovu, byla detailně studována hydrogenační přeměna alkenických alkoholů – vzájemně se lišících polohou C=C terminální vazby a OH skupiny. Hlavním cílem práce bylo poukázat jednak na vliv molekulární struktury těchto substrátů a také na vliv velikosti částic aktivního kovu katalyzátoru na stabilitu adsorbovaného komplexu, který je jednou z klíčových struktur vznikajících při hydrogenační přeměně.

K interpretaci získaných výsledků byla použita experimentální data získaná z kinetických experimentů, která byla porovnávána s daty získanými teoretickými výpočty na bázi molekulárního modelování a to jak, vlastních adsorbovaných komplexů na heterogenních katalyzátorech, tak jejich vhodných teoretických aproximací (modelů). Získané výsledky umožnily nejen interpretovat uvedený molekulární strukturní vliv, ale především navrhnout model pro predikci chování dalších alkenických hydroxysloučenin na platinových nosičových katalyzátorech.

Iontové kapaliny v asymetrické katalýze

Autor: Ivana Černá
Ročník: 4.
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Lukáš Bartek, Ph.D., Doc. Dr. Ing. Petr Klusoň

Iontové kapaliny jsou považovány za alternativní rozpouštědla pro organickou syntézu. Důvodem jsou jejich možný pozitivní vliv na selektivitu řady reakcí a dále možnost vést homogenní katalytické přeměny za podmínek podobných heterogennímu uspořádání. Mezi jednotlivými molekulami působí silné coulombické interakce, které jsou příčinou jejich vysoké tepelné stability a nízké tenze par v širokém teplotním rozmezí. Zároveň vykazují zajímavé fázové chování jak v systémech s organickými rozpouštědly, tak s vodou a tím umožňují využití dvoufázových systémů. Nejzajímavější je ovšem možnost jemného nastavení jejich fyzikálních vlastností (rozpustnost, mísitelnost), díky které mohou být strukturně optimalizovány pro dané použití. V této úvodní studii byly použity dvě strukturně blízké iontové kapaliny imidazoliového typu jako potenciální reakční medium. Zvolenou modelovou reakcí je enantioselektivní hydrogenace methyl-3-oxobutanoátu na příslušné optické izomery methyl-3-hydroxybutanoátu na homogenním katalytickém komplexu Ru-BINAP. Aplikace tohoto druhu media umožňuje snadnou separaci produktu z reakční směsi extrakcí a zároveň stabilizaci a recyklaci jinak drahých homogenních katalyzátorů.

Katalyzátor pro reduktivní alkylaci 4-aminodifenylaminu acetonem

Autor: Šárka Jásenská
Ročník: 4.
Ústav: Ústav Organické technologie
Školitel: Doc. Ing. B. Dvořák, CSc.

Reduktivní alkylace 4-aminodifenylaminu(4-ADFA) acetonem je posledním ze syntézních stupňů průmyslově realizované technologie antioxidantu Duslox IPPD vyráběného slovenskou firmou Duslo Šala. Zmíněný typ antioxidantu je používán v gumárenské technologii k potlačení účinku UV-záření na stárnutí pryže. Reduktivní alkylace je účinně urychlována bifunkčním katalyzátorem na bázi mědi ESM 465 vyráběným firmou Eurosupport Litvínov. Kovová měď efektivně katalyzuje hydrogenaci dvojně vazby ketiminu vzniklého kysele katalyzovanou kondenzací 4-ADFA acetonem. Kyselé vlastnosti zajišťuje silikátový nosič katalyzátoru.

Podstatou této práce je cílenou modifikací nosiče katalyzátoru ESM 465 zvýšit jeho selektivitu především v reakci ke vzniku N,N-dialkylderivátu 4-ADFA. Již dříve realizované zvýšení selektivity přidavkem silně kyselého alumosilikátu bylo nahrazeno zvýšením kyselosti stávajícího nosiče úpravou jeho složení: změnou molárního poměru SiO₂/MgO a inkorporací železitě složky. Nově navržený katalyzátor označený ESM 467L by mohl nahradit dosud používaný měďnatochromitý katalyzátor od ruského dodavatele z Kemerova.

Optimalizace Canizzarovy reakce kuminaldehydu

Autor: Zdeněk Krpelík
Ročník: 4.
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Antonín Marhoul
Prof. Ing. L. Červený, DrSc.

Canizzarova reakce je obecně definována jako disproportionace aldehydů. Nejčastěji bývá popisována jako reakce benzaldehydu na kyselinu benzoovou a benzylalkohol, které se využívají jako výchozí látky pro další důležité reakce.

Cílem této práce bylo připravit kuminovou kyselinu, která by mohla být využita pro následnou přípravu další řady látek, z nichž nejdůležitější je vonná látka zvaná Mayol. Poměrně snadná cesta pro přípravu námi žádané kyseliny je právě Canizzarova reakce, kdy z kuminaldehydu je možné připravit právě žádanou kyselinu kuminovou a kuminový alkohol, které je možné následně oddělit destilací. Pro možné využití Canizzarovy reakce pro disproportionaci kuminaldehydu bylo nutné provést optimalizaci reakčních podmínek, zvláště pak nalézt vhodné rozpouštědlo.

Hydrogenace butyl-sorbátu pomocí Ru- katalyzátoru

Autor: Ivana Luštická
Ročník: 4.
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Eliška Leitmannová

Butyl-*cis*-hex-3-enoát může být jednou ze surovin pro přípravu jednoho z listových alkoholů, *cis*-hex-3-en-1-olu. Hydrogenace dienických sloučenin na jejich *cis*-hex-3-enové deriváty lze realizovat s použitím homogenního rutheniového pentamethylcyklopentadienylového polosendvičového komplexu, kde druhým ligandem je právě hydrogenovaná dienická látka. Hydrogenace butyl-sorbátu (butyl-*trans,trans*-hexa-2,4-dienoátu) na butyl-*cis*-hex-3-enoát byla realizována v homogenním a dvoufázovém (katalyzátor je rozpuštěn v polárním rozpouštědle a produkty v nepolárním) uspořádání. Z hlediska možného pozdějšího využití katalyzátoru v průmyslové praxi je vhodné homogenní katalyzátory převádět na heterogenní - heterogenizovat. Katalyzátor byl proto imobilizován s využitím iontové výměny na minerál montmorillonit K10 a takto imobilizovaný katalyzátor byl také použit pro hydrogenaci butyl-sorbátu.

Povrchové úpravy pomocí funkčních nanočástic

Autor: Magdalena Morozová
Ročník: 4. ročník
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Hana Bartková, Doc. Dr. Ing. Petr Klusoň

Tenké nanoskopické vrstvy na bázi kovových oxidů mohou při zachování vzhledu původního materiálu významně modifikovat jeho vlastnosti. Vysoký specifický povrch, uspořádaná struktura základních nanočástic, transparentnost, mechanická a chemická odolnost a především jasně definovaná a objektivně měřitelná funkčnost povrchově modifikovaného materiálu (fotony indukovaná samočistitelnost, antibakteriální účinnost, pozměněná smáčivost, schopnost filtrovat destruktivní UV záření, atd.) jsou vlastnostmi, které mohou být při správném

technologickém postupu „přeneseny“ na původní materiál. Ve své práci jsem se zabývala povrchovou modifikací umělého kamene a keramických dlaždic s cílem zvýšit jejich užité vlastnosti. Základním postupem pro vytváření těchto ochranných struktur byla postupná transformace kapalných kovových alkoxidů procesem sol-gel, zpravidla v prostředí micelárního vzoru a jejich kalcinační finalizace. U všech upravených povrchů byla sledována jejich samočistitelnost (fotokatalytický rozklad methylesteru kyseliny stearové) a pozměněná povrchová smáčivost.

Hydrogenace butylesteru kyseliny *p*-isopropylbenzoové

Autor: Petr Jansa
Ročník: 3.
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Antonín Marhoul
Prof. Ing. L. Červený, DrSc.

Mayol je vonná látka, která je na trhu velice žádaná, a studium její přípravy patří mezi prestižní záležitosti chemie vonných látek. V syntéze této vonné látky existuje více postupů, kterými je možné mayol připravit. Cílem této práce bylo ověřit schůdnost přípravy prekursoru (butylesteru 4-isopropylcyklohexankarboxylové kyseliny) mayolu z kyseliny *p*-isopropylbenzoové hydrogenačními reakcemi.

Před vlastní hydrogenací je nutné převést karboxylovou kyselinu na ester, aby nedocházelo k agresivnímu ataku katalyzátoru karboxylovou skupinou. Proto byl jako první krok připraven butylester *p*-isopropylbenzoové kyseliny azeotropickou esterifikací. Následně byla provedena hydrogenace benzenového jádra získaného esteru na niklovém katalyzátoru ($\text{Ni}/\text{Al}_2\text{O}_3$) při vysokém tlaku a teplotě. Směs získaná hydrogenací byla rozdělena rektifikací a vedlejší produkty byly stanoveny pomocí GC/MS.

Sekce: Výroba, analýza a využití léčiv

Laboratorní příprava práškové směsi pro výrobu tabletovaného léčiva lisováním

Autor: Hana Eliášová
Ročník: 5.
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Lucie Břenková

Jednou z cest výroby tablet je přímé lisování homogenní směsi účinné látky a pomocných látek. Při laboratorních experimentech, které jsou nutné pro návrh výrobního procesu, byla věnována pozornost dvoustupňové homogenizaci práškové směsi. Prvním stupněm homogenizace je triturace (smíchání účinné látky s malou částí pomocných látek), která probíhá ve válcovité nádobě s trojrozměrným otáčivým pohybem. Analýzou vzorků odebraných z různých míst homogenizované směsi kapalinovou chromatografií byla stanovena optimální frekvence otáček nádoby a doba triturace. Následovala vlastní homogenizace (smíchání triturační směsi s dalšími pomocnými látkami) v nádobě jehlanovitého tvaru, která se otáčí v šikmé poloze okolo své osy. Stejně jako u triturace byla i zde analyzována rovnoměrnost koncentrace účinné látky v homogenizované směsi. Ze získaných dat byl navržen kinetický model homogenizace, ze kterého vyplynulo, že účinnost mísení jedné otáčky nádoby je větší při nižší frekvenci otáčení a že je proto nutné současně optimalizovat dobu homogenizace a frekvenci otáčení nádoby.

Mivacurium – cholinergní blokátor: Vývoj stereoselektivního technologického postupu

Autor: Lenka Fricová
Ročník: 4.
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Petr Kačer, Ph.D.,
Prof. Ing. Libor Červený, DrSc.

Mivacurium představuje moderní cholinergní blokátor, který se používá jako jedna ze součástí moderní kombinované celkové anestézie. Myorelaxační účinky Mivacuria vyvolané bloádou ACh-receptorů zabraňují svalovým kontrakcím a zabezpečují tak nerušený chirurgický výkon. Mivacurium oproti ostatním farmakům z uvedené skupiny léčiv vykazuje krátkou dobu blokace ACh-receptorů, což umožňuje citlivé řízení myorelaxace, navíc postrádá řadu nežádoucích vedlejších účinků. Předkládaná práce se zabývá vývojem technologického postupu přípravy uvedeného myorelaxancia. Důraz byl kladen na optimalizaci klíčového výrobního stupně – asymetrické hydrogenace cyklického iminového skeletu. Tento krok byl řešen s využitím Ru(II)-komplexů „Noyoriho“ typu, jejichž přípravě, charakterizaci, kinetickému testování a následně jejich heterogenizaci byla věnována značná pozornost. Cílem optimalizačních experimentů bylo vyhodnotit a kvantifikovat celou řadu parametrů s klíčovým vlivem na stereoselektivní průběh reakce. Výsledkem uvedené činnosti bylo navržení výrobního postupu zahrnujícího asymetrickou transfer hydrogenaci na heterogenizovaném Ru-(II)-komplexu Noyoriho typu, který vykazuje dobrou aktivitu, vysokou stereoselektivitu a výtěžek. Jako vedlejší produkt řady optimalizačních experimentů byla získána řada poznatků, které jsou důležitým příspěvkem k popsání zatím neznámého reakčního mechanismu asymetrických hydrogenací na rutheniových komplexech „Noyoriho“ typu.

Studium segregace složek práškové směsi při výrobě tabletovaného léčiva

Autor: Jana Krulíková
Ročník: 4.
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Lucie Břenková

V současnosti je přímé lisování jedním z nejpoužívanějších způsobů výroby pevných lékových forem. Tento trend se rozvíjí díky pomocným látkám, které jsou dobře tekoucí a stlačitelné. Potenciálním problémem tohoto procesu může být segregace složek směsi, která zabraňuje vzniku a zejména stabilitě dokonale zhomogenizované práškové směsi. Proto cílem této práce bylo vyvinout metodu testování sklonu sypkých směsí k segregaci. Experimenty probíhaly ve speciální segregační cele upevněné v laboratorní třepačce. Vzorky směsí byly analyzovány vysokotlakou kapalinovou chromatografií. Byl testován vliv různých poloh segregační cely na hlavní mechanismus průběhu segregace účinné látky ve směsi. Těmito mechanismy jsou perkolace (propad částic), fluidizace (vznos částic) a adheze (přilnavost). Při pokusech s vertikálním upevněním cely docházelo k akumulaci účinné látky v její horní části segregačním mechanismem fluidizace, naopak při horizontálním upevnění k segregaci perkolací. U všech experimentů byl prokázán silný vliv adheze na stěny cely. Vyvinutou metodikou byly hodnoceny také uměle připravené binární směsi obsahující vždy účinnou látku a jednu z pomocných látek. Nejvýraznější tendence k segregaci byla pozorována u směsi složek, které mají největší rozdíl v distribuci velikosti částic.

Vývoj nové neinvazní diagnostiky bronchiálního astmatu

Autor: Kamila Syslová
Ročník: 4.
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: Ing. Petr Kačer Ph.D.

Včasná diagnostika *asthma bronchiale* 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 záležitostí. Analýza dechového kondenzátu je poměrně novou metodou, která představuje alternativní cestu, kterou je možné charakterizovat jako zcela neinvazivní a i pro dětského pacienta nezatěžující. Princip metody spočívá v kvantifikaci specifických látek - „biomarkerů“ pro uvedené onemocnění vyskytujících se v kondenzátu vydechaného vzduchu. Koncentrační hladina biomarkerů je v důsledku probíhající zánětlivé reakce v dýchacích cestách a plicích významně zvýšena.

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 těchto specifických látek. Vypracovaná metoda může být charakterizovatelná vysokou citlivostí, nízkou chybou stanovení (<15%) a vysokou reprodukovatelností a v neposlední řadě je možné konstatovat, že uvedená metoda je připravena pro další rozšíření pro paralelní stanovení dalších biomarkerů obsažených v dechovém kondenzátu v jediné analýze, stejně jako v sobě zahrnuje možnost přípravy „bio-chipu“ pro rutinní, časově nenáročné stanovení konkrétního biomarkeru pro rychlou a včasnou diagnózu celé řady plicních onemocnění.

Solvatomorfie dihydroergotamin vinanu

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

Dihydroergotamin patří do skupiny námelových alkaloidů. Je to farmaceutická látka – antidepressivum, která je podobně jako řada dalších námelových alkaloidů produkována parazitickou houbou paličkovcím nachovou (*Claviceps purpurea*). Námelové alkaloidy jsou známé svou neselektivní afinitou k různým typům receptorů (např. dopaminový, serotoninový).

Zabýváme se solvatomorfií dané látky, což je schopnost látky tvořit krystaly zabudováním molekul rozpouštědla do struktury. Z farmaceutického hlediska je hledání solvatomorfních sloučenin důležitým úkolem, neboť různé solvatomorfy mohou mít rozdílný farmakokinetický profil a biologické účinky.

Krystaly ergotaminu připravujeme krystalizací z alkoholů a jejich strukturu vyhodnocujeme pomocí RTG difrakce monokrystalů. Dosud známá krystalová struktura vinanu dihydroergotaminu je nepřesná, molekuly rozpouštědla se nepodařilo lokalizovat. Cílem práce je zmapovat distribuci molekul různých rozpouštědel v rozsáhlých kavitách uvnitř dané struktury.

Ve struktuře vinanu dihydroergotaminu methanol solvátu byly lokalizovány molekuly methanolu ve dvou pozicích s poloviční okupací. Molekula vinanu dihydroergotaminu ethanol solvátu je v této době zpracovávána. Monokrystaly, vhodné pro rtg strukturní analýzu, krystalizované z jiných vyšších alkoholů se prozatím nepodařilo připravit.

Strukturní analýza a charakterizace oxetinů

Autor: Petr Kolář
Ročník: 5.
Ústav: Ústav chemie pevných látek
Školitel: prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc.

Při vývoji nové farmaceutické aktivní substance a finální lékové formy je nedílnou součástí výzkumu znalost krystalové struktury zkoumané látky**. V krystalové struktuře léčiva se odrážejí jeho vlastnosti jako např. bod tání, habitus, stabilita, rozpustnost, farmakokinetický profil nebo biodostupnost. Velice důležitá je také znalost absolutní konfigurace na asymetrických uhlících. Dva různé enantiomery, případně racemická směs mohou mít odlišné (mnohdy i fatální) farmaceutické účinky, příklad Thalidomidu**.

Skupina oxetinů představuje farmaceuticky účinné substance používané k léčbě stresové močové inkontinence, depresivních poruch, poruch pozornosti s hyperaktivitou a neuropatických bolestí. Cílem práce bylo popsat absolutní konfiguraci na asymetrických uhlících ve strukturách *N*-Me-duloxetinu a *N*-benzyl-atomoxetinu. Navíc jsme se pokusili změnou krystalizačních podmínek najít další polymorfní formy těchto látek. K identifikaci a charakterizaci byla použita RTG strukturní analýza na monokrystalu a RTG prášková difrakční analýza.

** Chem. Listy 88, 628-635, 1994

Chem. Listy 96, 330-335, 2002

Využití technik stereoskopické vizualizace pro zobrazování výsledků RTG strukturní analýzy

Autor: Vojtěch Šádek
Ročník: 3.
Ústav: Ústav chemie pevných látek
Školitel: Dr. Ing. Michal Hušák

Člověk, který vidí dobře oběma očima, vidí prostorově, protože mozek je schopen odhadovat hloubku ze dvou mírně odlišných dvojrozměrných obrazů přijímaných z obou očí. Pro pochopení struktury komplikovaných objektů, kterými jsou například i molekuly je výhodné tohoto efektu nazývaného stereoskopická vizualizace vhodně využít.

Cílem práce je počítačová aplikace napsaná v jazyce C++ umožňující různé metody stereoskopického zobrazení molekul, získaných jako výsledek rentgenové strukturní analýzy.

Nejdříve se musí data načíst ze souborů formátu CIF, následně dopočítat případně chybějící údaje a transformovat do kartézských souřadnic. Grafický výstup je potom vytvářen v prostředí OpenGL a GLU s využitím extenze pro mimoobrazovkové vykreslování do textur a skriptováním na grafickém procesoru. V programu jsou implementovány následující techniky umožňující 3D stereoskopické zobrazení: anaglyph, aktivní 3D výstup, prokládaný obraz, projekce technologií Infitec a Sharp 3D stereo monitor.

Program by měl sloužit jako ukázka implementace některých stereoskopických zobrazovacích technik, k porovnání rychlostí a výsledků různých technik a také bude použitelný třeba jako pomůcka při navrhování modifikací léčiv a při výuce krystalografie.

Atorvastatin, nejprodávanější lék na světě

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

Atorvastatin je aktivní farmaceutická substance ze skupiny statinů. Inhibuje klíčový krok syntézy cholesterolu v lidském těle a řadí se tak mezi hyperlipidemika.

Vycházela jsem především z pořadí nejprodávanějších léků, ve kterém je atorvastatin podle agentury IMS Health na prvním místě již od roku 2001. Důvodem je stále se zhoršující životní styl „zemí západního světa“. Světový prodej Lipitoru za rok 2005 činí 12,9 miliard USD. Lipitor je originální lék firmy Pfizer, ale po vypršení patentové ochrany se na trhu objevily další léky s atorvastatinem jako aktivní substancí, tzv. generika.

Patenty chrání jak jednotlivé možnosti syntézy, tak i polymorfy atorvastatinu, kterých je okolo 40.

Farmaceutický průmysl se stále více orientuje na hledání nových možností syntézy a nových polymorfů již existujících substancí vzhledem k nejistotě investice při vývoji nových léků. Tento jev je aktuálně ještě podpořen očekávaným vypršením patentových ochran řady léků v letech 2006–2007.

Méně rozpustné soli lisuridu

Autor: Hana Marková
Ročník: 4.
Ústav: Ústav chemie pevných látek
Školitel: Ing. Jan Čejka, Ph.D.

Lisurid je semisyntetický námelový alkaloid používaný mimo jiné jako antiparkinsonikum. Při léčbě Parkinsonovy choroby se lisurid používá v první fázi tohoto onemocnění. V organismu působí jako agonista D1 a D2 dopaminových receptorů. Pro terapii je výhodné používat agonisty s delším poločasem rozpadu, proto je cílem práce připravit méně rozpustnou sůl lisuridu.

Optimalizace biodostupnosti zlepší účinek lisuridu, prodlouží dobu jeho užívání a oddálí se tak DOPA terapie, která přináší řadu vedlejších účinků.

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

V rámci práce se prozatím podařilo připravit monokrystaly soli kyseliny hydroxy naftoové. Výsledky a interpretace rentgenové strukturní analýzy budou součástí prezentace.